

C.0. 母集団と確率分布（復習）

C.0.1. 確率分布（1次元の場合）

C.0.1.1. 確率分布の表し方

1) 離散分布

確率変数 X がとる値 x_i とその 確率関数 $P(x_i)$ により記述される。

$$P(X = x_i) = P(x_i), \quad \sum_i P(x_i) = 1, \quad P(x_i) \geq 0$$

2) 連続分布

ヒストグラムを、全体の面積が1であるように目盛り、その極限を「確率密度関数 $f(x)$ 」と言う。

$$P(a < X \leq b) = \int_a^b f(x)dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1, \quad f(x) \geq 0$$

C.0.1.2. 期待値と分散

母集団の中心やバラツキを表す指標を「母数」という。確率分布の中心を表す指標として「母平均 $E(X)$ 」がある。

$$E(X) = \sum x_i P(x_i) \quad (\text{離散分布の場合})$$

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx \quad (\text{連続分布の場合})$$

確率分布のバラツキを表す指標として「母分散 $var(X)$ 」がある。

$$var(X) = E\{X - E(X)\}^2 = E(X^2) - \{E(X)\}^2$$

$$D(X) = \sqrt{var(X)}$$

を「(母) 標準偏差」という。

C.0.2. 2次元分布と独立性

2つの確率変数 X, Y の組についての確率分布を 同時確率分布 という。

$P(x_i, y_j)$ と $f(x, y)$ で表現

$$P(X = x_i, Y = y_j) = P(x_i, y_j), \quad P(a < X < b, c < Y < d) = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy$$

$$\sum_i \sum_j P(x_i, y_j) = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx dy = 1$$

周辺確率関数、周辺密度関数

$$P_X(x_i) = \sum_j P(x_i, y_j), \quad P_Y(y_j) = \sum_i P(x_i, y_j)$$

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dy, \quad f_Y(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx$$

X と Y が 独立 (X の分布が Y の取る値によらない。)

$$P(x_i, y_j) = P_X(x_i)P_Y(y_j), \quad f(x, y) = f_X(x)f_Y(y)$$

X と Y の 共分散 (X と Y の関連性の尺度)

$$\text{cov}(X, Y) = E[\{X - E(X)\}\{Y - E(Y)\}] = E(XY) - E(X)E(Y)$$

母相関係数

$$\rho = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{var}(X)\text{var}(Y)}}$$

$\rho = 0$ のことを 無相関 という。独立であれば無相関である。(逆は成り立たない)

C.0.3. n 変数の連続分布と独立性

n 変数は、 $f(x_1, \dots, x_n)$ で表現

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n = 1$$

周辺密度関数

$$f_1(x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_2 \cdots dx_n$$

...

$$f_i(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_{i-1} dx_{i+1} \cdots dx_n$$

...

$$f_n(x_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_{n-1}$$

定義： (X_1, \dots, X_n) が 互いに独立 とは、以下が成り立つこと。

$$f(x_1, \dots, x_n) = f_1(x_1) \cdots f_n(x_n)$$

定義： (X_1, \dots, X_n) が 独立同一分布 (i.i.d.) とは、以下が成り立つこと。

$$f(x_1, \dots, x_n) = f(x_1) \cdots f(x_n)$$

C.0.4. 確率変数の独立性について

岩波書店「数学辞典」第3版によると、任意のボレル集合（確率を定義する集合族の元）に対して、同時確率が各確率の積になることが「独立性」の定義である。

これを多次元の場合に拡張すれば、 $W_1 \perp W_2$ ならば $X_1 \perp X_2$ が理解できると思われる。

C.1. 確率分布の性質

Def.C1. 確率変数 (*r.v.*) を要素とする行列 $X = (X_{ij})$ に対し、 $E(X_{ij})$ を要素とする行列を $E(X)$ で表わし、 X の期待値という。

r. ベクトル $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)'$ に対し、 $E(\mathbf{X})$ を \mathbf{X} の平均ベクトルと呼び、しばしば記号 $\boldsymbol{\mu}$ で表わす。また、

$$\Sigma := \text{var}(\mathbf{X}) := E(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})'$$

を \mathbf{X} の分散行列と呼び、しばしば Σ で表わす。

$$\Sigma \text{ の } (i, j) \text{ 要素} = \text{cov}(X_i, X_j) = E(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)$$

Prop.C1. C : 定数行列 $\implies E(C) = C$

また、 E は linear である。即ち、

$$\begin{aligned} E(X + Y) &= E(X) + E(Y) \\ E(AXB) &= A E(X) B \quad \text{ここに } A, B : \text{定数行列} \end{aligned}$$

Prop.C2. $\text{var}(\mathbf{X})$ は非負

Def.C2. $\text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) := E(\mathbf{X} - E\mathbf{X})(\mathbf{Y} - E\mathbf{Y})'$

を r. ベクトル \mathbf{X}, \mathbf{Y} の共分散行列とよぶ。

特に、 $\text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{X}) = \text{var}(\mathbf{X})$

Prop.C3. $\text{cov}(\mathbf{a} + B\mathbf{X}, \mathbf{c} + D\mathbf{Y}) = B \text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) D'$

系 $\text{var}(\mathbf{a} + B\mathbf{X}) = B \text{var}(\mathbf{X}) B'$

Prop.C4. $\text{var}(\mathbf{X}) = O \iff \mathbf{X} = E(\mathbf{X})$ w.p.1 (with probability 1 の意味)

Prop.C5. (i) $E(\mathbf{X}\mathbf{X}') = \text{var}(\mathbf{X}) + (E\mathbf{X})(E\mathbf{X})'$

$$(ii) E\|\mathbf{X}\|^2 = \text{tr}\{\text{var}(\mathbf{X})\} + \|E\mathbf{X}\|^2$$

$$(iii) E(\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta})(\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta})' = \text{var}(\mathbf{X}) + (E\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta})(E\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta})'$$

$$(iv) E\|\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta}\|^2 = \text{tr}\{\text{var}(\mathbf{X})\} + \|E\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta}\|^2$$

[注意] \mathbf{X} を未知母数 $\boldsymbol{\theta}$ の推定量と考えるとき、(iii), (iv) の右辺における第 1 項を分散部分、第 2 項を偏り部分という。

(iii) を平均 2 乗誤差 (Mean Square Error) 行列という。

(iv) を総平均 2 乗誤差 (Total Mean Square Error) という。

$\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta}$: 推定誤差、 $E\mathbf{X} - \boldsymbol{\theta}$: 偏り

Prop.C6. $\mathbf{X} : p \times 1$ ベクトル

$$\boldsymbol{\mu} = E(\mathbf{X}), \quad \Sigma = var(\mathbf{X}) \quad rank(\Sigma) = k$$

\implies

(i) $\exists \mathbf{Z} : k \times 1$ r. ベクトル, $\exists A : p \times k$ 定数行列

$$s.t. \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + A\mathbf{Z}, \quad AA' = \Sigma \quad \dots\dots \quad (1)$$

(ii) (1) 式が成立すれば

$$\mathbf{Z} = (A'A)^{-1}A'(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})$$

$$E(\mathbf{Z}) = \mathbf{0}, \quad var(\mathbf{Z}) = I_k \quad \dots\dots \quad \text{規準化 (normalize)}$$

(iii) $(\mathbf{Z}, A), (\mathbf{Z}^*, A^*)$ がともに (1) をみたすならば

$$\exists T \in O(k), \quad s.t. \quad A^* = AT, \quad \mathbf{Z}^* = T'\mathbf{Z}$$

(証明) (i) $\Sigma = V\Lambda V' = \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_1 & O \\ O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1' \\ V_2' \end{bmatrix}$: スペクトル分解

とする。

$$\boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_1 \\ \boldsymbol{\xi}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1' \\ V_2' \end{bmatrix} (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}) \quad \dots\dots \quad (2)$$

とおくと、 $\boldsymbol{\xi}_2 = \mathbf{0}$ (w.p.1)

(なぜならば、 $E(\boldsymbol{\xi}_2) = V_2'E(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{0}$, $var(\boldsymbol{\xi}_2) = V_2'\Sigma V_2 = O$)

$$(2) \text{ より、} \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + V\boldsymbol{\xi}, \quad V\boldsymbol{\xi} = V_1\boldsymbol{\xi}_1 = V_1\Lambda_1^{\frac{1}{2}}\Lambda_1^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{\xi}_1$$

ここで、 $A = V_1\Lambda_1^{\frac{1}{2}}$, $\mathbf{Z} = \Lambda_1^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{\xi}_1$ と置けば、 $A\mathbf{Z} = V_1\boldsymbol{\xi}_1$ がかつ $AA' = \Sigma$ も成立する。

(ii) (1) 式より、 $A\mathbf{Z} = \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}$ の両辺に左から A' を掛けると、 $(A'A)\mathbf{Z} = A'(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})$ が得られる。ここで、 $A'A = (\Lambda_1^{\frac{1}{2}}V_1')(V_1\Lambda_1^{\frac{1}{2}}) = \Lambda_1$ は逆行列を持つので、結論を得る。

(iii) $A^*(A^*)' = \Sigma = AA'$

問題 A13 より、 $\exists T \in O(k)$, $s.t. \quad A^* = AT$

$A^*\mathbf{Z}^* = \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu} = A\mathbf{Z}$. ここで、 $A^* = AT$ ゆえ $AT\mathbf{Z}^* = A\mathbf{Z}$.

左から $(A'A)^{-1}A'$ をかけると、 $T\mathbf{Z}^* = \mathbf{Z}$, $\mathbf{Z}^* = T'\mathbf{Z}$. (Q.E.D.)

$$(\text{参考}) \text{ 問題 A13. } \left. \begin{array}{l} A, B : n \times m \\ A'A = B'B \end{array} \right\} \implies \exists P \in O(n), B = PA$$

【略証】 : $A = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m)$ とおく。これらの中の極大一次独立な列ベクトルを、シュミットの直交化を行って選ぶ。 B も、 A で残したのと同じ列番号のベクトルが残る。

これらは、 n 次元である。 n 本に満たない時は、独立なベクトルを任意に追加する。

A, B は正則で $A'A = B'B$ となり、 $B = PA$ を満たす $P \in O(n)$ が唯一存在する。

この P で、最初の行列 A, B に対しても、 $B = PA$ が成り立つ。【略証終】