多変量解析 レポート課題

東京理科大学 創域理工学研究科 情報計算科学専攻 田畑研

学籍番号 6323532

仲田 尚生

2023 年 6 月 30 日

目次

1　解答例

1. 正方行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ を

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

とする．このとき，$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}'$ を満たす正則行列 $\boldsymbol{C}$ を 1 つ挙げよ．ただし，$'$ は転置を表す．

解）$\boldsymbol{\Sigma} = \left(\begin{smallmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{smallmatrix}\right)$ を直交行列 $\boldsymbol{P}$ で対角化する．$\boldsymbol{\Sigma}$ の固有方程式は，

$$0 = \det(\boldsymbol{\Sigma} - \lambda \boldsymbol{I}_2) = \det\begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = (2-\lambda)^2 - 1 = (1-\lambda)(3-\lambda)$$

であるから，$\boldsymbol{\Sigma}$ の固有値は $1, 3$ となる．そして固有値 $1, 3$ に対応する固有ベクトルはそれぞれ，

$$s\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (s \neq 0), \qquad t\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (t \neq 0)$$

である．従って，$\left\{\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ -1 \end{smallmatrix}\right), \left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)\right\}$ から正規直交基底を構成すると，$\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ -1 \end{smallmatrix}\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)\right\}$ であるから，

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

とすれば，$\boldsymbol{P}$ は直交行列 (i.e. $\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}'$) であり，

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{\Lambda} \tag{1.1}$$

である．よって，$\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{smallmatrix}\right)$ とすると，$\boldsymbol{\Lambda} = (\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}})^2$ より，(1.1) 式は，

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}' = (\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}})(\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}})'$$

と書き直せる．故に，$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$ とすれば，$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}'$ を満たす．ここに，$\boldsymbol{C}$ を成分表示すると次のようになる．

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

2. $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2)'$ が平均ベクトル $(0,1)'$，分散共分散行列

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

の 2 変量正規分布に従うとする．このとき，$\boldsymbol{X}$ の確率密度関数を行列・ベクトルを用いずに示せ．

解答）r.v.[1] $\boldsymbol{X} = \binom{X_1}{X_2} \sim N_2(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma})$ の p.d.f.[2] を $f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$ $\left(\boldsymbol{x} = \binom{x_1}{x_2} \in \mathbb{R}^2\right)$ とする．ここに，

$$\boldsymbol{\mu}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

である．このとき，

$$\det \boldsymbol{\Sigma} = 3, \quad \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

より，$f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$ は次のように求まる．

$$\begin{aligned}
f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^{2/2}(\det \boldsymbol{\Sigma})^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi \cdot \sqrt{3}} \exp\left[-\frac{1}{2}\begin{pmatrix} x_1 & x_2 - 1 \end{pmatrix}\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}\,\pi} \exp\left[-\frac{2x_1^2 - 2x_1(x_2-1) + 2(x_2-1)^2}{6}\right] \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}\,\pi} \exp\left[-\frac{x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 + x_1 - 2x_2 + 1}{3}\right]
\end{aligned}$$

注意 1.1. 統計では，大文字の変数 “X” は確率変数（関数[3]）を表し，小文字の変数 “x” は実現値（確率変数 X から観測された値）を表している．一方，p.d.f.（p.m.f.[2]）は，r.v. X がある値 x をとる確率密度（確率）を表している．つまり，確率密度関数などを記述するときは，以下のように大文字を使ってはならない．

$$\frac{1}{2\sqrt{3}\,\pi} \exp\left[-\frac{X_1^2 - X_1X_2 + X_2^2 + X_1 - 2X_2 + 1}{3}\right]$$

[1] r.v.：確率変数 (確率ベクトル)，random variable (random vector)
[2] p.d.f.：確率密度関数，probability density function / p.m.f.：確率量関数，probability mass function
[3] 単変量であれば，X は標本空間 Ω 上の可測空間 $(\Omega, \mathscr{F})$ から実数空間 $\mathbb{R}$ 上の可測空間 $(\mathbb{R}, \mathscr{B}(\mathbb{R}))$ への関数（可測関数）である．$X : (\Omega, \mathscr{F}) \to (\mathbb{R}, \mathscr{B}(\mathbb{R}))$

3. 1 で求めた $\boldsymbol{C}$ を用いて,

$$\boldsymbol{Z} = \begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{C}^{-1}\left(\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right)$$

とする．$\boldsymbol{Z}$ の確率密度関数を求めよ.

解) $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}_0)$ なる変換を考えると，逆変換は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}_0$ ($\boldsymbol{z} = (z_1, z_2)' \in \mathbb{R}^2$) より，ヤコビアン $J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{z})$ は,

$$J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{z}) = \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{z}}\right| = |\det \boldsymbol{C}'| = |\det \boldsymbol{C}| = (\det \boldsymbol{\Sigma})^{\frac{1}{2}}$$

となる[1]．よって，$\boldsymbol{Z}$ の p.d.f. $f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z})$ は次のように求まる.

$$\begin{aligned}
f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z}) &= f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}_0) \cdot J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{z}) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{2/2}(\det \boldsymbol{\Sigma})^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_0)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_0)\right] \cdot (\det \boldsymbol{\Sigma})^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{2/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{z}'\boldsymbol{C}'(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}')^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{z}\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{2/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{z}'\boldsymbol{C}'(\boldsymbol{C}')^{-1}(\boldsymbol{C})^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{z}\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{2/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}\right]
\end{aligned} \tag{3.1}$$

[1] ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ をベクトル $\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ で微分：$\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{z}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \boldsymbol{z}} & \frac{\partial x_2}{\partial \boldsymbol{z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} & \frac{\partial x_2}{\partial z_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial z_2} & \frac{\partial x_2}{\partial z_2} \end{pmatrix}$

4. 正則行列 $\boldsymbol{D}$ を

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix}$$

とし，$\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2)'$ を実ベクトルとする．このとき，3 で定めた $\boldsymbol{Z}$ を用いて，

$$\boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{DZ} + \boldsymbol{\mu}$$

と定義した $\boldsymbol{Y}$ の従う分布を求めよ．

解) $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{DZ} + \boldsymbol{\mu}$ なる変換を考えると，逆変換は $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})$ ($\boldsymbol{y} = (y_1, y_2)' \in \mathbb{R}^2$) より，ヤコビアン $J(\boldsymbol{z} \to \boldsymbol{y})$ は，

$$J(\boldsymbol{z} \to \boldsymbol{y}) = \left| \det \frac{\partial \boldsymbol{z}}{\partial \boldsymbol{y}} \right| = \left| \det(\boldsymbol{D}^{-1})' \right| = |\det \boldsymbol{D}^{-1}| = \frac{1}{|\det \boldsymbol{D}|}$$

となる．よって，$\boldsymbol{Y}$ の p.d.f. $f_{\boldsymbol{Y}}(\boldsymbol{y})$ は，

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{Y}}(\boldsymbol{y}) &= f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})) \cdot J(\boldsymbol{z} \to \boldsymbol{y}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}))'(\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})) \right] \cdot \frac{1}{|\det \boldsymbol{D}|} \\ &= \frac{1}{2\pi |\det \boldsymbol{D}|} \exp\left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{D}^{-1})'\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi |\det \boldsymbol{D}|} \exp\left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})'(\boldsymbol{DD}')^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2/2} (\det \boldsymbol{T})^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{T}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}) \right] \end{aligned}$$

と求まる．ここに，$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{DD}'$ である．今，任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$ に対して，$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{Tx} \rangle = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{Tx} = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{DD}'\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{D}'\boldsymbol{x})'\boldsymbol{D}'\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{D}'\boldsymbol{x}\|^2 \geq 0$ であり，等号成立は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}_2 = (0,0)'$ のとき，かつそのときに限る ($\because$ $\boldsymbol{D}$ が正則)．このことから $\boldsymbol{T}$ は正定値行列である．よって，$\boldsymbol{Y}$ は平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$, 分散共分散行列 $\boldsymbol{T}$ の 2 変量正規分布に従う (i.e. $\boldsymbol{Y} \sim N_2(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{T})$).

5. 3 で定めた $\boldsymbol{Z}$ について，Z_1 と Z_2 は独立といえるか (必ず解答に至った理由を記述すること).

解) Z_1, Z_2 の j.p.d.f.[1]は (3.1) 式より，

$$f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{z_1^2}{2}}\right)\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{z_2^2}{2}}\right)$$

と表せる．今，Z_1, Z_2 の m.p.d.f.[2]をそれぞれ $f_{Z_1}(z_1), f_{Z_2}(z_2)$ とすると，

$$f_{Z_1}(z_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z})\,dz_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{z_1^2}{2}} \quad (z_1 \in \mathbb{R})$$
$$f_{Z_2}(z_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z})\,dz_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{z_2^2}{2}} \quad (z_2 \in \mathbb{R})$$

であるから，

$$f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z}) = f_{Z_1}(z_1)\cdot f_{Z_2}(z_2)$$

と書け，Z_1, Z_2 は独立であると言える．

注意 1.2. 「$\mathrm{Cov}[Z_1, Z_2] = E[(Z_1 - E[Z_1])(Z_2 - E[Z_2])] = E[Z_1Z_2] = 0$ より Z_1, Z_2 は独立である」は大きな間違いである．例えば，

$$\Pr(Z_1 = i, Z_2 = j) = \frac{1}{5} \quad ((i,j) \in \{(-1,-1),(-1,1),(0,0),(1,-1),(1,1)\})$$

なる r.v. Z_1, Z_2 を考えると，$\mathrm{Cov}[Z_1, Z_2] = 0$ (無相関) だが，

$$\Pr(Z_1 = 1, Z_2 = 1) = \frac{1}{5} \neq \frac{4}{25} = \Pr(Z_1 = 1)\cdot\Pr(Z_2 = 1)$$

(独立ではない) となる．しかし，$(Z_1, Z_2)'$ が正規分布に従っているとき，“無相関ならば独立” となる．

注意 1.3. r.v. Z_1, Z_2 がそれぞれ正規分布に従っていたとしても，$(Z_1, Z_2)'$ が正規分布に従うとは限らない．

例 1.1. r.v. $\boldsymbol{Z} = (Z_1, Z_2)'$ と W を次のように与える．このとき，$Z_1, Z_2, W \sim N(0,1)$ であるが，$(Z_1, W)'$ は正規分布に従わない．

$$\boldsymbol{Z} = \begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{pmatrix} \sim N_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}\right) \ (0 < |\rho| < 1), \quad W = \begin{cases} Z_2 & \text{if. } |Z_2| \geq 1 \\ -Z_2 & \text{if. } |Z_2| < 1 \end{cases}$$

[1] j.p.d.f.：同時 p.d.f.，joint p.d.f.
[2] m.p.d.f.：周辺 p.d.f.，marginal p.d.f.