演習問題 2.23

式（ 2.48 ）の固有ベクトル展開を用いて座標系を対角化することで、マハラノビス距離 Δ が定数になる超楕円体の内部の体積が、

$$V_D \mid \boldsymbol{\Sigma} \mid^{1/2} \Delta^D$$

…（ 2.286 ）

になることを示せ。ただし、V_D は、D 次元単位球の体積であり、マハラノビス距離は、式（ 2.44 ）で定義される。

［ マハラノビス距離の二乗形式 ］

$$\Delta^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \sum_{i=1}^{D} \frac{y_i^2}{\lambda_i}$$

（ 証明 ）マハラノビス距離は、ガウス分布の指数部分に現れる二次形式

$$\Delta^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

…（ 2.44 ）

で与えられる。共分散行列の逆行列 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ は、

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \sum_{i=1}^{D} \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}$$

…（ 2.49 ）

で与えられるので、式（ 2.49 ）を式（ 2.44 ）に代入すると、

$$\Delta^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \left(\sum_{i=1}^{D} \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \right) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

$$= \sum_{i=1}^{D} \frac{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})}{\lambda_i}$$

が得られ、ここで、

$$y_i = \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

…（ 2.51 ）

とすると、

$$= \sum_{i=1}^{D} \frac{y_i^2}{\lambda_i}$$

…（ 2.50 ）

となるので、マハラノビス距離の二次形式を、式（ 2.50 ）で表すことができる。

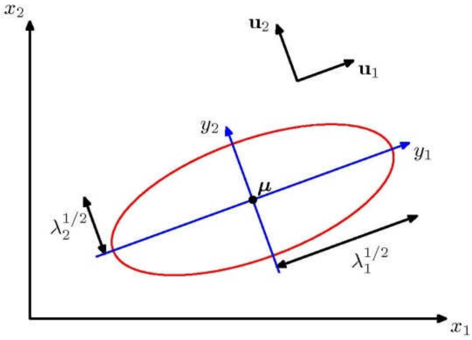
［ 共分散行列の行列式 ］

$$\mid \boldsymbol{\Sigma} \mid^{1/2} = \prod_{j=1}^{D} \lambda_j^{1/2}$$

…（ 2.55 ）

[解]

変換 (2.51) は座標系を対角化し、マハラノビス距離の二乗に対応する二次形式 (2.44) は式 (2.50) で与えられた。これは以下の図に示されるような $\mathbf{y}$ の新しい座標系である。



このような輪郭の中に含まれる超体積は、シフトや回転によって変化することはない。ここで、D 次元の基底ベクトル z_i を用いて表される単位球の超体積は V_D で表されるので、半径 Δ の D 次元の基底ベクトル y_i を用いて表される楕円の超体積 E_D を求めるために、更なる変換式を考える。

$$y_i = \lambda_i^{1/2} z_i$$

上記の変換式は、上記の図に示された y_i 軸方向の長さが、z_i 軸方向の長さの $\lambda_i^{1/2}$ 倍で表されることを示している。楕円の超体積を求めるために、上記の変換式のヤコビアンを考えると、ヤコビアン $|\mathbf{J}|$ は、

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial z_1} & \cdots & \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial z_D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{1/2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_D^{1/2} \end{pmatrix}$$

$$|\mathbf{J}| = \prod_{i=1}^{D} \lambda_i^{1/2} = |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}$$

で表される。よって、半径 Δ の D 次元の楕円の超体積 E_D は、

$$E_D = \prod_{i=1}^{D} \int \mathrm{d}y_i = |\mathbf{J}| \prod_{i=1}^{D} \int \mathrm{d}z_i = |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2} \Delta^D V_D$$

と書き表すことができ、マハラノビス距離 Δ が定数になる超楕円体の内部の体積が、式 (2.286) になることを示せた。

[一変数関数の変数変換]

$$\int f(x)\,dx$$

で $x = g(y)$ とすると、$dx = g'(y)\,dy$ より、

$$\int f(g(y))\,g'(y)\,dy$$

[多変数関数の変数変換]

多変数関数の場合は、上記の $g'(y)$ の部分がヤコビ行列の行列式（ヤコビアン）になる。ヤコビアンは、変数変換した際のある点における微小区間の拡大率を意味する。

$x_i = g_i(y_1, \cdots, y_n)\ for\ i = 1, \cdots, n$ とすると、ヤコビアンは、

$$\det \mathbf{J} = \det\left(\frac{\partial x_i}{\partial y_i}\right) = \det\left(\frac{\partial(x_1, \cdots, x_n)}{\partial(y_1, \cdots, y_n)}\right) = \det\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial x_1}{\partial y_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_m}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial x_m}{\partial y_n} \end{pmatrix}$$

よって、多変数関数の変数変換は、適当な条件の下で

$$\int \cdots \int f(x_1, \cdots, x_n)\, dx_1 \cdots dx_n$$

$$= \int \cdots \int f(g_1(y_1, \cdots, y_n), \cdots, g_n(y_1, \cdots, y_n)) \det \mathbf{J}\, dy_1 \cdots dy_n$$

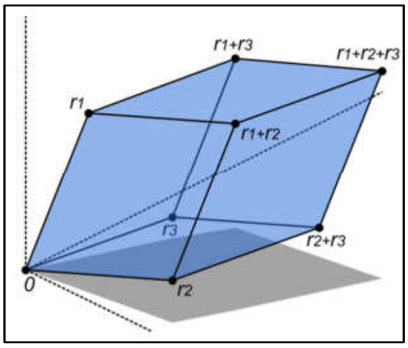
となる。

[多変数確率密度関数の変数変換]

$$p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \left| \det\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{y}}\right) \right|$$

$$= p_{\mathbf{x}}(g(\mathbf{y}))\,|\det(g'(\mathbf{y}))| \qquad \cdots (1.27)'$$

ただし、$\det\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{y}}\right)$ は行列式（ヤコビアン）を意味し、ここでの行列式は、線形変換によって、空間の体積要素が何倍に変わるかという概念を抽象化したものである。なお、行列式は、正方行列に対して定義される量である。



図：平行六面体

この立体の体積 V は、ベクトル r_1, r_2, r_3 の成す 3×3 行列の行列式

$$|\mathbf{r}|_{\times} = |\ r_1\ \ r_2\ \ r_3\ |_{\times}$$

$$= \det\begin{pmatrix} 0 & -r_3 & r_2 \\ r_3 & 0 & -r_1 \\ -r_2 & r_1 & 0 \end{pmatrix} = r_1 r_2 r_3$$

の絶対値に一致する。⇒ $V = |\ r_1 r_2 r_3\ |$

[**行列式**（ determinant ）]

上記の図より、行列式は大きさを表す概念であることがわかる。