多変数の微分関数の逆変換

クロメル@物理のかぎプロジェクト

2013-05-19

皆さんは，極座標つまり (x, y) と (r, θ) の変換行列（ヤコビアン）を見て[*1]，

$$\frac{dr}{dx} \neq (\frac{dx}{dr})^{-1} \tag{1}$$

であることに戸惑った経験はありませんか？

そういうことができるのは，どんな時なのかということについて調べてみました．

具体例 (２次元極座標)

$$x = r\cos\theta, y = \sin\theta \tag{2}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \theta = \tan^{-1}(y/x) \tag{3}$$

の微分形式を考えてみます．

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} dr \\ d\theta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{dr}{dx} & \frac{dr}{dy} \\ \frac{d\theta}{dx} & \frac{d\theta}{dy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} & \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ \frac{-y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta/r & \cos\theta/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{4}$$

[*1] $r = \sqrt{x^2 + y^2}, \theta = \tan^{-1}(y/x)$ ですね．

そして逆変換は,

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \dfrac{dx}{dr} & \dfrac{dx}{d\theta} \\ \dfrac{dy}{dr} & \dfrac{dy}{d\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\theta \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5}$$

ですね．確かに,

$$\frac{dr}{dx} = \cos\theta \neq (\cos\theta)^{-1} = (\frac{dx}{dr})^{-1} \tag{6}$$

$$\frac{d\theta}{dy} = \cos\theta/r \neq (r\cos\theta)^{-1} = (\frac{dy}{d\theta})^{-1} \tag{7}$$

と逆関数の微分法は成り立っていないようです.

一般論

ここで，一般的な場合に拡張して関係を調べてみましょう．変数同士の変換行列のランクを落とさないと仮定して，二対二組 $(a,b),(x,y)$ の変数間の変換を考えます.

$$\begin{pmatrix} da \\ db \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{da}{dx} & \dfrac{da}{dy} \\ \dfrac{db}{dx} & \dfrac{db}{dy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} \tag{8}$$

という関係が成立していたとすると，仮定より，上式の行列は逆を持ちます．すると,

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} &= \frac{1}{\dfrac{da}{dx}\dfrac{db}{dy} - \dfrac{db}{dx}\dfrac{da}{dy}} \begin{pmatrix} \dfrac{db}{dy} & -\dfrac{da}{dy} \\ -\dfrac{db}{dx} & \dfrac{da}{dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} da \\ db \end{pmatrix} \\ &\equiv J^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{db}{dy} & -\dfrac{da}{dy} \\ -\dfrac{db}{dx} & \dfrac{da}{dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} da \\ db \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9}$$

となります．ここで記号 $\equiv$ はこれでヤコビアン J を定義するという意味です.

これと,

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{dx}{da} & \dfrac{dx}{db} \\ \dfrac{dy}{da} & \dfrac{dy}{db} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} da \\ db \end{pmatrix} \tag{10}$$

と比較します．すると,

$$J^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{db}{dy} & -\dfrac{da}{dy} \\ -\dfrac{db}{dx} & \dfrac{da}{dx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{dx}{da} & \dfrac{dx}{db} \\ \dfrac{dy}{da} & \dfrac{dy}{db} \end{pmatrix} \tag{11}$$

という関係が成立します.

再び極座標

さて，得られた結果の検証をしてみましょう．$(a,b,x,y) \to (r,\theta,x,y)$ とすると,
まず，式 (4) より,

$$J = 1/r(\cos^2\theta + \sin^2\theta) = 1/r \tag{12}$$

となります．はたして，等式は成り立つのでしょうか？式 (11) の右辺は,

$$\begin{aligned}
J^{-1}\begin{pmatrix} \dfrac{d\theta}{dy} & -\dfrac{dr}{dy} \\ -\dfrac{d\theta}{dx} & \dfrac{dr}{dx} \end{pmatrix} &= r\begin{pmatrix} \cos\theta/r & -\sin\theta \\ \sin\theta/r & \cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \dfrac{dx}{dr} & \dfrac{dx}{d\theta} \\ \dfrac{dy}{dr} & \dfrac{dy}{d\theta} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{13}$$

見事，成り立ちましたね．変数の数を増やし一般化してまとめておくと,

> **Important**
>
> **N 変数 (x_i) から N 変数 (y_i) への変換はランク落ちしない限り，変換行列の逆行列を考えることによって，逆変換が得られる．なお，この時には一般に $\dfrac{dy_i}{dx_j} = (\dfrac{dx_j}{dy_i})^{-1}$ は成立しない．**

では，熱力学でよく使われる変数の微分形はどうなのでしょう？

いよいよ熱力学の話

なじみがあると思われる式から始めましょう．

$$dU = TdS - pdV \tag{14}$$

この式は，一変数 U に対し，二変数 S, V の関数となっています.

熱力学では，等温過程，等圧過程，定積過程，断熱過程など様々な経路を指定して，その種々の量を計算するのでした．つまり，それは二変数の自由度を持っていた関数形に，例えば，エントロピー S の任意の関数 $g(S)$ を用いて,

$$dV = g(S)dS \tag{15}$$

などの変化方向に制限をつけることになります．すると，なんと，

$$\begin{aligned} dU &= TdS - pdV \\ &= TdS - pg(S)dS \\ &= (T - pg(S))dS \end{aligned} \tag{16}$$

より，

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dS} &= (T - pg(S)) \\ &= (\frac{dS}{dU})^{-1} \end{aligned} \tag{17}$$

となり，お馴染みのインバース（逆数）の関係が出てきました．

もう一言付け足すとすれば，等積過程 $dV = 0$ の場合，$g(S) = 0$ であり，

$$(\frac{dU}{dS})_V = T = (\frac{dS}{dU})_V^{-1}$$

となります．これはお馴染みの関係ではないでしょうか？これもまたまとめておきます．

Important

熱力学的関係式に於いて，ピストンの変化軌道を決定したら，1 変数 x から 1 変数 y への変換となる．その変換がランク落ちしない限り，変換の同じ過程（制限）の逆を考えることによって，逆変換が得られる．なお，この時には $\frac{dy}{dx} = (\frac{dx}{dy})^{-1}$ は成立する．

つまり

今考えている変換が，一変数対一変数の時のみ逆数の関係が成立し，多変数同士の変換では，変換行列の逆行列が正しい逆を与えるということのようです．今日はこの辺で，お疲れ様でした．