偏微分（その１:定義と基本性質）

偏微分に関して熱力学でよく用いられる事項をまとめておく．系統的な解説は解析学の教科書を参照されたい．

変数 $x, y, \ldots$ の関数 $z(x, y, \ldots)$ が与えられた時，一つの変数について，他の全ての変数を定数とみなして微分することを偏微分という．記号としては

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \lim_{h\to 0} \frac{z(x+h, y, \ldots) - z(x, y, \ldots)}{h}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial z}{\partial y} = \lim_{h\to 0} \frac{z(x, y+h, \ldots) - z(x, y, \ldots)}{h}, \tag{2}$$

のように ∂ を用いる．偏微分は順序によらない，即ち

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right) \tag{3}$$

が成立する．変数は幾つあっても同様なので，以下では 2 個の場合に準拠することにし，$z(x, y, \ldots)$ を $z(x, y)$ と書く．以下の展開が成り立つ．

$$z(x+\Delta x, y+\Delta y) = z(x, y) + \frac{\partial z}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial z}{\partial y}\Delta y + O(\Delta^2). \tag{4}$$

ここで，$O(\Delta^2)$ は，$(\Delta x)^2, \Delta x \Delta y, (\Delta y)^2$ のいずれかで割った後に $\Delta x, \Delta y \to 0$ とすると有限の値になる補正項を表す．

３次元空間において，直交座標が $(x, y, z(x, y))$ で与えられる点の集合，すなわち曲面を考えよう．偏微分係数 $\frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}$ は，曲面上の点 $(x, y, z(x, y))$ における接平面の x および y 方向の傾きを与える．(4) は，曲面上でわずかに隔たった 2 点における z 座標の差 $\Delta z = z(x+\Delta x, y+\Delta y) - z(x, y)$ は，接平面上での差で近似されることを表す．微少変化を無限小にした極限は

$$dz = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x dy \tag{5}$$

と表記され, z の完全微分，あるいは単に微分という．ここで，偏微分の際に定数とみなす他の独立変数が何であるかを添え字にし，z が x, y を独立変数とする関数とみなしていることを明示した．この記法は熱力学の慣習であるが，以下に見るように偏微分係数は独立変数の選び方に依存するので，変数変換の際に混同を避ける助けになる．

関数 $z = z(x, y)$ において y が x ともう一つの独立変数 w を用いて $y = y(x, w)$ と表わされるとしよう．y の 独立変数 x, w についての微分の式 $dy = (\partial y/\partial x)_w dx + (\partial y/\partial w)_x dw$ を (5) に代入すると

$$dz = \left[\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_w\right] dx + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial w}\right)_x dw \tag{6}$$

となる． 一方 z を，代入 $z = z(x, y(x, w))$ によって独立変数 x, w の関数とみなした場合の微分の式は $dz = (\partial z/\partial x)_w dx + (\partial z/\partial w)_x dw$ である．これと (6) を比較して，独立変数の微

分 dx, dz の係数が一致すべきことから

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_w , \tag{7}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial w}\right)_x = \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial w}\right)_x \tag{8}$$

が成立することがわかる．次に z を x, y で表わす式 $z = z(x, y)$ を y について解いて， x, z を独立変数とする関数 $y = y(x, z)$ が得られたとしよう．このとき

$$\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x^{-1} \tag{9}$$

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = -\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \Big/ \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \tag{10}$$

が成り立つ．これは (5) を dy について解いた式と，$y(x, z)$ の完全微分の式 $dy = (\partial y/\partial x)_z dx + (\partial y/\partial z)_x dz$ を比較すれば得られる．関数 $z_1(x, y), z_2(x, y)$ の積の完全微分は分配則

$$d(z_1 z_2) = z_1 dz_2 + z_2 dz_1 \tag{11}$$

を満たす.

練習問題 0

[1]
$z = e^x \sin(x + y^2) + x^n y^m$ について, 偏微分の可換性 (3) を直接計算で確認せよ.

[2]
$z = (y + 5)/x,\ y = x^2 + e^{3w}$ の場合に (7)–(10) が成り立つことを確認せよ.

練習問題 0 の略解

[1]

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial z}{\partial x} = e^x(\sin(x + y^2) + \cos(x + y^2)) + n x^{n-1} y^m, \\
&\frac{\partial z}{\partial y} = 2y e^x \cos(x + y^2) + m x^n y^{m-1}, \\
&\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right) = 2y e^x(\cos(x + y^2) - \sin(x + y^2)) + mn x^{n-1} y^{m-1}.
\end{aligned}$$

[2] x, w を独立変数とする z の表示は

$$z = x + \frac{e^{3w}}{x} + \frac{5}{x}$$

となる．

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -\frac{y+5}{x^2}, \quad \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x = \frac{1}{x},$$
$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w = 1 - \frac{e^{3w}}{x^2} - \frac{5}{x^2}, \quad \left(\frac{\partial z}{\partial w}\right)_x = \frac{3e^{3w}}{x},$$
$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_w = 2x, \quad \left(\frac{\partial y}{\partial w}\right)_x = 3e^{3w}$$

を (7)–(10) に代入すれば恒等式になっている．