2019/04/12

藪友良

微分について

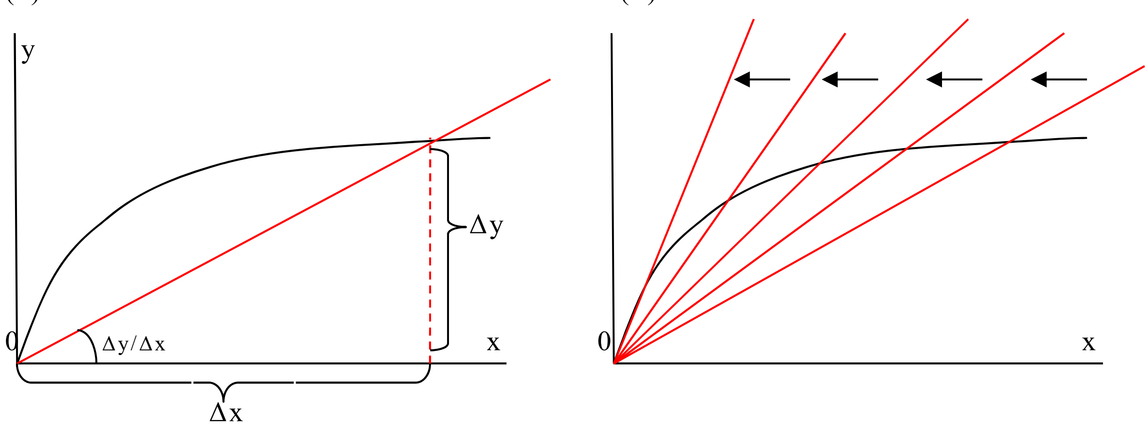
ある値 x に対して、ある値 f(x)を対応させる仕方を 1 変数の関数といいます。たとえば、f(x)=4+2x、$f(x)=3x^2$ は、変数 x を f(x)に対応させる仕方を示しており、1 変数の関数の例となります。

微分とは、関数 f(x)の接線の傾きであり、f'(x)や df(x)/dx と表記されます。換言すると、微分は「x を微小に変化させたとき、f(x)がどれだけ変化するか」を表します。

ここで y=f(x)としましょう。図 A-1(a)では、y=f(x)を描いています。図をみると、x が増えると y も増加しますが、その増加幅は少しずつ減少する関数であることが分かります。ここで原点 0 から、x はΔx だけ変化すると、y はΔy だけ変化するのが分かります（Δx は x の変化量、Δy は y の変化量を表す記号と考えてください)。そして、図 A-1(a)において、Δx を底辺、Δy を高さとした三角形の傾きは、Δy/Δx となります。ここで図 A-1(b)のように、底辺 Δx をどんどん小さくしていくと、三角形の傾き Δy/Δx は、原点 0 で評価した接線（関数 f(x)の傾き）に近づいていくことが分かります。そして、Δx が 0 に近いとき、Δy/Δx は原点 0 で評価した関数の接線の傾きになります。これが微分となります。

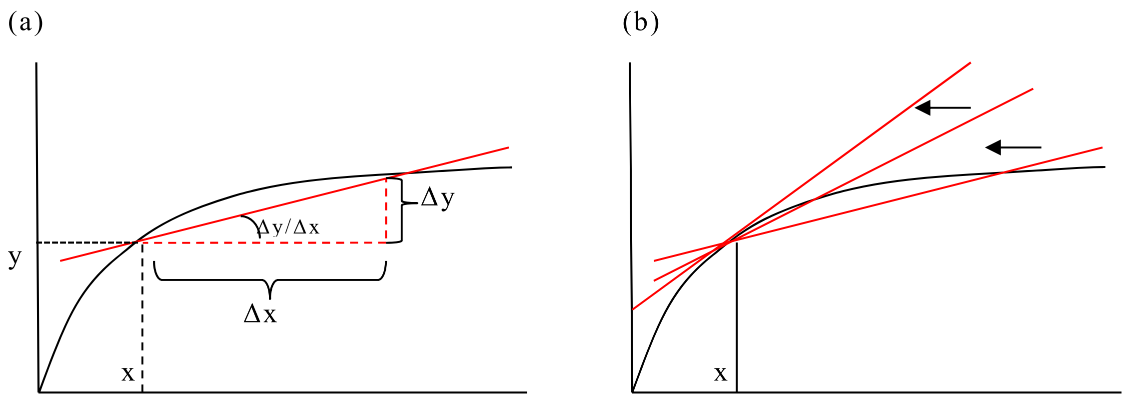
図 A-1　原点 0 での微分のイメージ

(a)　(b)



もちろん、関数の接線の傾きは、x をどの値で評価するかで異なるでしょう。たとえば、x は 0 ではないとしましょう。図 A-2(a)から、ある値 x(≠0)から x+Δx に変化したとき、y は y+Δy に変化することが分かります。ここで Δy/Δx は、Δx が大きいため、関数の傾きにはなっていません。しかし、図 A-2(b)のように、Δx を 0 に近づけていくと、Δy/Δx は、x における接線の傾きに近づいていきます。これが x で評価した微分となります。

図 A-2　一般的な微分のイメージ



微分のイメージが理解できたでしょうか。繰り返しになりますが、微分とは、関数 f(x)の接線の傾きであり、「x が変化したとき y=f(x)がどれぐらい変化するか」を表します。数式を用いると、微分は

$$\frac{dy}{dx} = lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$= lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

と定義できます。ここで、$\lim_{\Delta x \to 0}$ とは x の変化が非常に小さい（Δx が 0 に非常に近い）状態を表します。

微分の簡単な公式

ここで $y=x^2$ という関数を考えましょう。このとき、微分は 2x となります。

$$y=x^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{dy}{dx} = 2x$$

[証明]　いま x から x+Δx に微小に変化したとします。このとき、$\Delta y/\Delta x$は、

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \frac{(x+\Delta x)^2 - x^2}{\Delta x}$$

$$=\frac{x^2+2x\Delta x+(\Delta x)^2-x^2}{\Delta x}=2x+\Delta x$$

となります。ここでΔxを0に近づけると、2xとなるのが分かります。 [終]

一般的には、$y=x^n$という関係を考えると、微分は

$$y=x^n \quad \Rightarrow \quad \frac{dy}{dx}=nx^{n-1}$$

となります。

[証明] ここでxから$x+\Delta x$に変化した状況を考えます。表記を簡単にするため、$x_*=x+\Delta x$と定義しましょう（つまり、$\Delta x=x_*-x$）。よって、微分の定義から、

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\frac{x_*^n-x^n}{x_*-x}$$

となります。

ここで右辺の別表現を考えましょう。まず、n=2なら

$$(x_*^2-x^2)/(x_*-x)=x_*+x$$

となり、n=3なら

$$(x_*^3-x^3)/(x_*-x)=x_*^2+x_*x+x^2$$

となり、n=4なら

$$(x_*^4-x^4)/(x_*-x)=x_*^3+xx_*^2+x^2x_*+x^3$$

となります（両辺を(x_*-x)で掛けて、両辺が等式となることを確認してください)。これを一般化すると、任意のnに対して、

$$(x_*^n-x^n)/(x_*-x)=x_*^{n-1}+xx_*^{n-2}+x^2x_*^{n-3}+\cdots+x^{n-2}x_*+x^{n-1}$$

と表現できます。ただし、上式においてx_*^{n-j}の乗数$n-j$が負なら、その項は全て無視します。

この関係を用いると、

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\frac{x_*^n-x^n}{x_*-x}=x_*^{n-1}+xx_*^{n-2}+x^2x_*^{n-3}+\cdots+x^{n-2}x_*+x^{n-1}$$

となります。ここでΔxを0に近づけると、$x_*=x+\Delta x$は、xに限りなく近づきますから、微分は、上式のx_*をxで置き換えた式となります

$$\begin{aligned}&x^{n-1}+xx^{n-2}+x^2x^{n-3}+\cdots+x^{n-1}\\&=x^{n-1}+x^{n-1}+x^{n-1}+\cdots+x^{n-1}=nx^{n-1}\end{aligned}$$

[終]

ここで、さらに上の公式を一般化しましょう。任意の定数 a と b を考えて、関数 $y=a+bx^n$ を定義します。この関数を微分すると

$$y=a+bx^n \Rightarrow \frac{dy}{dx}=bnx^{n-1}$$

となります。ここで定数 a は、x に依存していませんから、微分の式には表れていません。

[証明] x から $x_*=x+\Delta x$ に変化した状況を考えます（つまり、$\Delta x=x_*-x$）。このとき、

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\frac{(a+bx_*^n)-(a+bx^n)}{x_*-x}=b\left(\frac{x_*^n-x^n}{x_*-x}\right)$$

ここで $\Delta x=x_*-x$ を 0 に近づけると、$(x_*^n-x^n)/(x_*-x)$は nx^{n-1} になりますから、微分は bnx^{n-1} となります。[終]

例 1：y=a としましょう。このとき、a は x に依存していませんから、

$$dy/dx = 0$$

となります。先の公式で b=0 とした場合に該当します。定数の微分は 0 となります。

例 2：y=bx としましょう。このとき、公式より、

$$dy/dx = bx^0= b$$

となります。つまり、x で微分すると定数 b となります。

例 3：$y=3+4x^3$ としましょう。このとき、公式より、

$$dy/dx = 4\times 3x^2= 12\ x^2$$

となります。

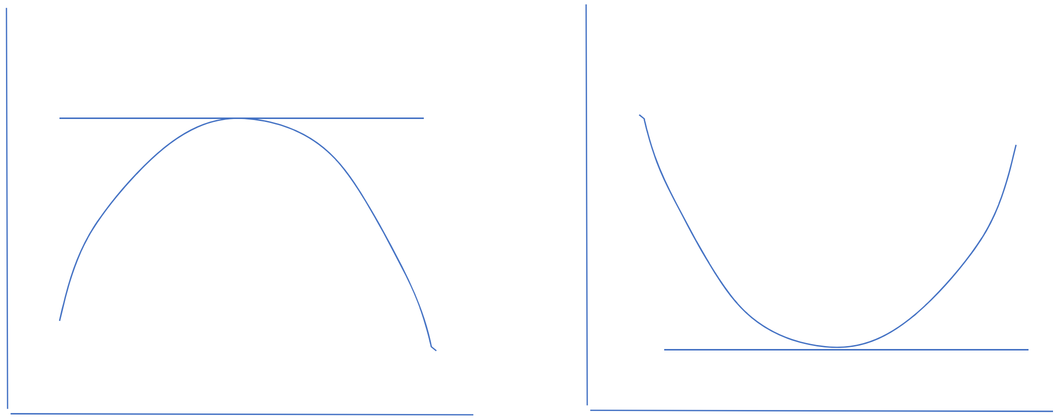
<u>関数の最大化、最小化</u>

微分を用いることで何が分かるのでしょうか。微分は関数の傾き、つまり x が変化したときの y の変化を教えてくれるので、それ自体で有用な情報を与えてくれます。それ以外にも、微分を用いることで、関数 f(x)の最大値や最小値を簡単に見つけることができます。

図 A-3 では、2 つの関数 f(x)を描いています。これをみると、関数の最大値と最小値において、関数の傾きが 0 になっているのがみてとれるでしょう。実は、関数 f(x)の微分が 0 となるポイント x とは、関数を最大化もしくは最小化する x になっているのです。

図 A-3　微分が 0 となるポイント

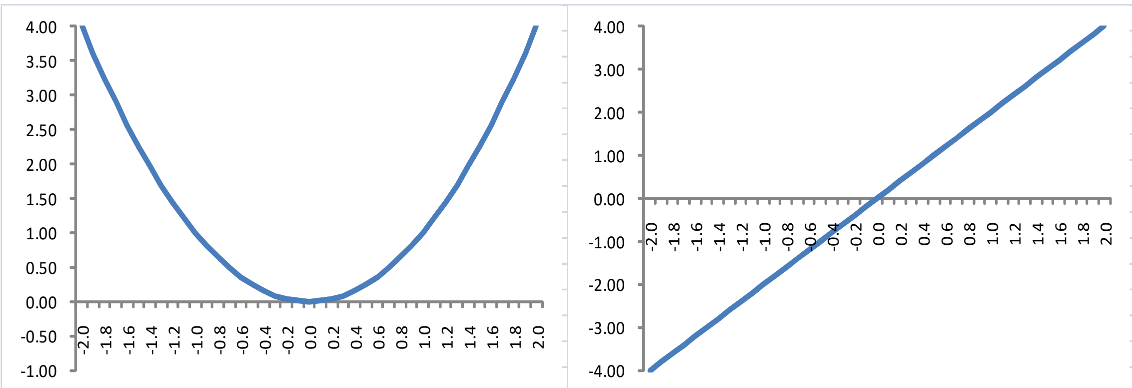
(a) 最大値　　　　　　　　(b)　最小値



例 1　ここで $y=x^2$ としましょう。このとき、公式より $dy/dx=2x$ となります。図 A-4(a)には、$y=x^2$ という関数を描いています。また、図 A-4(b)には、微分（接線の傾き）である 2x を描きました。当然ですが、$y=x^2$ という関数は、x が負のとき、x が増えると y の値が小さくなり、x が正のとき、x が増えると y の値が大きくなります。これは $x<0$ で関数の傾きが負になり、$x>0$ で傾きが正となることを意味します。傾きが正ということは、x が増えれば y も増えるということです。

図 A-4　関数 $y=x^2$

(a)　　　　　　　　(b)



$x=0$ で、傾きは 0 となり、この関数は最小値となります（微分は $2x$ ですから、$2x=0$ を満たす x は、$x=0$ となります）。

これまでの議論から、関数を微分して 0 と置いた式を x について解くことで、関数を最大化もしくは最小化するポイント x^* を求められることが理解できました。では、こうして求めた点 x^* が、最大化点か最小化点か、どうしたら判断できるでしょうか。もちろん関数を図示すれば分かりますが、図に描くのも面倒です。別の方法として、微分して 0 と置いた点 x^* から、微小に x を変化させて、関数の値が減少（増加）すれば、x^* は最大（最小）化点と判断できます。また、2 階微分[1]をみることも、微分が 0 となる x^* が、最大化するポイントか、最小化するポイントかを判断できます。2 階微分の話は少し難しいので、興味がある人は数学の本を読んでみてください。

合成関数の微分

ここで $y=f(x)$ とし、また x は別の変数 z の関数としましょう（これを $g(z)$ と表しましょう）。このとき、y は z の関数となっており、$f(g(z))$ を $f(x)$ と $g(z)$ の合成関数と呼びます。たとえば、$y=(3+2z)^2$ とすると、これは $y=x^2$（つまり、$f(x)=x^2$）、$x=3+2z$（つまり、$g(z)=3+2z$）という合成関数と考えることができます。

合成関数の微分は、関数 $f(g(z))$ の傾きとなります。これは連鎖公式(チェーン・ルール)によって導くことができます。

$$\frac{dy}{dz} = \frac{dy}{dx}\frac{dx}{dz}$$

つまり、$y=f(g(z))$ の微分は、$y=f(x)$ の微分を $x=g(z)$ の微分でかけた値となります。換言すれば、連鎖公式は

(z が変化したときの y の変化量) = (z が変化したときの x の変化量)
× (x が変化したときの y の変化量)

となるとしています。これは直観的な式ではないでしょうか。

---

1 微分をさらに微分すること（関数の傾きを微分すること）、換言すれば、「x が増加したとき、関数の傾きがどれぐらい変化するか」を表します。

例 1　関数として、$y=(3+2z)^2$ とすると、これは $y=x^2$、$x=3+2z$ という合成関数と考えることができます。したがって、連鎖公式から

$$\frac{dy}{dz}=\frac{dy}{dx}\frac{dx}{dz}=(2x)(2)=4(3+2z)$$

となります。

例 2　ここで $y=(a+bz^n)^m$ とします。これは $y=x^m$、$x=a+bz^n$ と定義すれば、連鎖公式から、

$$\frac{dy}{dz}=\frac{dy}{dx}\frac{dx}{dz}=(mx^{m-1})(bnz^{n-1})$$

$$=(m(a+bz^n)^{m-1})(bnz^{n-1})$$

となります。

<u>偏微分</u>

これまで、ある変数 x が、ある値 f(x)に対応する 1 変数の関数を考えていました。しかし、もし 2 変数 x_1、x_2 が、ある値 $f(x_1、x_2)$に対応するなら、これは 2 変数の関数といいます。2 つ以上の変数の関数も同様に定義できます。

ここで x_1 に関する偏微分とは、x_2 を固定した値と考えて、x_1 に関して微分をとったものとなります。これは

$$\frac{\partial y}{\partial x_1}=lim_{\Delta x_1\to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x_1}$$

$$=lim_{\Delta x_1\to 0}\frac{f(x_1+\Delta x_1,x_2)-f(x_1,x_2)}{\Delta x_1}$$

となります。ここで、x_2 を固定して、x_1 だけが $x_1+\Delta x_1$ だけ変化していることに注意してください。

偏微分では、微分と明確に区別するため、記号として d ではなく∂（ラウンド・デルタと呼ぶ）を用いています。偏微分記号を用いるときは、変数が複数あり、そのうちの 1 つを微小に変化させる状況を考えているのです。

偏微分と聞くと難しそうですが、他の変数を固定した値とみなして、微分をとるだけなので、とても簡単なことが分かってもらえると思います。

例 1　ここで $y=x_1^2x_2$ を、x_1 で偏微分してみましょう。ここで x_2 は固定した値とみなします。よって、偏微分は以下となります。

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 2x_1x_2$$

例 2(残差 2 乗和)　10 章では、最小 2 乗推定量を求める際、残差 2 乗和を最小化する α と β を求めました。残差は $u=(y-\alpha-\beta x)$ であり、残差 2 乗 $u^2=(y-\alpha-\beta x)^2$ となります。ここで残差 2 乗和を α と β で偏微分するとどうなるかをみてみましょう。その際、y と x は固定した値であり、α と β だけが変数と考えましょう（つまり、関数 u^2 は α と β だけに依存しています）。まず、関数 $u^2=(y-\alpha-\beta x)^2$ を α で偏微分すると、

$$\frac{\partial u^2}{\partial \alpha} = \frac{\partial u^2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \alpha} = (2\mathrm{u})(-1) = -2(\mathrm{y} - \alpha - \beta x)$$

となります。ここで連鎖公式を使いました。また、β で偏微分すると、

$$\frac{\partial u^2}{\partial \beta} = \frac{\partial u^2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \beta} = (2\mathrm{u})(-x) = -2(\mathrm{y} - \alpha - \beta x)x$$

となります。次に、残差 2 乗和

$$\sum_{i=1}^{n} u_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2$$

を偏微分してみましょう。これは単に、α と β で各項を偏微分するわけですから、簡単に計算できます。つまり、

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{n} u_i^2}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i^2}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i^2}{\partial u_i}\frac{\partial u_i}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{n} (2u_i)(-1) = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{n} u_i^2}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i^2}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i^2}{\partial u_i}\frac{\partial u_i}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} (2u_i)(-x_i) = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)x_i$$

となります。10 章で説明した通り、これらの式を 0 と置いて、両式を満たす α と β が最小 2 乗推定量となります。