

備忘録

多変量正規分布の確率密度関数

伊藤榮信

2026 年 6 月 14 日

1 正規分布に従う多変数確率密度関数

$\mathbf{x}(\omega)$ を正規分布に従う n 次元ランダム縦ベクトルとする．なお，標本空間を Ω とすると，その実現値 ω は $\omega \in \Omega$ である．このとき確率密度関数 $p(\mathbf{x})$ は

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det(M_{xx})}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T M_{xx}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\} \quad (1)$$

となる．ここで

$$\mathbf{m}_x = E(\mathbf{x}(\omega)) = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2)$$

はランダム縦ベクトル $\mathbf{x}(\omega)$ の平均値であり，

$$M_{xx} = E((\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T) = \int (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3)$$

は $\mathbf{x}(\omega)$ の共分散行列である．これを記号で

$$M_{xx} = \text{cov}(\mathbf{x}(\omega), \mathbf{x}(\omega)) \quad (4)$$

で表す．また，以下のようにも表せる：

$$M_{xx} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix} \quad (5)$$

M_{xx} は対称非負定値行列である．

(導出)

n 次元ランダムベクトル $\mathbf{z} \sim N(0, I)$ を考える．すなわち，標準正規分布の n 次元確率密度関数 $p(\mathbf{z})$ は

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{z} \right) \quad (6)$$

である.

対称非負定値行列 M_{xx} は以下のように分解できる

$$M_{xx} = AA^T \quad (7)$$

この行列 A を使い, n 次元ランダムベクトル $\mathbf{x}$ が以下のように表わせたとする

$$\mathbf{x} = \mathbf{m}_x + A\mathbf{z} \quad (8)$$

よって, $\mathbf{z} = A^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)$ であるから, (6) 式の指数部は

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} (A^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x))^T A^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) &= -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T (A^{-1})^T A^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \\ &= -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T M_{xx}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \end{aligned} \quad (9)$$

となる. ここで $(A^{-1})^T A^{-1} = (AA^T)^{-1} = M_{xx}^{-1}$ を使った (注: $(A^{-1})^T = (A^T)^{-1}$).

確率「密度」関数を扱う場合, 全体としては

$$p(\mathbf{z})d\mathbf{z} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{z}^T \mathbf{z}\right) d\mathbf{z} \quad (10)$$

を考える必要がある (z 周り微小領域の確率). つまり, 変換 (8) により, n 次元体積要素 $d\mathbf{z}$ の変換が必要となる (Jacobian). $\mathbf{z}$ から $\mathbf{x}$ へ変数変換であるから

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial(z_1, z_2, \dots, z_n)} d\mathbf{z} = \det(A) d\mathbf{z} \quad (11)$$

さて

$$\det(M_{xx}) = \det(AA^T) = \det(A) \cdot \det(A^T) = (\det(A))^2$$

であるから

$$\det(A) = \sqrt{\det(M_{xx})} \quad (12)$$

を得る. よって

$$d\mathbf{z} = \frac{1}{\sqrt{\det(M_{xx})}} d\mathbf{x} \quad (13)$$

(9) と (13) を (10) へ代入し, $d\mathbf{x}$ を外した関数が (1) である.

2 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ の場合の確率密度関数

$\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ の場合の, 共分散行列 (5) を計算すればよい. 以下の記号を導入する

$$\text{cov}(x_1, x_1) = \sigma_1^2, \quad \text{cov}(x_2, x_2) = \sigma_2^2 \quad (14)$$

したがって,

$$M_{xx} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \text{cov}(x_1, x_2) \\ \text{cov}(x_1, x_2) & \sigma_2^2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

これより

$$M_{xx}^{-1} = \frac{1}{\sigma_1^2 \sigma_2^2 - (\text{cov}(x_1, x_2))^2} \begin{pmatrix} \sigma_2^2 & -\text{cov}(x_1, x_2) \\ -\text{cov}(x_1, x_2) & \sigma_1^2 \end{pmatrix}$$

を得るが,

$$\rho = \frac{\text{cov}(x_1, x_2)}{\sigma_1 \sigma_2} \quad (16)$$

とすると

$$M_{xx}^{-1} = \frac{1}{\sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2)} \begin{pmatrix} \sigma_2^2 & -\rho \sigma_1 \sigma_2 \\ -\rho \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_1^2 \end{pmatrix} \quad (17)$$

(1) の指数部の計算をおこなうと

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2)} (x_1 - m_1, x_2 - m_2) \begin{pmatrix} \sigma_2^2 & -\rho \sigma_1 \sigma_2 \\ -\rho \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_1^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - m_1 \\ x_2 - m_2 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{2\sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2)} \left[\sigma_2^2 (x_1 - m_1)^2 - 2\sigma_1 \sigma_2 \rho (x_1 - m_1)(x_2 - m_2) + \sigma_1^2 (x_2 - m_2)^2 \right] \\ &= -\frac{1}{2(1 - \rho^2)} \left[\left(\frac{x_1 - m_1}{\sigma_1} \right)^2 - 2\rho \left(\frac{x_1 - m_1}{\sigma_1} \right) \left(\frac{x_2 - m_2}{\sigma_2} \right) + \left(\frac{x_2 - m_2}{\sigma_2} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (18)$$

これをもとに $n = 2$ の場合の (1) は

$$p(\mathbf{x}) = C \exp \left\{ -\frac{1}{2(1 - \rho^2)} \left[\left(\frac{x_1 - m_1}{\sigma_1} \right)^2 - 2\rho \left(\frac{x_1 - m_1}{\sigma_1} \right) \left(\frac{x_2 - m_2}{\sigma_2} \right) + \left(\frac{x_2 - m_2}{\sigma_2} \right)^2 \right] \right\} \quad (19)$$

$$C = \frac{1}{2\pi \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{1 - \rho^2}} \quad (20)$$

となる.

x_1 と x_2 が独立な場合, $\text{cov}(x_1, x_2) = 0$ となるので (16) より $\rho = 0$ より確率密度関数は

$$\begin{aligned} p(x_1, x_2) &= \frac{1}{2\pi \sigma_1 \sigma_2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{x_1 - m_1}{\sigma_1} \right)^2 + \left(\frac{x_2 - m_2}{\sigma_2} \right)^2 \right] \right\} \\ &= p(x_1) p(x_2) \end{aligned}$$

となる.