第 12 回　多変量正規分布（7.3–7.4）

村澤 康友

2023 年 11 月 10 日

今日のポイント

1. 1 変量から多変量に正規分布を拡張する．
2. 多変量正規分布の線形変換は正規分布．したがって周辺分布も正規分布．多変量正規分布では独立 $\Longleftrightarrow$ 無相関．また条件つき分布も正規分布．
3. 正規分布にしたがう独立な確率変数の和は正規分布（再生性）．

目次

1　行列

1.1　行列とベクトル

定義 1. $m \times n$ **行列**は

$$\boldsymbol{A} := \begin{bmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix}$$

注 1. $\boldsymbol{A} := [a_{i,j}]$ とも書く．

定義 2. $1 \times n$ 行列を（n **次元）行ベクトル**という．

定義 3. $n \times 1$ 行列を（n **次元）列ベクトル**という．

1.2　ベクトルの内積

$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ を n 次元列ベクトルとする．

定義 4. $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の**内積**は

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

注 2. $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}$ とも書く．

1.3　行列の演算

$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ を行列とする．

定義 5. $m \times n$ 行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の各 (i, j) 成分について $a_{i,j} = b_{i,j}$ なら $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は**等しい**という．

定義 6. $m \times n$ 行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の**和**は

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} := [a_{i,j} + b_{i,j}]$$

定義 7. スカラー α と $\boldsymbol{A}$ の**スカラー積**は

$$\alpha\boldsymbol{A} := [\alpha a_{i,j}]$$

定義 8. $l \times m$ 行列 $\boldsymbol{A}$ と $m \times n$ 行列 $\boldsymbol{B}$ の**積**は

$$\boldsymbol{AB} := [(\boldsymbol{a}_{i,.}, \boldsymbol{b}_{.,j})]$$

注 3. 一般に $\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$. そもそも $l \neq n$ なら $\boldsymbol{BA}$ は定義できない.

定義 9. $\boldsymbol{A}$ の**転置**は

$$\boldsymbol{A}' := [a_{j,i}]$$

1.4 行列と連立 1 次方程式

n 個の未知変数 $x_1, \dots, x_n$ をもつ m 本の連立 1 次方程式は

$$\begin{aligned} a_{1,1}x_1 + \dots + a_{1,n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{m,1}x_1 + \dots + a_{m,n}x_n &= b_m \end{aligned}$$

次の行列・ベクトルを定義する.

$$\boldsymbol{A} := \begin{bmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} := \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{b} := \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

連立 1 次方程式は

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

2 行列式と逆行列

2.1 正方行列

定義 10. $n \times n$ 行列を n **次正方行列**という.

定義 11. （n 次）**単位行列**は

$$\boldsymbol{I}_n := \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

2.2 行列式

$\boldsymbol{A}$ を n 次正方行列とする.

定義 12. $\boldsymbol{A}$ の**行列式**は

$$\det(\boldsymbol{A}) := \sum_{p(.)\in P} \operatorname{sgn}(p(.)) a_{1,p(1)} \dots a_{n,p(n)}$$

ただし P は $\{1, \dots, n\}$ のすべての置換の集合.

例 1. $n = 2$ なら $P = \{(1,2),(2,1)\}$ より

$$\det(\boldsymbol{A}) = a_{1,1}a_{2,2} - a_{1,2}a_{2,1}$$

2 元連立 1 次方程式は

$$\begin{aligned} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 &= b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 &= b_2 \end{aligned}$$

または

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

x_1 を消去すると

$$(a_{1,2}a_{2,1} - a_{1,1}a_{2,2})x_2 = a_{2,1}b_1 - a_{1,1}b_2$$

x_2 を消去すると

$$(a_{1,1}a_{2,2} - a_{1,2}a_{2,1})x_1 = a_{2,2}b_1 - a_{1,2}b_2$$

したがって解の存在の必要十分条件は $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$.

2.3 逆行列

定義 13. $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA} = \boldsymbol{I}_n$ となる $\boldsymbol{B}$ を $\boldsymbol{A}$ の**逆行列**という.

注 4. $\boldsymbol{A}$ の逆行列を $\boldsymbol{A}^{-1}$ と書く.

注 5. 連立 1 次方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ の解は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$.

練習 1. $n = 2$ なら

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\boldsymbol{A})} \begin{bmatrix} a_{2,2} & -a_{1,2} \\ -a_{2,1} & a_{1,1} \end{bmatrix}$$

となることを確かめなさい.

3 多変量正規分布

3.1 確率ベクトル

多変量解析では太字の大文字で行列，太字の小文字でベクトル，細字の小文字でスカラーを表し，確

率変数とその実現値の表記を区別しない.[*1] $\boldsymbol{x}$ を n 次元確率ベクトルとする.

定義 14. $\boldsymbol{x}$ の**平均ベクトル**は

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \mathrm{E}(x_1) \\ \vdots \\ \mathrm{E}(x_n) \end{pmatrix}$$

定義 15. $\boldsymbol{x}$ の**分散共分散行列**は

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{x}) := \mathrm{E}((\boldsymbol{x} - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}))(\boldsymbol{x} - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}))')$$

注 6. $\mathrm{var}(\boldsymbol{x})$ の (i,j) 成分は $\mathrm{cov}(x_i, x_j)$.

3.2 確率密度関数（p. 147）

定義 16. n **変量正規分布**の同時 pdf は，任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ について

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &:= (2\pi)^{-n/2} \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-1/2} \\ &\quad \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})\right) \end{aligned}$$

ただし $\boldsymbol{\Sigma}$ は対称行列.

注 7. $\mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ と書く.

注 8. $n = 2$ なら

$$\boldsymbol{x} := \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} := \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} := \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 \end{bmatrix}$$

行列式と逆行列は

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{\Sigma}) &= \sigma_1^2\sigma_2^2 - \sigma_{12}^2 \\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1} &= \frac{1}{\sigma_1^2\sigma_2^2 - \sigma_{12}^2} \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{12} & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

指数部は楕円の方程式.

定義 17. $\mathrm{N}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_n)$ を n **変量標準正規分布**という.

例 2. 2 変量正規分布の同時 pdf（3D グラフ・等高線）と 2 変量正規乱数の散布図は図 1 の通り.

[*1] 多変量解析は回帰分析・主成分分析・因子分析・判別分析などを含む多変量データの分析手法の総称であり，多変量正規分布の理論を基礎とする.

3.3 積率

定理 1. $\mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ の *mgf* は，任意の $\boldsymbol{t} \in \mathbb{R}^n$ について

$$M(\boldsymbol{t}) = \exp\left(\boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{t} + \frac{\boldsymbol{t}'\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{t}}{2}\right)$$

証明. 省略. □

定理 2. $\boldsymbol{x} \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ なら

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{\mu} \\ \mathrm{var}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{\Sigma} \end{aligned}$$

証明. mgf を用いるのが簡単. □

4 多変量正規分布の性質

4.1 線形変換

定理 3. $\boldsymbol{x} \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ なら

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{A}')$$

証明. $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$ の mgf は

$$\begin{aligned} & M_{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{t}) \\ &:= \mathrm{E}\left(\mathrm{e}^{\boldsymbol{t}'(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b})}\right) \\ &= \mathrm{E}\left(\mathrm{e}^{\boldsymbol{t}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}\right)\mathrm{e}^{\boldsymbol{t}'\boldsymbol{b}} \\ &= M_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{t})\mathrm{e}^{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{t}} \\ &= \exp\left(\boldsymbol{\mu}'(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{t}) + \frac{(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{t})'\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{t})}{2}\right)\mathrm{e}^{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{t}} \\ &= \exp\left((\boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{b})'\boldsymbol{t} + \frac{\boldsymbol{t}'(\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{A}')\boldsymbol{t}}{2}\right) \end{aligned}$$

これは $\mathrm{N}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{A}')$ の mgf. □

系 1. $\boldsymbol{x} \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ なら $i = 1, \dots, n$ について

$$x_i \sim \mathrm{N}\left(\mu_i, \sigma_i^2\right)$$

証明. 前定理において

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &:= (1, 0, \dots, 0) \\ \boldsymbol{b} &:= 0 \end{aligned}$$

などとすればよい. □

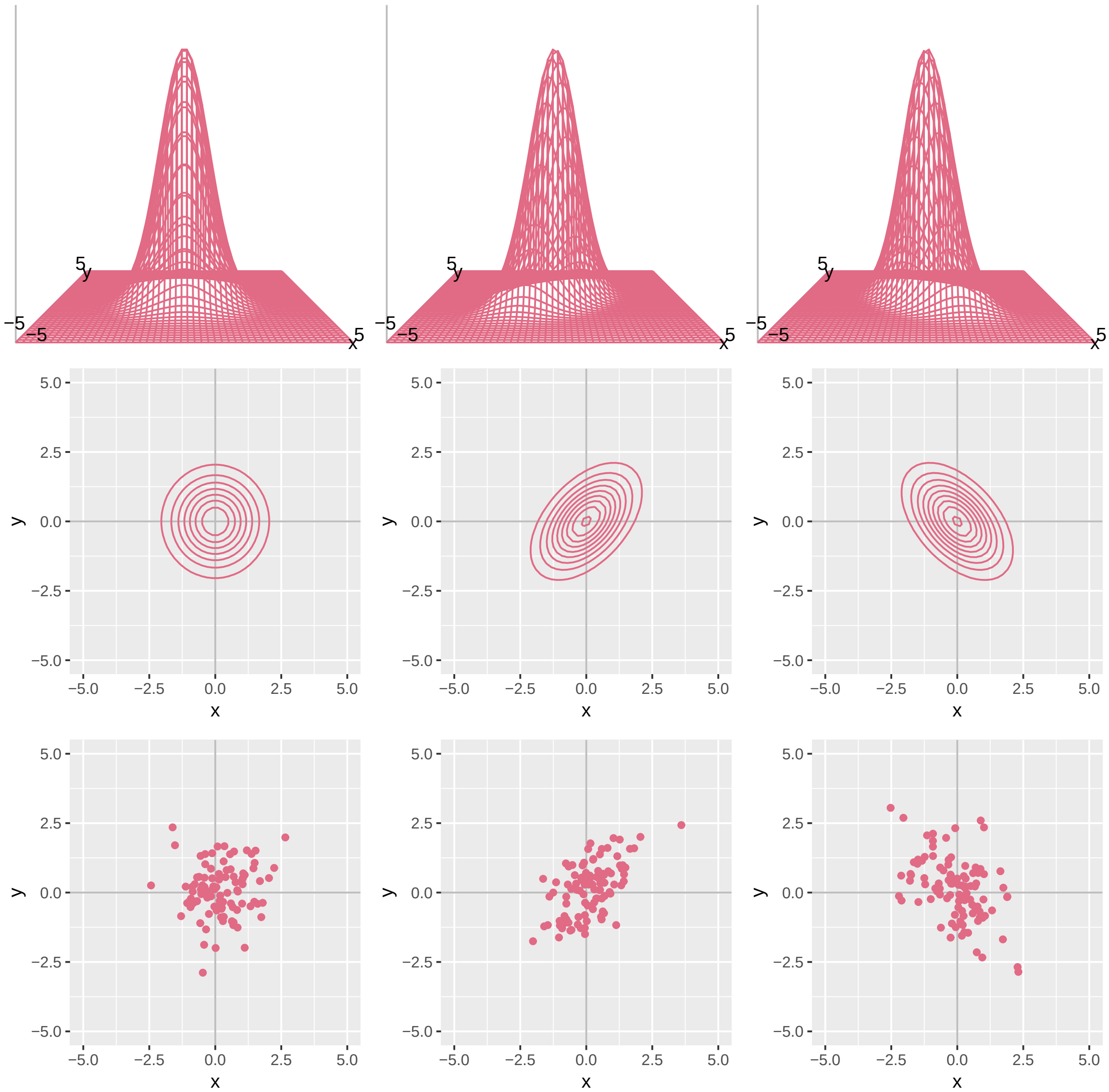

図 1　2 変量正規分布の同時 pdf（3D グラフ・等高線）と 2 変量正規乱数の散布図

4.2　独立と無相関

定理 4. $\boldsymbol{x} \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ なら

$$x_1, \dots, x_n \text{ は独立} \iff x_1, \dots, x_n \text{ は無相関}$$

証明．“$\Longrightarrow$” すでに見た（正規分布でなくても成立）．“$\Longleftarrow$” 無相関なので $\boldsymbol{\Sigma}$ は対角．したがって

$$\det(\boldsymbol{\Sigma}) = \sigma_1^2 \cdots \sigma_n^2$$

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/\sigma_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/\sigma_n^2 \end{bmatrix}$$

同時 pdf に代入すると，任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ について

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &:= (2\pi)^{-n/2} \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-1/2} \\ &\quad \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right) \\ &= (2\pi)^{-n/2}\left(\sigma_1^2 \cdots \sigma_n^2\right)^{-1/2} \\ &\quad \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{(x_i-\mu_i)^2}{\sigma_i^2}\right) \\ &= (2\pi)^{-1/2}\left(\sigma_1^2\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{(x_1-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}\right)\cdots \\ &\quad (2\pi)^{-1/2}\left(\sigma_n^2\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{(x_n-\mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right) \\ &= f_1(x_1)\cdots f_n(x_n) \end{aligned}$$

ただし $f_1(.), \dots, f_n(.)$ は $x_1, \dots, x_n$ の周辺 pdf. $\square$

4.3 条件つき分布

定理 5. $(\boldsymbol{x}_1', \boldsymbol{x}_2')' \sim \mathrm{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ なら

$$\boldsymbol{x}_1 | \boldsymbol{x}_2 \sim \mathrm{N}\left(\boldsymbol{\mu}_{1|2}, \boldsymbol{\Sigma}_{11|2}\right)$$

ただし

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{1|2} &:= \boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ \boldsymbol{\Sigma}_{11|2} &:= \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \end{aligned}$$

証明. 条件つき pdf の定義より

$$f_{1|2}(\boldsymbol{x}_1 | \boldsymbol{x}_2) := \frac{f_{1,2}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2)}{f_2(\boldsymbol{x}_2)}$$

これをひたすら計算する（かなり面倒）. $\square$

5 畳み込み（p. 150）

定義 18. 独立な確率変数の和の分布を求めることを**畳み込み**という.

注 9. 畳み込みは mgf を用いるのが簡単. X と Y が独立なら

$$\begin{aligned} M_{X+Y}(t) &:= \mathrm{E}\left(\mathrm{e}^{t(X+Y)}\right) \\ &= \mathrm{E}\left(\mathrm{e}^{tX}\right)\mathrm{E}\left(\mathrm{e}^{tY}\right) \\ &= M_X(t) M_Y(t) \end{aligned}$$

定義 19. 畳み込んでも分布の型が変わらない性質を**再生性**という.

例 3. 成功確率が等しい 2 項分布, ポアソン分布, 正規分布.

定理 6. $X \sim \mathrm{N}\left(\mu_X, \sigma_X^2\right)$, $Y \sim \mathrm{N}\left(\mu_Y, \sigma_Y^2\right)$ が独立なら

$$X + Y \sim \mathrm{N}\left(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2\right)$$

証明. $X + Y$ の mgf は

$$\begin{aligned} &M_{X+Y}(t) \\ &= M_X(t) M_Y(t) \\ &= \exp\left(\mu_X t + \frac{\sigma_X^2 t^2}{2}\right)\exp\left(\mu_Y t + \frac{\sigma_Y^2 t^2}{2}\right) \\ &= \exp\left((\mu_X + \mu_Y)t + \frac{\left(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2\right)t^2}{2}\right) \end{aligned}$$

これは $\mathrm{N}\left(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2\right)$ の mgf. $\square$

6 今日のキーワード

n 変量正規分布, n 変量標準正規分布, 平均ベクトル, 分散共分散行列, 正規分布の性質（線形変換, 周辺分布, 独立と無相関, 条件つき分布）, 畳み込み, 再生性（2 項分布, ポアソン分布, 正規分布）

7 次回までの準備

復習 教科書第 7 章 3–4 節, 復習テスト 12

予習 教科書第 8 章