平方根の性質

平方根の性質 $\sqrt{a^2} = |a|$ より，

$$\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|} = \sqrt{|\boldsymbol{C}|^2} = \quad \mathrm{mod}\ |\boldsymbol{C}|$$

であることに注意しよう．

2変量正規分布の密度関数

統計解析フリーソフトRを用いて2変量正規分布のpdfを描くことができます（図3）．平均ベクトルと共分散行列の設定は，以下のソースコードから読み取って下さい．
参考：http://www.f.waseda.jp/sakas/R/Rgraphics17.html#persp

```
norm2 = function(x1,x2,r=0.6) {
exp(-(x1^2+x2^2-2*r*x1*x2)/2/(1-r^2)) / 2/pi/sqrt(1-r^2)
}
x1 = x2 = seq(-3, 3, length=50)
f = outer(x1, x2, norm2)
persp(x1, x2, f)
```

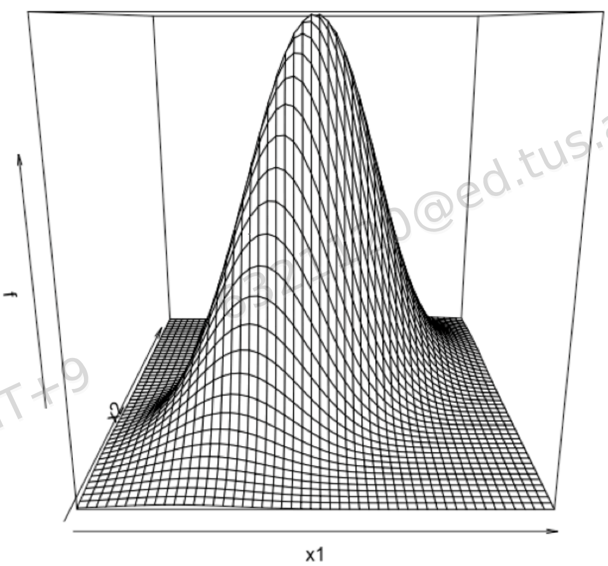

図 3: Rで作図した2変量正規分布のpdf

3.3 正規分布に従う変数の線形結合の分布

この節では，p 変量正規分布に従う確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ の線形結合の分布について考える．

定理 1. $\boldsymbol{X}$ 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．正則行列 $\boldsymbol{C}$ に対して，$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{X}$ は平均ベクトル $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu}$，共分散行列 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}'$ の p 変量正規分布に従う．

証明. $\boldsymbol{C}$ は正則行列であるから，逆変換は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{y}$ である．したがって，変数変換のヤコビアンは

$$J(y_1, \ldots, y_p) = \mod |\boldsymbol{C}^{-1}| = \frac{1}{\mod |\boldsymbol{C}|} = \sqrt{\frac{1}{|\boldsymbol{C}|^2}} = \sqrt{\frac{|\boldsymbol{\Sigma}|}{|\boldsymbol{C}||\boldsymbol{\Sigma}||\boldsymbol{C}'|}}$$

より

$$J(y_1, \ldots, y_p) = \frac{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}{|\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}'|^{1/2}}$$

また，指数部の二次形式は，

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}) &= (\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}) \\
&= (\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu}) \\
&= (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{C}^{-1})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu}) \\
&= (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}')^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})
\end{aligned}$$

したがって，$\boldsymbol{Y}$ の pdf は，

$$\begin{aligned}
g(\boldsymbol{y}) &= f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}))J(y_1, \ldots, y_p) \\
&= \frac{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}{|\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}'|^{1/2}} \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}')^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}'|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}')^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{\mu})\right]
\end{aligned}$$

これは，平均ベクトル $\boldsymbol{C}\boldsymbol{y}$，共分散行列 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{C}'$ の p 変量正規分布の pdf である． □

次に，確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ を分割したときに導かれるいくつかの性質を見ていく．そこで，次の記法を用いることにする．

$$\boldsymbol{X}^{(1)} = (X_1, \dots, X_q)'$$
$$\boldsymbol{X}^{(2)} = (X_{q+1}, \dots, X_p)'$$

だたし，$q < p$ である．このとき，

$$\boldsymbol{X} = ((\boldsymbol{X}^{(1)})' \; (\boldsymbol{X}^{(2)})')' = (X_1, \dots, X_p)' \tag{6}$$

と表される．確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ が結合分布を持つとすれば，期待値ベクトルは，

$$E(\boldsymbol{X}^{(1)}) = (\mu_1, \dots, \mu_q)' = \boldsymbol{\mu}^{(1)}, \quad E(\boldsymbol{X}^{(2)}) = (\mu_{q+1}, \dots, \mu_p)' = \boldsymbol{\mu}^{(2)}$$

と表され，共分散行列は，

$$E\left((\boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})(\boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})'\right) = \boldsymbol{\Sigma}_{11}$$
$$E\left((\boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})'\right) = \boldsymbol{\Sigma}_{12}$$
$$E\left((\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})(\boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})'\right) = \boldsymbol{\Sigma}_{21}$$
$$E\left((\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})'\right) = \boldsymbol{\Sigma}_{22}$$

と表される．ただし，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}' = \boldsymbol{\Sigma}_{21}$ である．式 (6) のように表される確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ に対して，

$$E(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad V(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

と表されることに注意する．

定理 2. $\boldsymbol{X}$ 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．$\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ が独立であるための必要十分条件は $\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ である．ただし，$\boldsymbol{O}$ は零行列である．

証明．$\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ が独立であることを仮定し，$\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ を示す．

$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の第 i 成分 X_i と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の第 j 成分 X_j との共分散は，

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} &= E\left((X_i-\mu_i)(X_j-\mu_j)\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}(x_i-\mu_i)(x_j-\mu_j)f(x_1,\ldots,x_p;\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})dx_1\cdots dx_p \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}(x_i-\mu_i)(x_j-\mu_j) \\
&\quad \times f(x_1,\ldots,x_q;\boldsymbol{\mu}^{(1)},\boldsymbol{\Sigma}_{11})f(x_{q+1},\ldots,x_p;\boldsymbol{\mu}^{(2)},\boldsymbol{\Sigma}_{22})dx_1\cdots dx_p \\
&= \boxed{\text{読者の演習}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

したがって，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\Sigma}_{21}'=\boldsymbol{O}$ を得る．

次に，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\Sigma}_{21}'=\boldsymbol{O}$ を仮定し，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ が独立であることを示す．仮定より，

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{pmatrix}$$

であり，その逆行列は，

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\end{pmatrix}$$

である．このとき，指数部の二次形式は，

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) \\
&= \left((\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})'\ (\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'\right)\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)}\end{pmatrix} \\
&= \left((\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\ (\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\right)\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)}\end{pmatrix} \\
&= (\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})+(\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})
\end{aligned}$$

である．また，

$$|\boldsymbol{\Sigma}|=|\boldsymbol{\Sigma}_{11}||\boldsymbol{\Sigma}_{22}| \tag{7}$$

であることから，$\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ のとき，確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ の pdf は

$$\begin{aligned}
&f(x_1, \dots, x_p; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) \\
&= \boxed{\text{読者の演習}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{q/2}|\boldsymbol{\Sigma}_{11}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})\right] \\
&\quad \times \frac{1}{(2\pi)^{(p-q)/2}|\boldsymbol{\Sigma}_{22}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})\right]
\end{aligned}$$

である．ここで，

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

とおく．このとき，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の周辺 pdf は，

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_p; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) dx_{q+1} \cdots dx_p \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(\boldsymbol{x}^{(1)}; \boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\Sigma}_{11}) f(\boldsymbol{x}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22}) dx_{q+1} \cdots dx_p \\
&= f(\boldsymbol{x}^{(1)}; \boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\Sigma}_{11}) \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(\boldsymbol{x}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22}) dx_{q+1} \cdots dx_p \\
&= f(\boldsymbol{x}^{(1)}; \boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\Sigma}_{11})
\end{aligned}$$

同様にして，$\boldsymbol{X}^{(2)}$ の周辺 pdf は，

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_p; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) dx_1 \cdots dx_q &= \boxed{\text{読者の演習}} \\
&= f(\boldsymbol{x}^{(2)}; \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})
\end{aligned}$$

したがって，$\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ のとき，確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ の pdf は $\boldsymbol{X}^{(1)}$ の周辺 pdf と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の周辺 pdf との積で表せる．すなわち，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ は独立である． □

3.4 演習問題

問 1 式 (7) が成り立つことを証明する．

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \text{（ア）} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

である．このことから，

$$|\boldsymbol{\Sigma}| = \begin{vmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \text{（ア）} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \boldsymbol{I}_q & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{vmatrix}$$

であり，右辺に対して余因子展開を用いて

$$|\boldsymbol{\Sigma}| = |\boldsymbol{\Sigma}_{11}||\boldsymbol{\Sigma}_{22}|$$

を得る．

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． $\boxed{\textbf{1}}$

① $\boldsymbol{I}_p$　② $\boldsymbol{I}_q$　③ $\boldsymbol{I}_{p-q}$　④ $\boldsymbol{I}_{q-p}$

問 2 $\boldsymbol{X}$ が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ 0 & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

の 3 変量正規分布に従うとするとき，（イ）である．

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． $\boxed{\textbf{2}}$

① X_1 と (X_2, X_3) は独立　② X_2 と (X_1, X_3) は独立

③ X_3 と (X_1, X_2) は独立　④ X_1, X_2, X_3 は互いに独立

問 3　定理2「$\boldsymbol{X}$ 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．$\boldsymbol{X}^{(1)}$ と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ が独立であるための必要十分条件は $\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ である」の証明から導かれることとして，次の ① ～ ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\textbf{3}}$

① $\boldsymbol{X}$ 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．$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の従う分布は，平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(2)}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ の q 変量正規分布である．

② $\boldsymbol{X}$ 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．$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の従う分布は，平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(1)}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ の $p-q$ 変量正規分布である．

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．$\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ であるとき，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の従う分布は平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(1)}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ の q 変量正規分布である．

④ $\boldsymbol{X}$ 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．$\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}' = \boldsymbol{O}$ であるとき，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ の従う分布は平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}^{(1)}$，共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ の $p-q$ 変量正規分布である．

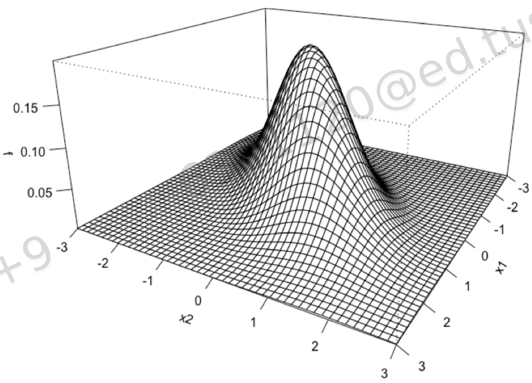

図 4:　ソースコードの最後の行を `persp(x1, x2, f, theta=120, phi=20, expand=0.5, ticktype="detailed")` とすると図3を回転させたものが描画できます．