

# 第 12 回 多変量正規分布 (7.3–7.4)

村澤 康友

2022 年 11 月 11 日

## 今日のポイント

- 1 変量から多変量に正規分布を拡張する.
- 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  $\iff$  無相関. また条件  
つき分布も正規分布.
- 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
1.1	行列とベクトル	1
1.2	ベクトルの内積	1
1.3	行列の演算	1
1.4	行列と連立 1 次方程式	2
2	行列式と逆行列	2
2.1	正方行列	2
2.2	行列式	2
2.3	逆行列	2
3	確率ベクトル	2
4	多変量正規分布	3
4.1	確率密度関数 (p. 147)	3
4.2	積率	3
5	多変量正規分布の性質	3
5.1	線形変換	3
5.2	独立と無相関	3
5.3	条件つき分布	5

6	畳み込み (p. 150)	5
7	今日のキーワード	5
8	次回までの準備	5

## 1 行列

### 1.1 行列とベクトル

定義 1.  $m \times n$  行列は

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

注 1.  $\mathbf{A} := [a_{i,j}]$  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

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

定義 4.  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  の内積は

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

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

### 1.3 行列の演算

$\mathbf{A}, \mathbf{B}$  を行列とする.

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

定義 6.  $m \times n$  行列  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  の和は

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

定義 7. スカラー  $\alpha$  と  $A$  のスカラー積は

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

定義 8.  $l \times m$  行列  $A$  と  $m \times n$  行列  $B$  の積は

$$AB := [(a_{i,}, b_{.,j})]$$

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

定義 9.  $A$  の転置は

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

## 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.

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

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

連立 1 次方程式は

$$Ax = b$$

## 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

$$I_n := \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

### 2.2 行列式

$A$  を  $n$  次正方行列とする.

定義 12.  $A$  の行列式は

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

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

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

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

$$Ax = b$$

$x_1$  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  $\det(A) \neq 0$ .

### 2.3 逆行列

定義 13.  $AB = BA = I_n$  となる  $B$  を  $A$  の逆行列という.

注 4.  $A$  の逆行列を  $A^{-1}$  と書く.

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

練習 1.  $n = 2$  なら

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

となることを確かめなさい.

## 3 確率ベクトル

$x$  を  $n$  次元確率ベクトルとする.

定義 14.  $x$  の平均ベクトルは

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

定義 15.  $x$  の分散共分散行列は

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

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

## 4 多変量正規分布

### 4.1 確率密度関数 (p. 147)

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.

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

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

ただし  $\Sigma$  は対称行列.

注 7.  $N(\mu, \Sigma)$  と書く.

注 8.  $n = 2$  なら

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

行列式と逆行列は

$$\det(\Sigma) = \sigma_1^2 \sigma_2^2 - \sigma_{12}^2$$

$$\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma_1^2 \sigma_2^2 - \sigma_{12}^2} \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{12} & \sigma_1^2 \end{bmatrix}$$

指数部は楕円の方程式.

定義 17.  $N(0, I_n)$  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.

### 4.2 積率

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

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

証明. 省略. □

定理 2.  $x \sim N(\mu, \Sigma)$  なら

$$E(x) = \mu$$

$$\text{var}(x) = \Sigma$$

証明. mgf を用いるのが簡単. □

## 5 多変量正規分布の性質

### 5.1 線形変換

定理 3.  $x \sim N(\mu, \Sigma)$  なら

$$Ax + b \sim N(A\mu + b, A\Sigma A')$$

証明.  $Ax + b$  の mgf は

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

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

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

$$x_i \sim N(\mu_i, \sigma_i^2)$$

証明. 前定理において

$$A := (1, 0, \dots, 0)$$

$$b := 0$$

などとすればよい. □

### 5.2 独立と無相関

定理 4.  $x \sim N(\mu, \Sigma)$  なら

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

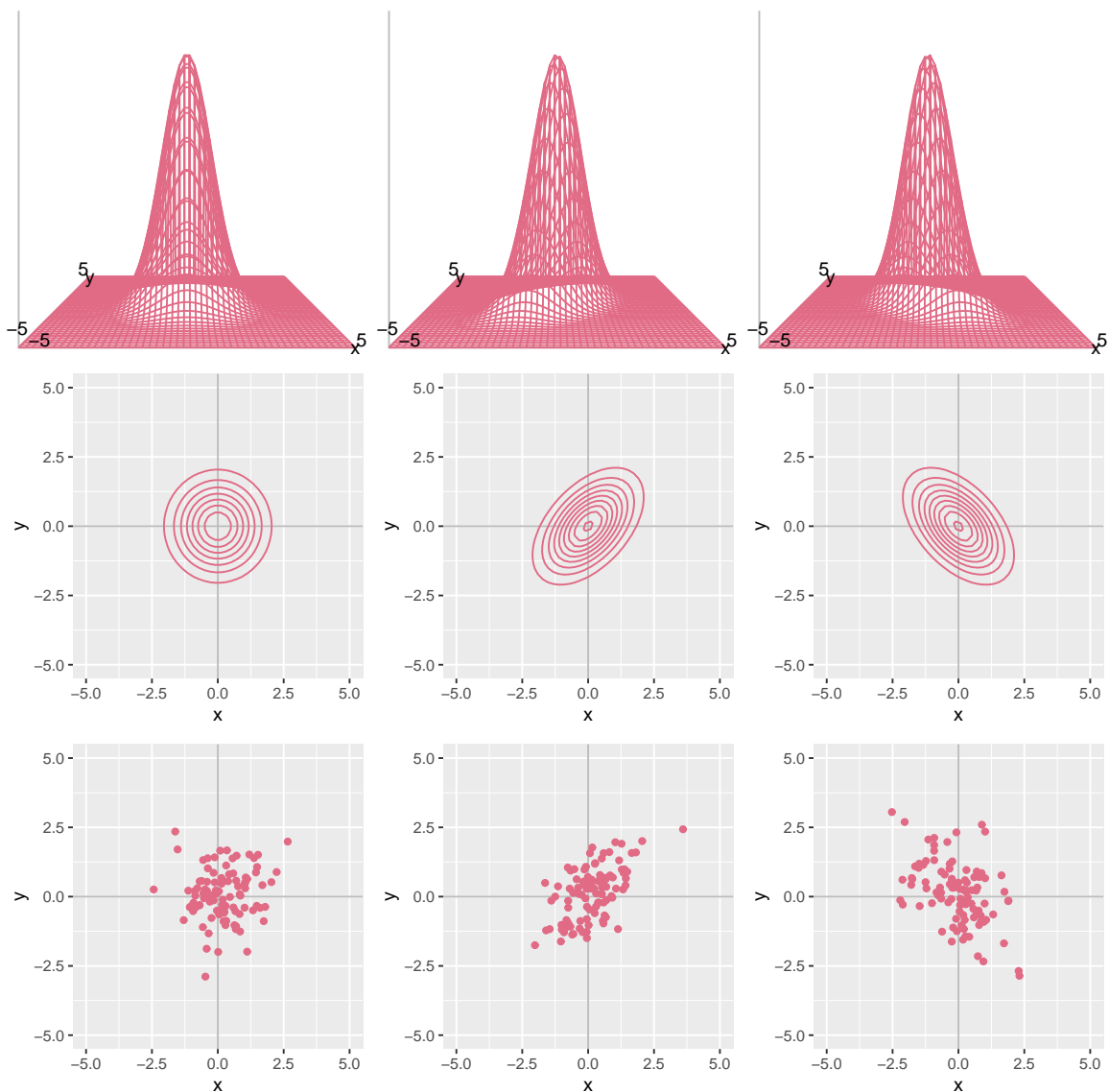


図1 2変量正規分布の同時 pdf (3D グラフ・等高線) と 2 変量正規乱数の散布図

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

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

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

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

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

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

□

### 5.3 条件つき分布

**定理 5.**  $(x'_1, x'_2)' \sim N(\mu, \Sigma)$  なら

$$x_1|x_2 \sim N(\mu_{1|2}, \Sigma_{11|2})$$

ただし

$$\begin{aligned}\mu_{1|2} &:= \mu_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(x_2 - \mu_2) \\ \Sigma_{11|2} &:= \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\end{aligned}$$

証明. 条件つき pdf の定義より

$$f_{1|2}(x_1|x_2) := \frac{f_{1,2}(x_1, x_2)}{f_2(x_2)}$$

これをひたすら計算する (かなり面倒).

□

## 6 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

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

**定義 19.** 畳み込んで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.**  $X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$ ,  $Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$  が独立なら

$$X + Y \sim N(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$$

証明.  $X + Y$  の mgf は

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

これは  $N(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$  の mgf.

□

## 7 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)

## 8 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