

勾配ベクトル コメンタール

(ccfonts, eulervm フォントパッケージを利用してみた。)

久島広幸 (h2@hisasima.jp)

2022年4月29日

概要

勾配ベクトルの性質（特徴？）を簡単にまとめる。勾配ベクトルの性質は、ベクトル解析はもとより、Lagrange（ラグランジュ）の未定乗数法の直感的な理解にも応用できる^{*1}。本稿では、n 次元空間ベクトルから話を始めて、最後に3次元と2次元の空間での議論に至るという道筋をとる。3次元と2次元の空間は直観的なイメージが湧かせやすい一方で、日常経験にあわせた特殊な言葉遣い（例えば「等高線」や「ベクトルのなす角 θ」）などがあって、それらは n 次元の場合にまで拡張しにくい。したがって、説明を n 次元からにし、特殊な用語は3次元と2次元のところで個別に説明してみることにした。

1 n 次元直交座標空間

1.1 座標と点

n 次元直交座標空間は、n 個の、「独立でおたがいに直交する」座標軸から構成される空間である（独立、直交ということばの意味は、次の節で述べる）。ここでは、各々の座標軸を、 X_1, X_2, \dots, X_n であらわすことにする。そして、各座標軸上で勝手な実数値を取ることができる変数をそれぞれ x_1, x_2, \dots, x_n とあらわすこととする。各座標軸上での値、すなわち、 x_i の値を $x_i = p_i$ と定めることによって、n 次元座標空間内での点 P がひとつ決まる。それを $P(p_1, p_2, \dots, p_n)$ と書く^{*2}。

1.2 n 次元ベクトル

通常のベクトルの定義と同様に、n 次元直交座標空間内に「大きさと向き」をもった量を考え、それに n 次元ベクトルという名前をつける。文脈において誤解が生じなければ、ただ単にベクトルと言ったりもする。ベクトルは a のようにあらわされたり、 \overrightarrow{PQ} とあらわされたりする。

ベクトルは、各座標軸へ射影することができる。それらを各座標軸の成分という。この成分については、その射影の向いている方向が座標軸の値の増加の向きであれば大きさに正を、反対の向き（減少の向き）であれば大きさに負を与える。こうすることによって、成分だけからベクトルの向きをあらわすことができるようになる。明示的に成分を記す必要がある場合には

$$a = \overrightarrow{(a_1, a_2, \dots, a_n)}$$

と書く。2つの点 $P(p_1, p_2, \dots, p_n), Q(q_1, q_2, \dots, q_n)$ から作られるベクトルの成分は

$$\overrightarrow{PQ} = \overrightarrow{(q_1 - p_1, q_2 - p_2, \dots, q_n - p_n)}$$

となる。この考え方を利用すれば、点 P を座標原点からのベクトルと捉えることができる。これを位置ベクトルと呼び

$$\overrightarrow{OP} = p = \overrightarrow{(p_1, p_2, \dots, p_n)}$$

^{*1} Lagrange（ラグランジュ）未定乗数法については [1] というノートを書いた。

^{*2} 一見関数のように見えるのだけれど、これはただ空間内の点をあらわすものとして捉え、特別な働き（例えば p_i であらわされる引数すべてを加えて2倍して3で割った値を返す、というような関数的な振る舞い）を持たないものとする。文字数と記号の種類が有限なので、数学表現ではいささかの混雑は避けられない。

などのように書いたりする。どの形式を使うかは、時と場合と解きたい問題次第である。

□ 内積

2つのベクトル $\mathbf{a} = \overrightarrow{(a_1, a_2, \dots, a_n)}$ と $\mathbf{b} = \overrightarrow{(b_1, b_2, \dots, b_n)}$ について、「 \cdot 」という記号を使って

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

とあらわしたものを、ベクトルの内積と呼ぶ（内積の定義である）する^{*3}。 a_i, b_i それぞれはみなただの実数であるから、結果はただの実数である。また、実数は掛け算の順序に無頓着であるから

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$$

というように、順序を交換しても等しいことがわかる。

ベクトルの自分自身との内積は、この内積の定義から

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2$$

であり、実数の性質から、かならずゼロまたは正の値をとることがわかる（ゼロの値になるには、 a_i 全てがゼロ、すなわち、ゼロベクトル 0 のときのみである）。そこで、ベクトルの大きさを $|\mathbf{a}|$ と書くことにして^{*4}次のように取り決める：

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2}.$$

したがって、内積を使って

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$$

ともあらわせるのである。

□ ベクトルの向き（方向）と、直交と平行と

ベクトルの実数倍（スカラー倍とも言われる）は、各成分に同じ数をかけることとして定義される。すなわち、 $\mathbf{a} = \overrightarrow{(a_1, a_2, \dots, a_n)}$ のとき、 k を実数として

$$k\mathbf{a} \equiv \overrightarrow{(ka_1, ka_2, \dots, ka_n)}$$

と定義されるということである。

いま、 $k > 0$ であるとして、 $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ とあらわせるとき、ベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} は「同じ向きである」「同方向である」ということにする。そして、 $\mathbf{b} = -k\mathbf{a}$ のときには、「逆向きである」「反対方向である」という。向きと方向を区別する言葉遣いもあるけれども（「方向は同じで向きが違う」「向きが異なるが方向は同じ」というように）、本書ではそれは採用せず、「向き」と「方向」は同じものであるとする。この定義から明らかなように、 $|k\mathbf{a}| = |-k\mathbf{a}| = |k||\mathbf{a}|$ である。このような同方向または逆方向の関係にあるベクトルを、簡略化して $\mathbf{a} \parallel \mathbf{b}$ と書くことがある。

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$ つまり \mathbf{a} と \mathbf{b} の内積が 0 になるときには、そのベクトルどうしは「直交している」といわれることがおおい^{*5}。この直交関係も、 $\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$ という記号を使ってあらわされることがある。

^{*3} 内積の書き方には色々な流儀がある。代表的なものとしては $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ が挙げられよう。

^{*4} $\|\mathbf{a}\|$ という記号も使われることがある。こちらの記号では、大きさというよりノルムといわれることが多いようだ。

^{*5} 2次元や3次元のイメージからのアナロジーであろう。

□ 単位ベクトル, 独立, 射影

各座標軸にベクトルの考え方を適用して, 座標軸ごとに正の方向を向く大きさ 1 のベクトルを考える. X_i 軸でのこのベクトルを \hat{e}_i とあらわすことにすれば, それぞれは

$$\begin{aligned} X_1 : \hat{e}_1 &= \overrightarrow{(1, 0, 0, \dots, 0)} \\ X_2 : \hat{e}_2 &= \overrightarrow{(0, 1, 0, \dots, 0)} \\ &\dots \quad \dots \\ X_i : \hat{e}_i &= \overrightarrow{(0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)} \\ &\dots \quad \dots \\ X_n : \hat{e}_n &= \overrightarrow{(0, 0, \dots, 0, 1)} \end{aligned}$$

という成分を持つことになる. すべての \hat{e}_i において $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_i = 1$ つまり大きさ $|\hat{e}_i|$ が 1 なので, これらを座標軸上の単位ベクトルという.

各単位ベクトルの成分を覗むと, 例えば \hat{e}_3 をその他の座標軸上の単位ベクトル \hat{e}_i (ただし i は 3 以外) の線型結合 (1 次結合) から作り出すことは不可能であることがわかる. この事柄を, 「各座標軸上の単位ベクトルは, 線形独立 (一次独立) である」という. また, 座標軸に視点を移して, 各座標軸は独立であるともいう. さらに成分の内容と内積の定義から,

$$\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

となっている^{*6}. このことから, 異なる座標軸上の単位ベクトル \hat{e}_i と \hat{e}_j の内積は 0, つまり直交する関係にある. 座標軸に視点を移せば, 各座標軸が直交しているということを物語っている.

ここで導入した, 各々が線型独立で直行している単位ベクトルの集合 $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \dots, \hat{e}_n\}$ を「正規直交基底ベクトル (の集合)」と呼ぶ. 「基底」という言葉の意味合いは, この単位ベクトルを用いることによって, この n 次元直交空間の一般のベクトル v が, そしてすべてのベクトルが

$$v = \overrightarrow{(v_1, v_2, \dots, v_n)} = \hat{e}_1 v_1 + \hat{e}_2 v_2 + \dots + \hat{e}_n v_n = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i v_i$$

とあらわすことができるからである. この表現形式から明らかなように

$$v_i = \hat{e}_i \cdot v$$

となる. このようにその座標軸の単位ベクトルと内積を取れば, その座標軸についてのベクトルの成分がわかる. この行為を, 射影を取る, といったりもする.

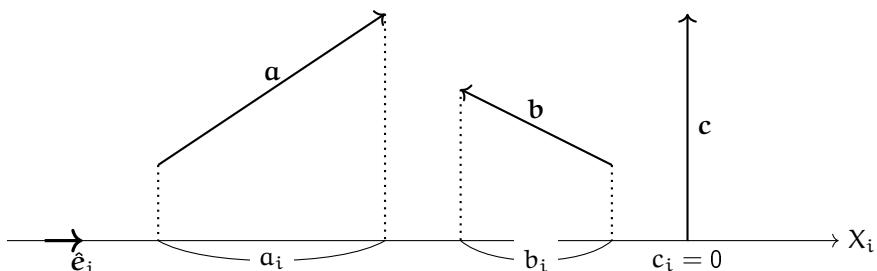


図 1: X_i 軸への射影の例. ここでは X_i 軸は右方向を増加する方向としているので, $a_i > 0$, $b_i < 0$ である. c は X_i 軸と直行している例で, その射影成分 c_i は 0 であることを示した.

^{*6} δ_{ij} は「クロネッカーのデルタ」といわれる簡便記号で, 意味はここに書いた通りである.

1.3 n 変数関数

n 次元直交座標空間の各点に何らかの量を対応させる関数を考える。

n 次元直交座標空間内の点は、 n 個の座標軸それぞれの上での値を決めるこことによって、その位置がひとつに定まる。それら各座標軸上の値は、各々独立に勝手な値を取ることができる。そのような様々な点に対する関数の振る舞いを考える場合には、点を変数化しておくことが常道である。したがって、あるひとつの点を $P(x_1, x_2, \dots, x_n)$ であらわすこととし、関数名をとりあえず f とすれば、関数の働きのイメージは

$$f : P \longmapsto f(P)$$

とあらわせる。点の座標成分を強調したい時には

$$f : (x_1, x_2, \dots, x_n) \longmapsto f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

とあらわしてもいいだろう。また、位置ベクトル $x = \overrightarrow{(x_1, x_2, \dots, x_n)}$ をもちいることにすれば

$$f : x \longmapsto f(x)$$

のように簡便に書きあらわせる。

このように、 n 個の変数を必要とする関数を、 n 変数関数と呼ぶ。留意すべきところは、座標軸はそれぞれ独立であったことから、各変数 x_i もみな独立であるということである。

では、関数として、どのような量をその点に対応させるのだろうか？典型的なものは、何らかの数を対応させる関数であろう。他にも、各点に様々な次元のベクトルを対応させるというのも考えられる。各点に k 次元空間を対応させることも無理ではない。関数というものは、これらの対応を妨げるものではない^{*7}。

2 勾配ベクトル (gradient vector)

2.1 勾配ベクトル

n 次元直交空間の各点に「数値」が散りばめられている状況を想像しよう。各点のその数値を与える関数を $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ または位置ベクトルをつかって $f(x)$ と書くこととする^{*8}。働きとしてなんらかの「数値」を返す関数は、スカラー (scalar) 関数と呼ばれる。したがって、この f もスカラー関数である。「空間」を前面に出したいときには、スカラー場という言葉を使うときもある。スカラー場をあらわす関数 f というような言い方もある。なお、これから考える関数は、とりあえず「健康的」な関数であるとする。連続で偏微分可能（すなわち全微分可能）であるとのする。取り扱いの困る病的な関数は相手にしないことにしておく。

さて、この n 変数関数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ に対して、各変数 x_i での偏導関数を成分とするベクトルを「勾配ベクトル (gradient vector, または縮めて gradient)」と呼ぶ：

$$(勾配ベクトル) = \overrightarrow{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)} = \hat{e}_1 \frac{\partial f}{\partial x_1} + \hat{e}_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + \dots + \hat{e}_n \frac{\partial f}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

簡便性を求めて、 ∇ という演算子^{*9}を導入する。その実態は

$$\nabla = \overrightarrow{\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)} = \hat{e}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{e}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + \hat{e}_n \frac{\partial}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$$

である。演算子であるから、実際に関数に働きかけて実体化される。 f に働きかけた場合の記法は次の通りである：

$$\nabla f = \overrightarrow{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)} = \hat{e}_1 \frac{\partial f}{\partial x_1} + \hat{e}_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + \dots + \hat{e}_n \frac{\partial f}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

^{*7} そこから面白い物理的事実や数学的事実、または、経済的事実などが浮かび上がることがあるかもしれない。

^{*8} 2つの使い分けはいい加減である。

このような記号をと記法を用いて、スカラー関数 f の勾配ベクトルが ∇f とあらわされる^{*10}.

ここまで表記では、勾配ベクトルは「座標変数で関数化」されているが、その実態は、 n 次元直交座標空間の各点ごとに存在しているベクトルなのである。各点での勾配ベクトルは、スカラー関数が与えられれば直ちに求められる。たとえば、3次元の場合のスカラー関数 $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ の場合では

$$\nabla f = \overrightarrow{(2x, 2y, 2z)}$$

と勾配ベクトルは座標変数で関数化された形でもとめられ、各点個別には座標変数に座標値を代入して、たとえば

$$\begin{aligned} \text{点 } (0, 0, 0) \text{ での勾配ベクトル} &= \nabla f|_{(0,0,0)} = \overrightarrow{(0, 0, 0)}, \\ \text{点 } (1, 2, 3) \text{ での勾配ベクトル} &= \nabla f|_{(1,2,3)} = \overrightarrow{(2, 4, 6)}, \\ \text{点 } (-5, -3, 3) \text{ での勾配ベクトル} &= \nabla f|_{(-5,-3,3)} = \overrightarrow{(-10, -6, 6)} \end{aligned}$$

という形で存在するのである。

2.2 スカラー関数の全微分

$x \rightarrow x + \Delta x$ と変化したときの f の変化分は $\Delta f = f(x + \Delta x) - f(x)$ である。多変数関数のテーラー展開を使うと（テーラー展開は所与とされたい）

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) &= f(x) + \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \Delta x_n \right\} + \sum_{i=1}^n O((\Delta x_i)^2) \\ &= f(x) + \{\Delta x \cdot \nabla f\} + \sum_{i=1}^n O((\Delta x_i)^2) \end{aligned}$$

となり、 $\Delta \rightarrow d$ という極限をとれば $O((\Delta x_i)^2) \rightarrow 0$ であるから、スカラー関数 f の変化分を df として

$$df = f(x + dx) - f(x) = dx \cdot \nabla f$$

が得られる。これが、全微分^{*11} である。勾配ベクトルと、座標変数の微小変化ベクトル (dx) との内積であらわされるところがおもしろい。

2.3 勾配ベクトルの向き

上で見たように、スカラー関数 f の全微分は $df = dx \cdot \nabla f$ であたえられる。このとき、 df が最大になるのはどのようなときだろうか？

^{*9} 作用素という言い方もする。使い分けの指針を筆者は知らない。

^{*10} その昔は $\text{grad } f$ と書かれた。

^{*11} 他に、方向微分（方向導関数）という概念と計算操作もあるようだ。それは通常、スカラー関数 f の勾配ベクトル v との内積

$$v \cdot \nabla f = v_1 \frac{\partial f}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + \cdots + v_n \frac{\partial f}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^n v_i \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

であらわされ、「 f の v 方向の微分」「 f の v 方向の導関数」などとよばれる。しかしながら、私はまだこの考え方を消化できていない。なぜこの概念が必要なのか、必要とされる動機は何なのか理解できていない。さまざまな方向での導関数を考えたいというところにあるのだろうか？だとすれば、それはどのような局面で必要になるのか。ものの本では、多変数関数の微分では

1変数の微分を n 個組み合わせて n 次元の量としてを定義する方法（全微分）と、多変数関数においてある方向のみを取り出しその方向における「曲線」についてから微分を適用する方法（方向微分）がある。

と説明されているのだが、理解までもう少しなのである。

ちなみに、方向微分の考えを基本にすると、 v としてベクトル dx を使えば

$$dx \cdot \nabla f = dx_1 \frac{\partial f}{\partial x_1} + dx_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + \cdots + dx_n \frac{\partial f}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^n dx_i \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

となる。つまり dx 方向の微分が全微分になる、という考え方が採用されるようである。やはり、消化しにくいか。

ベクトルの内積と大きさの関係について、シュワルツの不等式から、

$$|\mathbf{d}\mathbf{x} \cdot \nabla f| \leq |\mathbf{d}\mathbf{x}| |\nabla f|$$

がなりたち^{*12}

$$\mathbf{d}\mathbf{x} = \frac{|\mathbf{d}\mathbf{x}|}{|\nabla f|} \nabla f \quad \text{または} \quad \mathbf{d}\mathbf{x} = -\frac{|\mathbf{d}\mathbf{x}|}{|\nabla f|} \nabla f$$

のとき、 $|\mathbf{d}f| = |\mathbf{d}\mathbf{x} \cdot \nabla f|$ が最大になる。つまり $\mathbf{d}\mathbf{x}$ と ∇f が同じ向きか逆向きのときに $|\mathbf{d}f|$ が最大になるのである。これは、点 \mathbf{x} が勾配ベクトルと同じ向き、または、逆向きに変化する場合が、 f の変化の絶対値が最大になる場合である、ということを言っている。

では、 f の変化の絶対値 $|\mathbf{d}f|$ が最大とはどういうことか。 $|\mathbf{d}f| = \pm df$ であるから、 f が最も激しく増加するか (+ の場合)、最も激しく減少するか (- の場合) のどちらかということと解釈できる。しかばら、 $\mathbf{d}\mathbf{x}$ と ∇f の向きが同じ時が増加で逆の時が減少なのだろうか？ここまでとのところでは、これを決定する要因がみあたらない。したがって、 ∇f と $\mathbf{d}\mathbf{x}$ が同じ向きのときは、 df が正つまり f が最も激しく増加する場合であると決めることにする。それゆえ、 ∇f と $\mathbf{d}\mathbf{x}$ が逆向きのときは、 df は負で f が最も激しく減少する場合になる。

さてでは、 df が 0 になるのはどのようなときか？もはや明らかなように、 $\mathbf{d}\mathbf{x} \cdot \nabla f = 0$ つまり、変位の方向が勾配ベクトルと直交しているときには、関数の値は変化しないのである。3次元空間でいえば、等高線上を歩いている場合に相当するのだ。等高線上を歩いているのだから、高さは変化しないよね。

2.4 「等高点集合」と直交関係

スカラー関数 f が返す値を、次の形のように、 y という従属変数で受け取ることを考える：

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(\mathbf{x})$$

さてここで、 y が特定の値 y_1 を取るとする。その場合、 $y_1 = f(\mathbf{x})$ を満たす変数 \mathbf{x} を集めてくることが可能であろう。それらを集めたものを $Y_1 = \{\mathbf{x} \mid y_1 = f(\mathbf{x})\}$ というように集合であらわす。 $y = y_2$ や y_3, y_4, \dots の場合も同様にする。こうすることによって、スカラー関数 f の返す値ごとに

$$\begin{aligned} y_1 &\longmapsto Y_1 = \{\mathbf{x} \mid y_1 = f(\mathbf{x})\} \\ y_2 &\longmapsto Y_2 = \{\mathbf{x} \mid y_2 = f(\mathbf{x})\} \\ &\dots \\ y_i &\longmapsto Y_i = \{\mathbf{x} \mid y_i = f(\mathbf{x})\} \\ &\dots \end{aligned}$$

という分類が可能になる。通常は（解析的な関数を扱うことがおおいので） y は連続量である。もちろん f の働き次第では、離散的になる場合もある。ともあれここで重要なことがらは、 n 次元直交空間内の点 \mathbf{x} を、 f が返す値ごとに分類できるということである。この集合ひとつひとつ、つまり y をある y_i という定数に固定したときのこの集合を「等高点集合」と呼ぶことにする。この名称は、地図上の等高線から勝手に拝借したもので、一般的な単語ではない^{*13}。

等高点集合 $Y_i = \{\mathbf{x} \mid y_i = f(\mathbf{x})\}$ において、 y_i は分類の定数であるから、その全微分は 0、すなわち

$$dy_i = \mathbf{d}\mathbf{x} \cdot \nabla f = 0$$

となる。内積が 0 となっているので、 $\mathbf{d}\mathbf{x}$ と勾配ベクトル ∇f は直交していることがわかる。つまり、この等高点集合が作る図形（それは n 次元空間の「曲線」と言っていいと思うのだが、はたしてそれは 3 次元まででイメージできる曲線と同様なものなのだろうか？）と勾配ベクトルは、どこの等高点においても常に直交しているのである。

^{*12} 付録 A にその証明を記した。

^{*13} ひととものによっては、「スカラー場の分布」という言葉を使いもあるようだ。

3 3次元, 2次元での表現例

n 次元空間の図やグラフを書き記すのは不可能であるが、1次元, 2次元, そして3次元までならばなんとかイメージできるものがある。そこで、ここでは、3次元までという限定をして、スカラー関数、勾配ベクトルの図形的意味合い（幾何学的意味合い）について記してみようと思う。

とにかく一番扱いやすいのは2次元のスカラー関数の場合である。なぜそうなのかはおいおいわかる。1次元のスカラー関数は、ベクトルの表現がややこしい。そもそも1次元のベクトルって、描きにくいんだよねえ。3次元は、等高点までならなんとか書ける。

3.1 2次元のスカラー関数

2次元直交座標空間のスカラー関数 $f(x, y)$ を考える。このスカラー関数の図形的表示の代表的なものには2種類ある。ひとつは、全てを連続的に表現することは諦めて、適当な幅での等高点集合を考えて、それを等高線として2次元直交座標空間上に記すというものである。2次元だから等高点を結ぶと、曲線になるのである。もうひとつは、少しづつをして、3次元直交座標空間空間を借用するものである。つまり、スカラー関数の値 $f(x, y)$ を、点 (x, y) の上に立てるというものである。2次元直交座標空間上に直行するもう一つの次元を使ってあらわすというものである。勘違いしてはいけないことは、この $f(x, y)$ はあくまでも2次元直交座標空間上にのみ存在しているスカラー関数（スカラー場）であって、3次元直交座標空間にまで広がっているものではない、ということである。ものによっては、勾配ベクトルがあたかも3次元直交座標空間内ベクトルであるような図が書かれていることがあるが、それは間違いである。定義からしても、勾配ベクトルは2次元でしかありえないものである。イメージを喚起するための便法であると捉えるが良い。

等高線のその点での接戦と直行するというのが、幾何学的意味である。なぜならば、等高線の上では、変位もその等高線上になければならず、結果、等高線上で「右」に行っても「左」にいっても等高線を逸脱することはできない。それゆえ、等高線上ではつねに関数値は変化しないので $dx \cdot \nabla f = 0$ なのである。 dx は ∇f と垂直なのである。

勾配ベクトルが、 f の増加する方向をむいているということは、具体的な図からあきらかなのではないかな。

3.2 3次元のスカラー関数

等高点の集合は、曲面になる。 $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ 4次元直交座標空間を借用しての描写は、われわれのこの3次元空間では無理である。

3.3 1次元のスカラー関数

2次元直交座標空間を借用しての描写は可能。というか、それは初期の1変数関数の描写なのであった。すなわち $y = f(x)$ 。

4 勾配ベクトルが作るベクトル場 — ポテンシャル

ここまでのことからは、スカラー関数 f を使って、 n 次元直交空間上の点に ∇f という n 次元ベクトル（勾配ベクトル）を与えるというものであった。それによって、各点にベクトルが散りばめられたのである。このように、空間上の各点にベクトルが散りばめられている状況を、ベクトル場といったりする。そして、勾配ベクトルで与えられるベクトル場の場合には、その勾配のもとになるスカラー関数を「ポテンシャル」「ポテンシャル関数」といったりする。本稿で利用してきた関数 f のことである^{*14}。

*14 さてではその逆、つまり、ベクトル場があるときには、必ずポテンシャル関数は存在するのであろうか。通常の意味でベクトルの外積が定義できるのは、3次元空間と7次元空間であることが知られている。そして、3次元空間であるならば、 $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ （すなわち \mathbf{A} の回転 $\text{rot } \mathbf{A}$ がゼロベクトル）が、 $\mathbf{A} = \nabla f$ となるポテンシャル関数 f が存在するための必要十分条件であることが知られている。

なお、物理方面では、 $-f$ のことをポテンシャルと呼ぶことが多い。なぜ、わざわざマイナス（ $-$ ）を付加するのか？^{*15} 勾配ベクトルの向き（2.3 節）のところで見たように、 ∇f と dx がおなじ向きのとき、スカラー関数の増分 df は最大になるのであった。そして通常は、 dx の向きとしては、 x （点の位置ベクトル）が大きくなる方向が正の向きであるとするものである。そして物理は、 df が減少する方向を好むのである。「高い方」から「低い方」に向くことを好む（位置エネルギーがその良い例である）。したがって、勾配ベクトルもスカラー関数の減少が最大となるものにしたい。そしてそれは $-\nabla f$ であった。 $-\nabla f = \nabla(-f)$ であるから、 $-f$ のことをポテンシャル関数と呼ぶようにしたのである^{*16}。

^{*15} 「仕事」という物理概念の理解が必要であるが、山本著『物理入門』[2] の 75 ページの説明には「なるほど」と噫らされる。

^{*16} なかんずく、無限に遠いところ（すなわち $x \rightarrow \infty$ ）で $f(x) = 0$ であるべし、ということが要請されることもおおい。これらへんについては物理の話になるので、また別途どこかで。

付録 A シュワルツの不等式^{*17}

A.1 シュワルツ不等式の基本の形

シュワルツの不等式

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) \geq \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 \quad (\text{ここでは, } a_i, b_i \text{ ともに実数であるとする}) \quad (\text{付録 A.1})$$

の有名な証明のひとつをここに書いておく。

証明.

x が実数であるとすれば, $a_i x - b_i$ も実数であるから $(\sum_{i=1}^n (a_i x - b_i)^2) \geq 0$ でなければならない。この括弧をほどけば

$$\sum_{i=1}^n (a_i x - b_i)^2 = \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) x^2 - 2 \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right) x + \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) \geq 0$$

である。この式は、実数 x についての 2 次式が常に 0 かまたは 0 より大きいということを述べている。したがってこの式の判別式は 0 以下でなければならないことになる。なぜならば、判別式が 0 より大きいときは、 x には 2 つの実数解があることになり、それは取りも直さず 2 次式が負になる状態があるということだからである（2 次関数のグラフを思い出せ）。判別式を計算すると

$$(\text{判別式}) = \left(-2 \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right) \right)^2 - 4 \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) = 4 \left\{ \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 - \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) \right\}$$

となるので、

$$(\text{判別式}) \leq 0 \iff \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 - \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) \leq 0 \iff \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right) \geq \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2$$

となり、シュワルツの不等式が導かれる。 \square

証明は整ったが、等号が成立する場合を少し掘り下げてみよう。等号は判別式が 0 のときに成り立つ。そしてそれは、2 次関数の例を引くなら、下向きの 2 次関数の頂点が x 軸に接するということ他ならない。つまり、もとの 2 次式が 0 ということである。そのような状況を作り出す x を、変数の表記と区別するために X として、もとの 2 次式に適用すると

$$\sum_{i=1}^n (a_i X - b_i)^2 = 0$$

であり、これは

$$\text{全ての } i \text{ について } a_i X - b_i = 0$$

言い換えれば

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \cdots = \frac{b_n}{a_n} \quad (= X) \quad (\text{付録 A.2})$$

ということになる。対応する成分どうしの比が等しいときに等号が成立するのである。

*17 英語表記は Schwarz inequality。また、コーシー＝シュワルツの不等式 (Cauchy-Schwarz inequality)、コーシー＝ブニャコフスキ＝シュワルツの不等式 (Cauchy-Bunyakowski-Schwarz inequality) と言われることもある。なお、以下の証明については、太田の本 [3] が参考になった。

ベクトル記法

シュワルツの不等式を n 次元直交空間のベクトル（成分はすべて実数）とその内積であらわすことも可能である。いま 2 つのベクトルとその成分を

$$\mathbf{a} = \overrightarrow{(a_1, a_2, \dots, a_n)}, \quad \mathbf{b} = \overrightarrow{(b_1, b_2, \dots, b_n)}$$

と記し、ベクトルどうしの内積を「 \cdot 」と書くことにすれば

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = |\mathbf{a}|^2 = \sum_{i=1}^n a_i^2, \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{b}|^2 = \sum_{i=1}^n b_i^2, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

とあらわせるので^{*18}、シュワルツの不等式は

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 \quad \text{や} \quad |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 \quad \text{とか} \quad |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2$$

というふうに記述することができる。そして、ベクトルの性質を利用して、次のような証明を紡ぎ出すことも可能である。

証明.

ベクトル \mathbf{c} を

$$\mathbf{c} := \mathbf{a} - \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b} \quad (\text{付録 A.3})$$

とすれば

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b} \cdot \left(\mathbf{a} - \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b} \right) = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$$

となり、 \mathbf{b} と \mathbf{c} は「直交」することが導き出せる。また (付録 A.3) から $\mathbf{a} = \mathbf{c} + (1/|\mathbf{b}|^2)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{b}$ とあらわせるので、

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \left(\mathbf{c} + \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b} \right) \cdot \left(\mathbf{c} + \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b} \right) = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} + 2 \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}) + \frac{1}{|\mathbf{b}|^4} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 (\mathbf{b} \cdot \mathbf{b})$$

\mathbf{b} と \mathbf{c} は直交するのだったから $\mathbf{c} \cdot \mathbf{b} = 0$ ゆえ

$$= \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} + \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2$$

である。 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \geq 0$ だから、結局のところ

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} \geq \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 \iff (\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 \iff |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2.$$

□

等号は、 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} = 0$ すなわち $\mathbf{c} = 0$ のときであることは明らか。そして \mathbf{c} の定義から、 $\mathbf{c} = 0$ ということは、 \mathbf{a} と \mathbf{b} が平行であるということになる。平行ということを式で書けば、 $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ ということである (k は 0 意外の任意の実数定数。 $k = 0$ のときは $\mathbf{b} = 0$ となってしまうので興味はない)^{*19}。

見方を変えると、この不等式は $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ のときに $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2$ は最大になるということを主張しているものとも読める。そして、 $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ の絶対値をとることによって、その最大値を与える k は

$$|\mathbf{b}| = |k\mathbf{a}| \quad \therefore |\mathbf{b}| = |k||\mathbf{a}| \quad \therefore |k| = \frac{|\mathbf{b}|}{|\mathbf{a}|} \quad \therefore k = \pm \frac{|\mathbf{b}|}{|\mathbf{a}|}$$

*18 $|\mathbf{a}|$ はベクトル大きさを示すもので、ノルムともいう。ノルムの定義は、ここで述べているように $|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{\sum a_i^2}$ である。 $\|\mathbf{a}\|$ と書かれることもある。

*19 先の証明で見た等号条件は、 $b_1/a_1 = b_2/a_2 = \dots = b_n/a_n$ であった (付録 A.2)。また $\mathbf{a} = k\mathbf{a}$ ということは、成分で書けば $(b_1, b_2, \dots, b_n) = k(a_1, a_2, \dots, a_n) = (ka_1, ka_2, \dots, ka_n)$ ということだから $k = b_i/a_i$ となって、同じ内容を示している。

ということになる。再び $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ であったことを思い出せば

$$\mathbf{b} = \frac{|\mathbf{b}|}{|\mathbf{a}|}\mathbf{a} \quad \text{または} \quad \mathbf{b} = -\frac{|\mathbf{b}|}{|\mathbf{a}|}\mathbf{a} \quad (\text{付録 A.4})$$

すなわち

$$\frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|} = \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \quad \text{または} \quad \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|} = -\frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \quad (\text{付録 A.5})$$

のとき^{*20} に $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2$ は最大になって、 $|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2$ と等しくなることが判明したのである。

3次元2次元のベクトルの場合

3次元と2次元のベクトルにおいては、幾何学的に2つのベクトルのなす角 θ ($0 \leq \theta \leq 2\pi$) というものが導入できて、それをもとにベクトルの内積が

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \theta$$

と定義できた。これを両辺自乗することによって

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 = |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \cos^2 \theta$$

となり、 $0 \leq \cos^2 \theta \leq 1$ であるから

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 \leq |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2$$

となって、シュワルツの不等式が導出できる。等号は、 $\cos \theta = 1$ すなわち $\theta = 0$ または $\theta = \pi$ のときで、やはりこれは \mathbf{a} と \mathbf{b} が平行であることを意味している。

A.2 2乗を省いたシュワルツ不等式の形

$\sum a_i^2$ と $\sum b_i^2$ は共に正の数であるから

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \left(\sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2} \right)^2, \quad \sum_{i=1}^n b_i^2 = \left(\sqrt{\sum_{i=1}^n b_i^2} \right)^2$$

と書き表すことができる^{*21}。また

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 = \left| \sum_{i=1}^n a_i b_i \right|^2$$

である^{*22}。したがってシュワルツ不等式の基本の形(付録 A.1)は

$$\left(\sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2} \right)^2 \left(\sqrt{\sum_{i=1}^n b_i^2} \right)^2 \geq \left| \sum_{i=1}^n a_i b_i \right|^2$$

と変形できて、おののがすべて正の数であることから2乗を外すことが可能で

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n b_i^2} \geq \left| \sum_{i=1}^n a_i b_i \right|$$

*20 ちなみにこれは、大きさが 1 のベクトルである。一般に $\mathbf{v}/|\mathbf{v}|$ は大きさ 1 のベクトルになる。なぜならば、自分自身との内積を取れば

$$\frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} \cdot \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^2} = 1$$

となるからである。

*21 $A > 0$ のとき、 $A = (\sqrt{A})^2$ 。

*22 B が実数ならば $B^2 = |B|^2$ 。

となる。

この結果をベクトル記法にあてはめると^{*23}

$$\sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} \sqrt{\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}} \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| \quad \text{または} \quad |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| \quad (\text{付録 A.6})$$

である。

等号条件はそのまま $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ ($k \neq 0$) で変わらないことはあきらか。また、 $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|$ が最大になるときの条件も(付録 A.4), (付録 A.5) であることも、あきらかであろう。

A.3 三角不等式

$(|\mathbf{a}| + |\mathbf{b}|)^2 = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2|\mathbf{a}||\mathbf{b}|$ である。ここでシュワルツの不等式(付録 A.6)の結果 $|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|$ を使えば

$$|\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \geq |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|$$

となる。いっぽうで

$$|\mathbf{a} + \mathbf{b}|^2 = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{a} + \mathbf{b}) = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

であり、一般に $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| \geq \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ であるから^{*24}、上の2式を組み合わせて

$$|\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| \geq |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad \therefore (|\mathbf{a}| + |\mathbf{b}|)^2 \geq |\mathbf{a} + \mathbf{b}|^2$$

が得られる。さらに $|\mathbf{a}| + |\mathbf{b}|$ と $|\mathbf{a} + \mathbf{b}|$ ともに正の数であるから2乗を取り除いて最終的に

$$|\mathbf{a}| + |\mathbf{b}| \geq |\mathbf{a} + \mathbf{b}|$$

という「三角不等式」という名前で著名な結果が得られる。

等号はどのようなときに成り立つだろうか？

$$\begin{aligned} A &= (|\mathbf{a}| + |\mathbf{b}|)^2 = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \\ B &= |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \\ C &= |\mathbf{a} + \mathbf{b}|^2 = |\mathbf{a}|^2 + |\mathbf{b}|^2 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \end{aligned}$$

として上の理路をまとめると

$$A \geq B \geq C$$

であるという流れであった。まず $A \geq B$ において等号が成り立つとき、つまり B が最大となる時は、シュワルツの不等式の証明のところで見たように $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ のときであり、そのとき

$$|\mathbf{a}||\mathbf{b}| = |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| = |\mathbf{a} \cdot k\mathbf{a}| = |k||\mathbf{a}|^2$$

であった。さて $B \geq C$ においては、特段 B が最大値でなくても良くて、その最大値以下の「天井（上限）」が存在すればよい。けれども、 $B \geq C$ を導いた条件 $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| \geq \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ はどのような \mathbf{a}, \mathbf{b} でも成り立つのだから、 B の最大値を導き出す $\mathbf{b} = k\mathbf{a}$ の場合でも成り立たねばならない。そしてこのとき

$$\begin{aligned} |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| &= |\mathbf{a} \cdot k\mathbf{a}| = |k||\mathbf{a}|^2 \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= \mathbf{a} \cdot k\mathbf{a} = k|\mathbf{a}|^2 \end{aligned}$$

であるから

$$|k||\mathbf{a}|^2 \geq k|\mathbf{a}|^2 \quad \therefore |k| \geq k$$

*23 復習する。 $|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2}$ であり。 $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| = |\mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1 + \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2 + \cdots + \mathbf{a}_n \mathbf{b}_n|$ である。

*24 これは何のことではなくて、 $S = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ とすれば、ベクトルの内積 S は実数。したがって、実数に対する通常の不等式 $|S| \geq S$ が成り立つのである。

であることになる。ここから、等号が成立するには

$$|k| = k \quad \therefore k > 0$$

ということになる。つまり、等号が成り立つときは、 \mathbf{a} と \mathbf{b} は同じ向きを向いているときなのである^{*25}。もちろんそのときには

$$|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}| = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

である。

^{*25} 平行というだけではだめで、平行かつ向きも同じということ。 \mathbf{a} と \mathbf{b} が一本のレールの上で同じ向きに向かっていることを想像すれば、幾何的にも納得がいく結論である。

参考文献

- [1] 久島 広幸. 『Lagrange の未定乗数法 コメンタール』. file://Users/hisasima/Local/Docs/method-of-Lagrange-multiplier/paper.pdf (tbc), 2015/2.
- [2] 山本 義隆. 『物理入門』. 駿台文庫株式会社, 1989. (第 6 刷 (1989) を参照した).
- [3] 太田 浩一. 『ナブラのための協奏曲』. 共立出版, 2015.

目次

1	n 次元直行座標空間	1
1.1	座標と点	1
1.2	n 次元ベクトル	1
1.3	n 変数関数	4
2	勾配ベクトル (gradient vector)	4
2.1	勾配ベクトル	4
2.2	スカラー関数の全微分	5
2.3	勾配ベクトルの向き	5
2.4	「等高点集合」と直交関係	6
3	3 次元, 2 次元での表現例	7
3.1	2 次元のスカラー関数	7
3.2	3 次元のスカラー関数	7
3.3	1 次元のスカラー関数	7
4	勾配ベクトルが作るベクトル場 — ポテンシャル	7
付録 A	シュワルツの不等式	9
A.1	シュワルツ不等式の基本の形	9
A.2	2乗を省いたシュワルツ不等式の形	11
A.3	三角不等式	12