III-3-3.　ヤコビアン

ヤコビアンは関数・ベクトルの変換にともなって出てくる概念で、データーを記述的に整理していくために必然的に触れなければなりません。それ自体面白いのですが、深く理解するには、行列やベクトルなどの知識が必要になります。そこで、多変量解析のところで全微分、重積分、置換積分などの説明とともにあらためて解説します。ここでは、確率分布密度の計算法の理解のために、とりあえず何となく納得できるかもしれない説明にとどめます。

ある n 次元の空間のある座標系で表されているある図形があるとき、それを他の座標系に移した時、当然、形や大きさが変わります。この大きさの拡大・縮小の割合がヤコビアンだというのが、むちゃくちゃに単純化した説明です。

影絵をイメージしてください。光源とある物があり、その向こうにスクリーンがあって、物の影が映し出されています。投影ですね。これは一種の座標変換で、スクリーンに映された影は、物質の平面図よりも何倍か大きくなっています。これが座標変換による拡大です。

亀には足が４本あります。今、亀の足が１２本あります。亀は何匹いるのでしょう。というのも、一種の投影で、足の数に亀の個体数を投影しているともいえます。写像といういい方の方が数学的です。私たちは普通投影された像を観察して、もとの物の形、大きさ、数を推測します。どういう風に投影されているのかがわかれば、もとの物の形がわかります。大きさに関して言えば、投影によってどのくらい拡大されるのかがわかればもとの物の大きさがわかります。

$$4I_t = \mathrm{f}_t$$

$$\mathrm{f}_t$$

I_t:の個体数、f_t:亀の足の数

多少無理がありますが、この場合の 4 はヤコビアンともいえます。つまり、I 軸上の線分I_tを f 軸に投影しf_tという像が得られたとすれば、その拡大倍率は４になるということです。

さらに言えば、

この式の両辺を微分して得られる。

$$\frac{d\mathrm{f}_t}{dI_t} = 4$$

は、もとの式$\mathrm{f}_{t=}4I_t$の傾き（I_tが１つ増加したときに、f がどのくらい大きくなるのか）でもありますから、微分とは、同じ次元の直交する別の座標系に投影したときの「長さ」（長さと言ってよいのかどうかわかりませんが、大きさをあらわす尺度のようなものをここでは「長さ」と表現しました。）の倍率だともいえます

ついでに言えば、鶴の方は（小学校で習う鶴亀算を意識しています。優雅で日本的でいいですね。縁起が良い。現実的に考えると、鶴と亀の個体数を数えずに、総計を数えてつい

でに足の数の総計を数えるなどということをするおかしな人がいるはずがない。しかし、つべこべ言うな、これは日本の文化なのだ。ちなみに、筆者は鶴亀算のことを、越後屋算と呼んでいます。越後屋が持ってきた菓子折りの大きさと重さから、お代官様が、小判の入っている饅頭の数と小判の入っていない饅頭の数を推測するというものです。極めて実用的で、こういうことをする人はいます。しかし情緒は全くありません。）

$$\frac{d\mathrm{f}_c}{dI_c} = 2$$

I_c:鶴の個体数、　f_c:鶴の足の数

何かの事情で、最初の亀は足を一本失っていて３本足であり、最初のツルは年寄りで杖をついていて（鶴が杖をつけるかどうかは知らないが、とりあえずくちばしで杖を咥えるものとする。亀は万年も生きるのだから、たまには事故にあって足ぐらい失うだろうし、鶴は千年も生きるのだから、年を取って杖が必要になるだろう）これも足と数えると

$$4I_t - 1 = \mathrm{f}_t$$
$$2I_c + 1 = \mathrm{f}_c$$

ですが、この場合にも倍率は変わらず、

$$\frac{d\mathrm{f}_t}{dI_t} = 4$$

$$\frac{d\mathrm{f}_c}{dI_c} = 2$$

です。

小学校の鶴亀算は、鶴と亀の個体数の合計と足の数の総数が与えられて、そこから鶴と亀の個体数を個別に求めるという問題になっています。一般化するために、亀の個体数を x, 鶴の個体数を y、個体数の合計を u、足の総数を v とします。

回りくどく数式で表現すると

$$u = f(x, y)$$
$$v = g(x, y)$$

の形で記述すれば

$$f(x, y) = x + y$$
$$g(x, y) = 4x - 1 + 2y - 1$$

なので

$$u = f(x, y) = x + y \qquad \text{i}$$
$$v = g(x, y) = 4x + 2y \qquad \text{ii}$$

小学校で習った解法はとてもエレガントで、「初めに、すべての個体が亀だった時に足の数がいくつになるか考えなさい。その数と実際に数えられた足の数の差は、鶴と亀の足の数の差に、鶴であるにもかかわらず亀だとされてしまったかわいそうな鶴の数を掛けたもの

です。ですから、鶴と亀の足の数の差：２でその数を割れば、かわいそうな鶴の数がわかります。」というものです。素直でのびのびとして知恵に満ちている。自分でこういうことを考えられる子はとても良い子です。でも、多分これは、次にあげる連立方程式の解法に、適当なストーリーを大人がつけた可能性無きにしもあらずですね。やっていることが同じですから。

つまり、式ｉの両辺を４倍して、その式の両辺から、式ⅱのそれぞれの辺を差し引き、ｘの項をけし、残ったｙの項の定数で右辺の値を割る。

$$
\begin{array}{rcl}
4u = 4x + 4y & & \text{i}\times 4 \\
v = 4x + 2y & & \text{ii} \\
\hline
4u - v = 2y & & \text{i}\times 4\text{-ii}
\end{array}
$$

$$y = \frac{4u - v}{2}$$

ということをやっているわけです。こういうことを中学校で習って、鶴亀算を連立方程式の解法として一般化したわけです。

一般化して書くと

$$\mathrm{a}x + by = u$$

$$cx + dy = v$$

です。

中学校で習った連立方程式の解法のとおりにやると、

$$ax + bcy = cu$$

$$acx + day = av$$

上式から下式を引いて

$$\mathrm{bcy} - \mathrm{ady} = cu - av$$

$$\mathrm{y} = \frac{cu - av}{bc - ad}$$

分母分子の符号を入れ替えて

$$\mathrm{y} = \frac{av - cu}{ad - bc}$$

$$\mathrm{x} = \frac{du - bv}{ad - bc}$$

この最後の計算は、単純な影絵になっていませんか。

$$x(ad - bc) = du - bv$$

$$y(ad - bc) = av - cu$$

xを影絵に映したら、$ad - bc$拡大されて、$du - bv$になりました。

yを影絵に映したら、$ad - bc$拡大されて、$av - cu$になりました。

つまり、$ad - bc$はx、y軸で作られた平面に描かれた図形を、u、v軸で作られた平面に移し

替えるときの拡大倍率です。
数式的には、

$$\mathrm{a}x + by = u$$
$$cx + dy = v$$

がx、y軸で作られた平面に描かれた図形を、u、v軸で作られた平面に映す（変換する）ときの、変換式で

$$ad - bc$$

が拡大倍率です。連立方程式を行列式で表すと

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ \mathrm{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

これは、ただ単に、上の連立方程式を行列の約束に従って書くと、このように書くというだけのことです。そうなのですが、連立方程式がある変換を表しているのですから、この行列$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$も変換を表現しています。この変換の大きさ（倍率）を行列式と言って$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$と表します。この場合、その値は$ad - bc$です。2×２の正方行列（真四角行列）の行列式の値はこのように計算します。ｎ×ｎの正方行列の行列式の値の求め方は、どこかの教科書に書いてありますから自分で確認してください。
ところで、すでに述べたように、微分の値も拡大倍率です。
$\frac{\partial u}{\partial x}$は、点$(x, y)$において、$y$を無視して、$x$が動いたときの$u$の変化量です。$\frac{du}{dx}$と書かないのは、y の存在を意識して、$y$を無視して、$x$が動いたときの$u$の変化量（偏微分）を扱うことを強調しています。しかし、早い話、

$$\mathrm{a}x + by = u$$

の両辺をxで微分すれば、

$$\mathrm{a} = \frac{\partial u}{dx}$$

となりますから。

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ \mathrm{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

は以下のように書けます。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ \mathrm{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

ですから、拡大倍率は

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}$$

ということです。これがヤコビアンです。

（これでは、連立方程式のように式が線形の場合にしか説明になっていないという批判があるのは予想しています。一応、偏微分にして、近傍においては線形式が成り立つという言い訳は用意したつもりですが、それで間に合うかどうか、数学の先生に聞いてください。教養学部での解析の講義の時から、とにかく、この手の話が苦手で大嫌いでした。なんだかどうでも良いことを必死に議論しているような気がするのです。確かにそれでは間に合わない場合も当然あるのでしょう。でも、そんなことは当面どうでも良いというような、お気楽な態度ではいけないのでしょうか。そういうことをしないで、その代りとして連立方程式からの計算法の拡大という説明の仕方をここで私が選んだのは、連立方程式の記述法としての行列と、写像としての行列のイメージをつなげておきたかったからですが、かえって混乱させているかもしれません。

将来、役に立つかもしれないので、座標変換とヤコビアンについて、一般化した公式を示しておきます。

以下の n 次の変換について。

$$x_i = \varphi_i(u_1, \cdots u_n) \qquad 1 \leq \mathrm{j} \leq \mathrm{n}$$

$$\int \cdots \int_D f(x_1, \cdots x_n)\, dx_1 \cdots dx_n = \int \cdots \int_{D\prime} f\{\varphi_i(u_1, \cdots u_n), \cdots \varphi_n(u_1, \cdots u_n)\} \left[J_\varphi \right] du_1 \cdots du_2$$

（積分記号の D は$\boldsymbol{x}$の積分範囲：つまり、$x_1, \cdots x_n$平面の積分で$f(x_1, \cdots x_n)$を積分する範囲 D'は$\boldsymbol{u}$の積分範囲）

$$\mathrm{J}_\varphi = \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{d\boldsymbol{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial u_n} \\ \cdots & \ddots & \cdots \\ \frac{\partial \varphi_n}{\partial u_n} & \cdots & \frac{\partial \varphi_n}{\partial u_n} \end{pmatrix}$$

つまり、

$$\left| \mathrm{J}_\varphi \right| = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial u_n} \\ \cdots & \ddots & \cdots \\ \frac{\partial \varphi_n}{\partial u_n} & \cdots & \frac{\partial \varphi_n}{\partial u_n} \end{bmatrix}$$

という計算をすればよいということです。

行列を使わなくても、ヤコビアンを表すこともできますし、他の方法でヤコビアンを説明することもできますが、大切なことは具体的な使い方です。それについては、III-3-4 極座標のところで、具体的な座標変換の事例を示します。