8.6 다변수정규분포

D차원 **다변수정규분포(MVN: multivariate Gaussian normal distribution)**의 확률밀도함수는 평균벡터 μ 와 공분산행렬 Σ 라는 두 개의 모수를 가지며 다음과 같은 수식으로 정의한다.

$$\mathcal{N}(x; \mu, \Sigma) = \dfrac{1}{(2\pi)^{D/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp \left(-\dfrac{1}{2} (x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu) \right) \tag{8.6.1}$$

이 식에서 각 기호의 의미는 다음과 같다.

- $x \in \mathbf{R}^D$ 확률변수벡터
- $\mu \in \mathbf{R}^D$ 평균벡터
- $\Sigma \in \mathbf{R}^{D\times D}$ 공분산행렬

다변수정규분포에서 공분산행렬은 양의 정부호인 대칭행렬이어야 한다. 따라서 역행렬이 항상 존재한다. 공분산행렬의 역행렬 Σ^{-1} 을 정밀도행렬(precision matrix)이라고 한다.

예제

다음과 같은 2차원($D=2$) 다변수정규분포를 생각하자. 2차원이므로 확률변수벡터는

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{8.6.2}$$

이다.

만약 모수가 다음과 같다고 하자.

$$\mu = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}. \quad \Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{8.6.3}$$

공분산행렬로부터 x_1과 x_2가 독립이라는 것을 알 수 있다. 확률밀도함수를 구하면 다음과 같다.

$$|\Sigma| = 1. \quad \Sigma^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{8.6.4}$$

$$\begin{aligned} (x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu) &= \begin{bmatrix} x_1 - 2 & x_2 - 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 3 \end{bmatrix} \\ &= (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 \end{aligned} \tag{8.6.5}$$

$$\mathcal{N}(x_1, x_2) = \dfrac{1}{2\pi} \exp \left(-\dfrac{1}{2} \left((x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 \right) \right) \tag{8.6.6}$$

확률밀도함수값이 같은 등고선은 원이 된다.

$$(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 = r^2 \tag{8.6.7}$$

사이파이의 stats 서브패키지는 다변수정규분포를 위한 `multivariate_normal()` 명령을 제공한다. `mean` 인수로 평균벡터를, `cov` 인수로 공분산행렬을 받는다. `multivariate_normal()` 명령으로 위 확률밀도함수를 그리고 랜덤 표본을 생성하면 다음 그림과 같다.

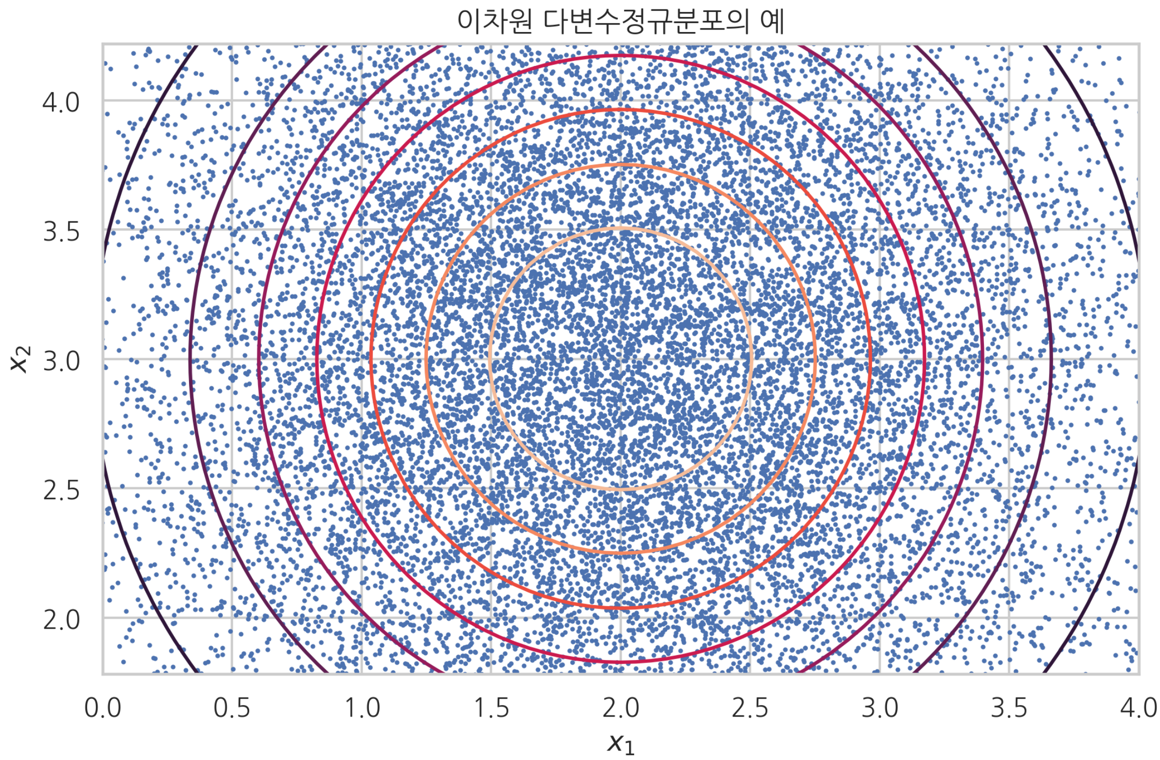
In [1]:

```
mu = [2, 3]
cov = [[1, 0], [0, 1]]

rv = sp.stats.multivariate_normal(mu, cov)
X = rv.rvs(20000)

xx = np.linspace(-1, 6, 120)
yy = np.linspace(-1, 6, 150)
XX, YY = np.meshgrid(xx, yy)

plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=1)
plt.contour(XX, YY, rv.pdf(np.dstack([XX, YY])))
plt.axis("equal")
plt.xlim(0, 4)
plt.ylim(2, 4)
plt.xlabel("$x_1$")
plt.ylabel("$x_2$")
plt.title("이차원 다변수정규분포의 예")
plt.show()
```



예제

만약 모수가 다음과 같다고 하자. 공분산행렬로부터 x_1과 x_2가 양의 상관관계가 있다는 것을 알 수 있다.

$$\mu = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}. \quad \Sigma = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} \tag{8.6.8}$$

이 때 확률밀도함수는 다음과 같다.

$$|\Sigma| = 5, \quad \Sigma^{-1} = \begin{bmatrix} 1.4 & -0.6 \\ -0.6 & 0.4 \end{bmatrix} \tag{8.6.9}$$

$$\begin{aligned} (x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu) &= \begin{bmatrix} x_1 - 2 & x_2 - 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.4 & -0.6 \\ -0.6 & 0.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 3 \end{bmatrix} \\ &= \frac{7}{5}(x_1-2)^2 - \frac{6}{5}(x_1-2)(x_2-3) + \frac{2}{5}(x_2-3)^2 \end{aligned} \tag{8.6.10}$$

$$\mathcal{N}(x_1, x_2) = \frac{1}{2\sqrt{5}\pi}\exp\left(\frac{7}{5}(x_1-2)^2 - \frac{6}{5}(x_1-2)(x_2-3) + \frac{2}{5}(x_2-3)^2\right) \tag{8.6.11}$$

이 확률밀도함수의 모양은 다음과 같이 회전변환된 타원 모양이 된다.

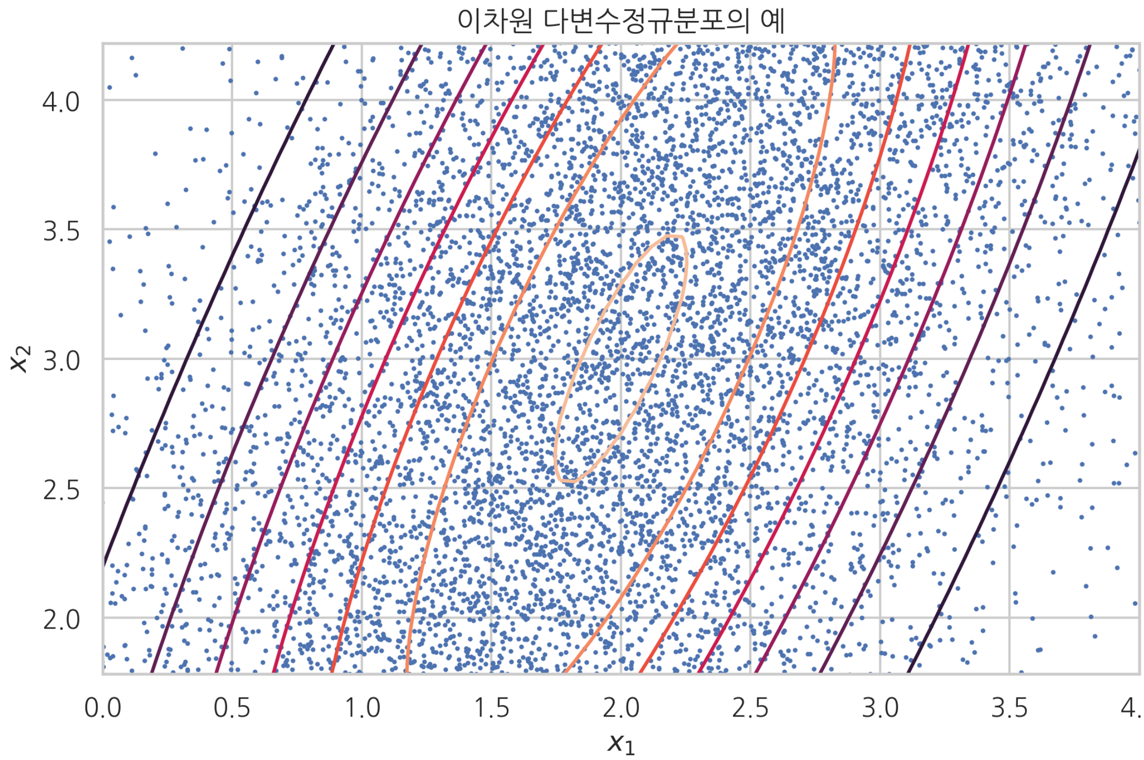
In [2]:

```
mu = [2, 3]
cov = [[2, 3], [3, 7]]

rv = sp.stats.multivariate_normal(mu, cov)
X = rv.rvs(20000)

xx = np.linspace(-1, 6, 120)
yy = np.linspace(-1, 6, 150)
XX, YY = np.meshgrid(xx, yy)

plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=1)
plt.contour(XX, YY, rv.pdf(np.dstack([XX, YY])))
plt.axis("equal")
plt.xlim(0, 4)
plt.ylim(2, 4)
plt.xlabel("$x_1$")
plt.ylabel("$x_2$")
plt.title("이차원 다변수정규분포의 예")
plt.show()
```



다변수정규분포와 고윳값 분해

다변수정규분포의 공분산행렬 Σ은 양의 정부호인 대칭행렬이므로 대각화가능(diagonalizable)이다. 정밀도행렬 Σ^{-1}은 다음처럼 분해할 수 있다. 이 식에서 Λ는 고윳값행렬, V는 고유벡터행렬이다.

$$\Sigma^{-1} = V\Lambda^{-1}V^T \tag{8.6.12}$$

이를 이용하면 확률밀도함수는 다음처럼 좌표 변환할 수 있다.

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(x) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T V\Lambda^{-1}V^T(x-\mu)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(V^T(x-\mu))^T\Lambda^{-1}(V^T(x-\mu))\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(V^{-1}(x-\mu))^T\Lambda^{-1}(V^{-1}(x-\mu))\right) \end{aligned} \tag{8.6.13}$$

이 식에서

$$x' = V^{-1}(x-\mu) \tag{8.6.14}$$

라고 하자. 이 식은 변환행렬 V^{-1}의 열벡터인 고유벡터를 새로운 축으로 가지도록 회전하고 μ벡터 방향으로 평행이동하는 것을 뜻한다.

최종 확률밀도함수식은 다음과 같다. 이 식에서 Λ는 고윳값 λ_i를 대각성분으로 가지는 대각행렬이므로 새로운 좌표 x'에서 확률밀도함수는 타원이 된다. 타원의 반지름은 고윳값 크기에 비례한다. 반대로 이야기하면 원래 좌표에서 확률밀도함수는 μ를 중심으로 가지고 고윳값에 비례하는 반지름을 가진 타원을 고유벡터 방향으로 회전시킨 모양이다.

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(x) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}x'^T\Lambda^{-1}x'\right) \\ &\propto \exp\left(\frac{x'^2_1}{\lambda_1^2} + \frac{x'^2_2}{\lambda_2^2} + \cdots + \frac{x'^2_D}{\lambda_D^2}\right) \end{aligned} \tag{8.6.15}$$

예를 들어 위의 두번째 예제에서 공분산행렬을 고유분해하면 다음과 같다.

In [3]:

```
mu = [2, 3]
cov = [[4, 3], [3, 5]]
w, V = np.linalg.eig(cov)
```

고윳값은 $\lambda_1 = 1.46$, $\lambda_2 = 7.54$다.

In [4]:

```
w
```

Out[4]:

```
array([1.45861873, 7.54138127])
```

고유벡터는 $v_1 = (-0.763, 0.646)$, $v_2 = (-0.646, -0.763)$이다.

In [5]:

```
V
```

Out[5]:

```
array([[-0.76301998, -0.6463749 ],
       [ 0.6463749 , -0.76301998]])
```

따라서 확률밀도함수가 고유벡터 $v_1 = (-0.763, 0.646)$와 $v_2 = (-0.646, -0.763)$를 축으로하는 타원형임을 알 수 있다

In [6]:

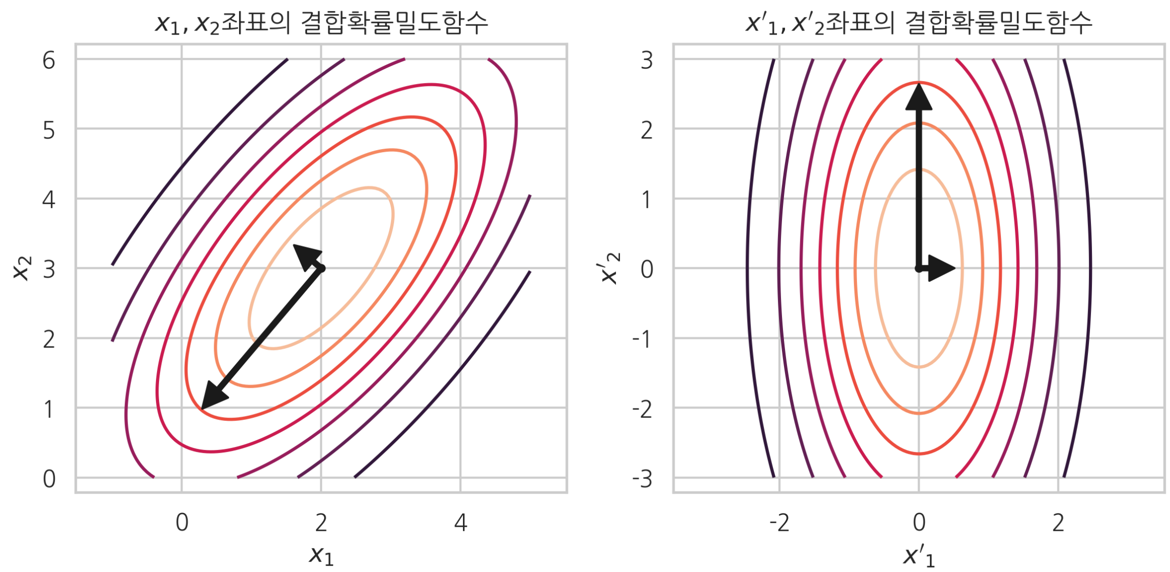
```
plt.figure(figsize=(8, 4))

d = dict(facecolor="k", edgecolor="k", width=2)

plt.subplot(121)
xx = np.linspace(-1, 5, 120)
yy = np.linspace(0, 6, 150)
XX, YY = np.meshgrid(xx, yy)
rv1 = sp.stats.multivariate_normal(mu, cov)
plt.contour(XX, YY, rv1.pdf(np.dstack([XX, YY])))
plt.annotate("", xy=(mu + 0.35 * w[0] * V[:, 0]), xytext=mu, arrowprops=d)
plt.annotate("", xy=(mu + 0.35 * w[1] * V[:, 1]), xytext=mu, arrowprops=d)
plt.scatter(mu[0], mu[1], s=10, c="k")
plt.axis("equal")
plt.xlabel("$x_1$")
plt.ylabel("$x_2$")
plt.title("$x_1,x_2$좌표의 결합확률밀도함수")

plt.subplot(122)
xx = np.linspace(-3, 3, 120)
yy = np.linspace(-3, 3, 150)
XX, YY = np.meshgrid(xx, yy)
rv2 = sp.stats.multivariate_normal((0,0), w)  # 좌표 변환
plt.contour(XX, YY, rv2.pdf(np.dstack([XX, YY])))
plt.annotate("", xy=(0.35 * w[0] * np.array([1, 0])), xytext=(0,0), arrowprops=d)
plt.annotate("", xy=(0.35 * w[1] * np.array([0, 1])), xytext=(0,0), arrowprops=d)
plt.scatter(0, 0, s=10, c="k")
plt.axis("equal")
plt.xlabel("$x'_1$")
plt.ylabel("$x'_2$")
plt.title("$x'_1,x'_2$좌표의 결합확률밀도함수")

plt.tight_layout()
plt.show()
```



연습 문제 8.6.1

다음과 같은 평균벡터와 공분산행렬을 가지는 2차원 다변수정규분포의 확률밀도함수의 모양은 어떻게 되는가?

$$\mu = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ -3 & 4 \end{bmatrix} \tag{8.6.16}$$

다변수정규분포의 조건부확률분포

> **[정리] 다변수정규분포인 확률변수벡터 중 어떤 원소의 값이 주어지면 다른 확률변수의 조건부 확률분포는 다변수정규분포다.**

즉 다변수정규분포 확률밀도함수를 자른 단면은 다변수정규분포가 된다.

예를 들어 확률변수 X의 값 x를 두 벡터 x_1과 x_2로 나누었을 때

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{8.6.17}$$

x_2값이 주어지면(관측되면), X_1만의 확률밀도함수가 다변수정규분포를 이루는 것을 증명하자.

x_1과 x_2에 따라 기댓값벡터도 μ_1과 μ_2로 나뉘어진다.

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} \tag{8.6.18}$$

공분산행렬 Σ도 다음처럼 나뉘어진다.

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix} \tag{8.6.19}$$

공분산행렬의 역행렬인 정밀도행렬 Λ도 마찬가지로 분할한다.

$$\Lambda = \Sigma^{-1} = \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{bmatrix} \tag{8.6.20}$$

이 때 Σ와 Λ가 대칭행렬이므로 Λ_{11}와 Λ_{22}도 대칭행렬이고 $\Lambda_{12} = \Lambda_{21}$이다.

이를 적용하면

$$(x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu) = (x_1 - \mu_{1|2})^T \Lambda_{11} (x_1 - \mu_{1|2}) + C(x_2, \mu, \Sigma) \tag{8.6.21}$$

가 된다. 이 식에서 조건부기댓값 $\mu_{1|2}$는

$$\mu_{1|2} = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (x_2 - \mu_2) \tag{8.6.22}$$

이다. C는 x_1을 포함하지 않은 항을 가리키며 다음과 같다.

$$\begin{aligned} C = & \mu_1^T \Lambda_{11} \mu_1 - 2\mu_1^T \Lambda_{12} (x_2 - \mu_2) + (x_2 - \mu_2)^T \Lambda_{22} (x_2 - \mu_2) \\ & - (x_2 - \mu_2)^T \Lambda_{12}^T \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (x_2 - \mu_2) \end{aligned} \tag{8.6.23}$$

이 식에 지수함수를 적용하면

$$p(x_1 | x_2) = C' \exp\left((x_1 - \mu_{1|2})^T \Lambda_{11} (x_1 - \mu_{1|2}) \right) \tag{8.6.24}$$

가 된다. 이 식에서 $C' = \exp C$다.

즉 x_2가 어떤 값으로 주어지면 x_1은 조건부기댓값 $\mu_{1|2}$와 조건부공분산행렬 $\Sigma_{1|2}$를 가지는 다변수정규분포가 된다. $\Sigma_{1|2}$은 분할행렬의 역행렬공식으로부터 다음과 같다.

$$\Sigma_{1|2} = \Lambda_{11}^{-1} = \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \tag{8.6.25}$$

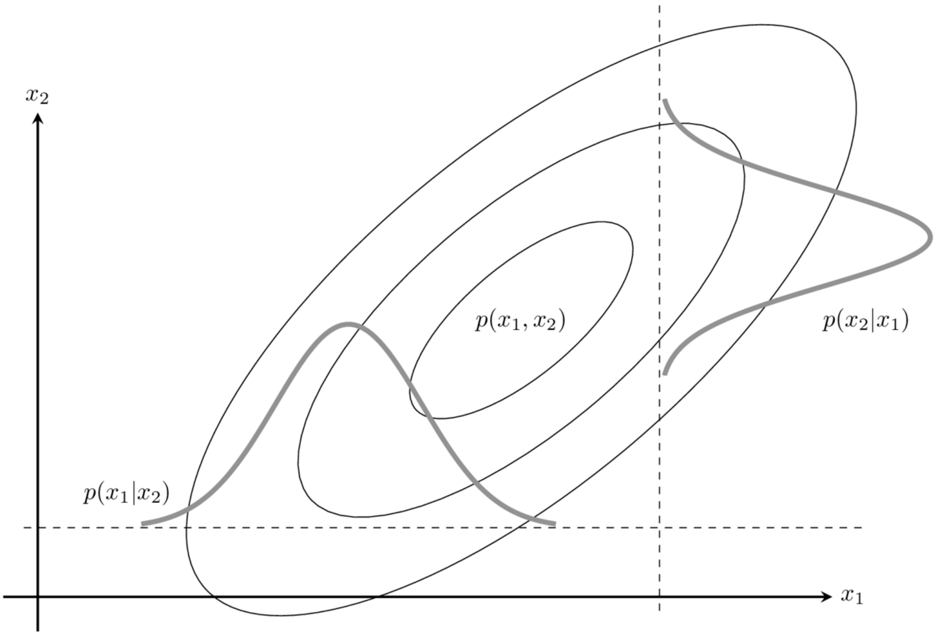


그림 8.6.1 : 다변수정규분포의 조건부확률분포

다변수정규분포의 주변확률분포

[정리] 다변수정규분포의 주변확률분포는 다변수정규분포다.

즉 결합확률밀도함수를 어떤 확률변수의 값으로 적분하여 나머지 확률변수의 주변확률분포를 구하면 다변수정규분포이다. 예를 들어 x_1과 x_2로 이루어진 결합 확률밀도함수 $p(x_1, x_2)$를 x_2로 적분하면 x_1의 주변확률분포는 정규분포가 된다.

$$p(x_1) = \int p(x_1, x_2)dx_2 = \mathcal{N}(x_1; \mu_1, \Sigma_{11}) \tag{8.6.26}$$

x_2의 주변확률분포는의 기댓값은 원래 기댓값벡터 중 x_1 성분과 같고 공분산행렬은 분할행렬 중 Σ_{11} 성분과 같다. 증명은 생략한다.

연습 문제 8.6.2

2차원 다변수정규분포가 다음과 같은 모수를 가진다고 하자.

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \tag{8.6.27}$$

(1) x_2가 주어졌을 때 x_1의 조건부확률분포함수가 다음과 같음을 보여라.

$$\mathcal{N}\left(x_1 \,\middle|\, \mu_1 + \frac{\rho\sigma_1\sigma_2}{\sigma_2^2}(x_2 - \mu_2), \sigma_1^2 - \frac{(\rho\sigma_1\sigma_2)^2}{\sigma_2^2}\right) \tag{8.6.28}$$