定理 3. $\boldsymbol{X}$ が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ の p 変量正規分布に従うとする．$\boldsymbol{X}$ から選ばれた成分に対する周辺分布は，対応する平均，共分散行列の多変量正規分布である．

証明．$\boldsymbol{X} = ((\boldsymbol{X}^{(1)})' \, (\boldsymbol{X}^{(2)})')'$ に対して，以下の正則変換を考える．

$$\boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(2)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix}$$

ここで，$\boldsymbol{Y}^{(1)}$ と $\boldsymbol{Y}^{(2)}$ が無相関となる $\boldsymbol{B}$ を求める．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{O} &= E\left((\boldsymbol{Y}^{(1)} - E(\boldsymbol{Y}^{(1)}))(\boldsymbol{Y}^{(2)} - E(\boldsymbol{Y}^{(2)}))'\right) \\
&= E\left((\boldsymbol{X}^{(1)} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(1)}) - \boldsymbol{B}E(\boldsymbol{X}^{(2)}))(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))'\right) \\
&= E\left((\boldsymbol{X}^{(1)} - E(\boldsymbol{X}^{(1)}) + \boldsymbol{B}(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)})))(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))'\right) \\
&= E\left((\boldsymbol{X}^{(1)} - E(\boldsymbol{X}^{(1)}))(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))'\right) \\
&\quad + E\left(\boldsymbol{B}(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))'\right) \\
&= \boldsymbol{\Sigma}_{12} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{\Sigma}_{22}
\end{aligned}$$

したがって，

$$\boldsymbol{B} = -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}$$

このとき，

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix}$$

は正則行列であるから，定理 1 より $\boldsymbol{Y} = ((\boldsymbol{Y}^{(1)})' \, (\boldsymbol{Y}^{(2)})')'$ は p 変量正規分布に従う．ここで，平均ベクトルは

$$\begin{aligned}
E\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} &= \boxed{\text{読者の演習}} \\
&= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(2)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\nu}^{(1)} \\ \boldsymbol{\nu}^{(2)} \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{\nu}
\end{aligned}$$

であり，共分散行列は

$$\begin{aligned}V(\boldsymbol{Y}) &= E((\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{\nu})(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{\nu})') \\ &= E\begin{pmatrix} (\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})(\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})' & (\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})(\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})' \\ (\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})(\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})' & (\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})(\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})' \end{pmatrix}\end{aligned}$$

である．$\boldsymbol{Y}^{(1)}$ と $\boldsymbol{Y}^{(2)}$ が無相関となるように $\boldsymbol{B}$ をとったから，

$$E((\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})(\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})') = \boldsymbol{O}$$

であり，

$$\begin{aligned}E((\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})(\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})') &= E((\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})(\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})')' \\ &= \boldsymbol{O}\end{aligned}$$

である．また，

$$E((\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})(\boldsymbol{Y}^{(2)}-\boldsymbol{\nu}^{(2)})') = E((\boldsymbol{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})(\boldsymbol{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})') = \boldsymbol{\Sigma}_{22}$$

であり，

$$\begin{aligned}&E((\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})(\boldsymbol{Y}^{(1)}-\boldsymbol{\nu}^{(1)})') \\ &\quad = \boxed{\text{読者の演習}} \\ &\quad = \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \\ &\quad = \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\end{aligned}$$

である．以上から，

$$V(\boldsymbol{Y}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

この $\boldsymbol{Y}$ に対して，$\boldsymbol{Y}^{(2)}$ の周辺分布は，平均ベクトル $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ の多変量正規分布である[1]．このとき，$\boldsymbol{Y}^{(2)} = \boldsymbol{X}^{(2)}$，$\boldsymbol{\nu}^{(2)} = \boldsymbol{\mu}^{(2)}$ であるから，定理は証明された．$\square$

[1] この主張は，3.4 演習問題 問 3 による

3.5 条件付き分布

この節では，$\boldsymbol{X}$ が p 変量正規分布に従うとき，条件付き分布もまた正規分布であることを確認しよう．

定理 4. $\boldsymbol{X}$ を $\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ に分け，平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ と共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ も同様に分割する．このとき，$\boldsymbol{X}$ が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ の p 変量正規分布に従うなら，$\boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$ が与えられたときの $\boldsymbol{X}^{(1)}$ の条件付き分布は，

$$\begin{aligned} \text{平均ベクトル：} \quad & \boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \\ \text{共分散行列：} \quad & \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \end{aligned}$$

の q 変量正規分布である．

証明. 平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ の p 変量正規分布に従う $\boldsymbol{X}$ について，

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix}$$

とする．

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{X}^{(2)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix}$$

とすると，$\boldsymbol{Y} = ((\boldsymbol{Y}^{(1)})' \ (\boldsymbol{Y}^{(2)})')'$ の pdf は

$$f(\boldsymbol{y}^{(1)}; \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}) \cdot f(\boldsymbol{y}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})$$

である[2]．ただし，$f(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ は平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ の多変量正規分布の pdf を表し，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2} = \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$$

である．この結果を利用して，$\boldsymbol{X} = ((\boldsymbol{X}^{(1)})' \ (\boldsymbol{X}^{(2)})')'$ の pdf の別表現を求める．定理 3 の証明とは逆に，$\boldsymbol{X}$ を $\boldsymbol{Y}$ で表すことを考えると正則行列

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix}$$

[2]定理 3 の証明より明らか

の逆行列が

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix}$$

であるから

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix}$$

より，この変換のヤコビアンは

$$J(x_1, \ldots, x_p) = \mod \begin{vmatrix} \boldsymbol{I}_q & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{vmatrix} = 1$$

であるから，$\boldsymbol{X}$ の pdf は

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}) = 1 \cdot & \frac{1}{(2\pi)^{q/2}|\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}|^{1/2}} \\ & \times \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))'\right. \\ & \left. \times \boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))\right] \\ & \times \frac{1}{(2\pi)^{(p-q)/2}|\boldsymbol{\Sigma}_{22}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})\right] \end{aligned} \tag{8}$$

このことから，$\boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$ が与えられた条件の下での $\boldsymbol{X}^{(1)}$ の条件付き pdf は，式 (8) を $f(\boldsymbol{x}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})$ で割ったものであるから

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}^{(1)}|\boldsymbol{x}^{(2)}) &= \frac{f(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})}{f(\boldsymbol{x}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{q/2}|\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}|^{1/2}} \\ &\quad \times \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x}^{(2)}))'\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x}^{(2)}))\right] \end{aligned}$$

ただし，$\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x}^{(2)}) = \boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})$ である．以上から，条件付き pdf である $f(\boldsymbol{x}^{(1)}|\boldsymbol{x}^{(2)})$ が，q 変量正規分布であることが確認できた． □

3.6 演習問題

問 1　$\boldsymbol{X}$ が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)'$，共分散行列

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

の 3 変量正規分布に従うとするとき，$(X_1, X_3)'$ は平均（ア），共分散行列（イ）の正規分布に従う．

1. 文中の（ア）に当てはまるものとして，次の ① ～ ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\mathbf{1}}$

① $(\mu_1, \mu_2)'$　② $(\mu_1, \mu_3)'$　③ $(\mu_2, \mu_3)'$　④ $\boldsymbol{\mu}$

2. 文中の（イ）に当てはまるものとして，次の ① ～ ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\mathbf{2}}$

① $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$　② $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{13} \\ \sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$

③ $\begin{pmatrix} \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$　④ $\boldsymbol{\Sigma}$

問 2 定理 4 より条件付き分布の平均ベクトルは $\boldsymbol{x}^{(2)}$ の $\boxed{\text{(a)}}$ であり，共分散行列は $\boldsymbol{x}^{(2)}$ に $\boxed{\text{(b)}}$．(a) と (b) に当てはまる組み合わせとして，次の ① ～ ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\mathbf{3}}$

① (a) 線形関数　(b) 依存する
② (a) 線形関数　(b) 依存しない
③ (a) 非線形関数　(b) 依存する
④ (a) 非線形関数　(b) 依存しない