行列輪講: 第 6 回 確率分布, ガウス積分

松谷研究室

June 2, 2024

目次

目次

このスライドの概要

- 確率分布と, ガウス積分について確認する
    - 確率密度関数, ベイズの定理, モーメント
    - エントロピー, KL ダイバージェンス, 相互情報量
    - 不偏推定量, クラメール・ラオ (Cramér–Rao) の下限
    - 積分の変数変換, 偶関数と奇関数の積分, ガウス積分
- 以下の資料を参考に作成しました:
    - パターン認識と機械学習 (上巻)
    - State Estimation For Robotics

目次

確率密度関数 (Probability Density Function; PDF)

- 確率変数 x が, ある**確率密度関数** $p(x)$ に従うとする.
- $p(x)$ は, $[a,b]$ の範囲で定義されるとする.
- $p(x)$ は, 2 つの条件を満たす:

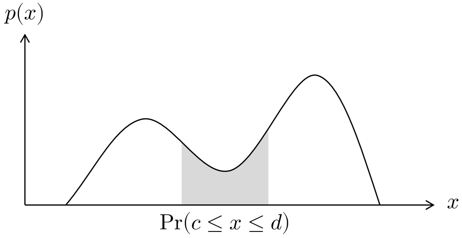
$$p(x) \geq 0, \quad \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

確率密度関数と確率

- 確率密度と確率は別物である.
- x が, $[c,d]$ の範囲をとる**確率**を, $\Pr(c \leq x \leq d)$ とする.

$$\Pr(c \leq x \leq d) = \int_c^d p(x)\,\mathrm{d}x$$

- $\Pr(c \leq x \leq d)$ は, 以下の図で, 影がかかった部分である.



条件付き確率分布 (Conditional Probability)

- 確率変数 $x \in [a, b]$, $y \in [r, s]$ を考える.
- y に条件付けられた, x の確率密度関数 $p(x \mid y)$ を考える.
- $p(x \mid y)$ を, 条件付き確率密度関数という.
- $p(x \mid y)$ も, 2 つの条件を満たす:

$$p(x \mid y) \geq 0, \quad \int_a^b p(x \mid y)\, \mathrm{d}x = 1$$

同時分布 (Joint Probability)

- 複数の確率変数 $x_1, x_2, \ldots, x_N$ を考える ($x_i \in [a_i, b_i]$).
- これらの確率密度関数 $p(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ を考える.
- $p(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ を, 同時確率密度関数という.
- 確率変数をまとめて, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ とかく.
- $p(\mathbf{x})$ も, 2 つの条件を満たす:

$$p(\mathbf{x}) = p(x_1, x_2, \ldots, x_N) \geq 0$$

$$\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{a_N}^{b_N} \cdots \int_{a_1}^{b_1} p(x_1, \ldots, x_N)\,\mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_N = 1$$

- 積分の範囲は $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_N)$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_N)$ である.
- 確率変数の範囲については, 以後は明記しない.

加法定理 (Sum Rule), 周辺化 (Marginalization), 乗法定理

- 確率変数 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を考える.
- 同時分布 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ と, 周辺分布 $p(\mathbf{x})$ について, 次が成り立つ.
- 加法定理, 周辺化, 積分消去とよばれる.

$$p(\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, \mathrm{d}\mathbf{y}$$

- 同時分布 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, 条件付き確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$, $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$, 周辺分布 $p(\mathbf{x})$, $p(\mathbf{y})$ について, 次が成り立つ.
- 乗法定理とよばれる.

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) p(\mathbf{y}) = p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x})$$

- 同時分布は, 周辺分布と, 条件付き確率分布に分解できる.

独立 (Independent)

- 確率変数 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を考える.
- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ が独立であるとする.
- $\mathbf{y}$ は $\mathbf{x}$ の確率分布に ($\mathbf{x}$ は $\mathbf{y}$ の確率分布に) 影響を与えない.
- 条件付き確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$ は, $p(\mathbf{x})$ に等しい.
  - $\mathbf{y}$ が与えられても, $\mathbf{x}$ についての確率分布は変化しない.
- 同様に, $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ は, $p(\mathbf{y})$ に等しい.
- 同時分布 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ を, 個々の確率分布 $p(\mathbf{x})$, $p(\mathbf{y})$ に分解できる.

$$
\begin{aligned}
p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) p(\mathbf{y}) = p(\mathbf{x}) p(\mathbf{y}) \quad (\because p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) = p(\mathbf{x})) \\
&= p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}) p(\mathbf{y}) \quad (\because p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = p(\mathbf{y}))
\end{aligned}
$$

- $p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x}) p(\mathbf{y})$ であれば, $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ は独立である.

ベイズの定理 (Bayes' Theorem)

- 確率の乗法定理から, ベイズの定理が得られる:

$$p(\mathbf{x},\mathbf{y}) = p(\mathbf{x}\mid\mathbf{y})p(\mathbf{y}) \quad \longrightarrow \quad p(\mathbf{x}\mid\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})}$$

- 分母は周辺化としてかける.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}) &= p(\mathbf{y})\underbrace{\int p(\mathbf{x}\mid\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{x}}_{=1} = \int p(\mathbf{x}\mid\mathbf{y})p(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \\ &= \int p(\mathbf{x},\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \end{aligned}$$

- ベイズの定理は, 次のようになる.

$$p(\mathbf{x}\mid\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{\int p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}}$$

ベイズの定理 (Bayes' Theorem)

ベイズの定理

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})}{\displaystyle\int p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}}$$

分母は, $p(\mathrm{x} \mid \mathrm{y})$ が確率分布になるための正規化 (x による積分が 1).

ベイズの定理 (Bayes' Theorem)

- ベイズの定理:

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})}{\int p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}}$$

- センサデータ $\mathbf{y}$ を手掛かりに, 変数 $\mathbf{x}$ を推定したい.
  - 例えば, $\mathbf{y}$ は GPS のデータ, $\mathbf{x}$ は GPS の位置.

1. $\mathbf{x}$ に関する仮説を, **事前分布** (Prior) $p(\mathbf{x})$ として決める.
2. センサのモデルを, $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ として決める.
   - 変数 $\mathbf{x}$ のもとで, どのようなセンサデータ $\mathbf{y}$ が得られるのか?
3. 新たなセンサデータ $\mathbf{y}$ を得たら, $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})$ を計算し, 正規化する.
4. $\mathbf{y}$ を取り込んだ, $\mathbf{x}$ の**事後分布** (Posterior) $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$ が得られる.

ベイズの定理 (Bayes' Theorem)

- 2 つの変数 $\mathbf{y}_1$, $\mathbf{y}_2$ から, 変数 $\mathbf{x}$ の事後分布 $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2)$ を推定したい.

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) = \frac{p(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2)} \quad (\because \text{ベイズの定理})$$

- $\mathbf{x}$ のもとで $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2$ が互いに独立なら, 以下が成り立つ:

$$p(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \mid \mathbf{x}) = p(\mathbf{y}_1 \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{y}_2 \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_1) p(\mathbf{y}_1)}{p(\mathbf{x})} \frac{p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_2) p(\mathbf{y}_2)}{p(\mathbf{x})}$$

- 上記を代入すれば, 次が得られる.

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) = \eta \ p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_1) p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}_2)$$

- $\eta = \dfrac{p(\mathbf{y}_1) p(\mathbf{y}_2)}{p(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) p(\mathbf{x})}$ は正規化項である.

モーメント, 平均, 分散, 歪度, 尖度

- 確率分布 $p(x)$ の形状ではなく, モーメントだけを扱うことは多々ある.
- $\mathbb{E}[f(x)]$ を, 関数 $f(x)$ の, 確率分布 $p(x)$ のもとでの期待値とする.

$$\mathbb{E}[f(x)] = \int f(x)p(x)\,\mathrm{d}x$$

- 1 次モーメント: 平均 $\mu = \mathbb{E}[x]$ (Mean)
- 2 次モーメント: 分散 $\sigma^2 = \mathrm{Var}[x] = \mathbb{E}\left[(x-\mu)^2\right]$ (Variance)
- 3 次モーメント: $\mathbb{E}\left[(x-\mu)^3\right]$
- 4 次モーメント: $\mathbb{E}\left[(x-\mu)^4\right]$

$$\mu = \mathbb{E}[x] = \int x p(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\sigma^2 = \mathrm{Var}[x] = \mathbb{E}\left[(x-\mu)^2\right] = \int (x-\mu)^2 p(x)\,\mathrm{d}x$$

モーメント, 平均, 分散, 歪度, 尖度

- 確率分布 $p(x)$ の歪度 (Skewness; わいど):

$$\mathbb{E}\left[\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^3\right] = \frac{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^3\right]}{\sigma^3} = \frac{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^3\right]}{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^2\right]^{\frac{3}{2}}}$$

- 確率分布 $p(x)$ の尖度 (Kurtosis; せんど):

$$\mathbb{E}\left[\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^4\right] = \frac{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^4\right]}{\sigma^4} = \frac{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^4\right]}{\mathbb{E}\left[(x-\mu)^2\right]^{2}}$$

- 尖度は, $\mathbb{E}\left[\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^4\right] - 3$ とすることもある.
  - ガウス分布の尖度を 0 とするため.

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 行列関数 $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ の, 確率分布 $p(\mathbf{x})$ のもとでの期待値:

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{F}(\mathbf{x})\right] = \int \mathbf{F}(\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

- $\mathbb{E}\left[\mathbf{F}(\mathbf{x})\right]$ の (i,j) 成分は, $\mathbf{F}$ の (i,j) 成分 f_{ij} を用いて,

$$\left(\mathbb{E}\left[\mathbf{F}(\mathbf{x})\right]\right)_{ij} = \mathbb{E}\left[f_{ij}(\mathbf{x})\right] = \int f_{ij}(\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

- 平均 $\boldsymbol{\mu}$ と共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ (Covariance) は, 次のようにかける.

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] = \int \mathbf{x}p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] = \mathbb{E}\left[(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^\top\right] = \int (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^\top p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 2 つの変数 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ について, 次が成り立つ.

$$\mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{y}] = \mathbb{E}[\mathbf{x}] + \mathbb{E}[\mathbf{y}]$$

- n 個の変数 $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ について, 次が成り立つ.

$$\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i\right] = \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}[\mathbf{x}_i]$$

- 和の期待値と, 期待値の和が等しい.
- スカラの場合にも, 同様に成立する.

$$\mathbb{E}[x + y] = \mathbb{E}[x] + \mathbb{E}[y], \quad \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i\right] = \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}[x_i]$$

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 変数 $\mathbf{x}$ と, ある定数 $\mathbf{A}$ について, 次が成り立つ.

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{A}\mathbf{x}\right] = \mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right], \quad \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{A}\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{A}$$

- 変数 $\mathbf{x}$ と, ある定数 $\mathbf{a}$ について, 次が成り立つ.

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{x} + \mathbf{a}\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbf{a}$$

- スカラの場合にも, 同様に成立する.

$$\mathbb{E}\left[ax\right] = a\,\mathbb{E}\left[x\right], \quad \mathbb{E}\left[x + a\right] = \mathbb{E}\left[x\right] + a$$

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 確率分布 $p(\mathbf{x})$ の共分散が $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{Var}[\mathbf{x}]$ であるとする.
- $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ としたとき, $p(\mathbf{y})$ の共分散 $\mathrm{Var}[\mathbf{y}]$ は,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Var}[\mathbf{y}] &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{A}\mathbf{x}])(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{A}\mathbf{x}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top \mathbf{A}^\top\right] \\
&= \mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right]\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^\top
\end{aligned}
$$

- ただし, $\mathbb{E}[\mathbf{A}\mathbf{x}] = \mathbf{A}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]$.
- 同様に, $p(x)$ の分散が σ^2 であれば, $y = ax$ の分散は $a^2\sigma^2$.

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 確率分布 $p(\mathbf{x})$ の共分散が $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{Var}[\mathbf{x}]$ であるとする.
- $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{a}$ としたとき ($\mathbf{a}$ は定数), $p(\mathbf{y})$ の共分散 $\mathrm{Var}[\mathbf{y}]$ は,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Var}[\mathbf{y}] &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{a}])(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{a}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{x}] - \mathbf{a})(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{x}] - \mathbf{a})^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right] = \boldsymbol{\Sigma}
\end{aligned}
$$

- ただし, $\mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{a}] = \mathbb{E}[\mathbf{x}] + \mathbf{a}$.
- 同様に, $p(x)$ の分散が σ^2 であれば, $y = x + a$ の分散も σ^2.

モーメント, 平均, 共分散 (多変数の場合)

- 確率分布 $p(\mathbf{x})$ の共分散 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{Var}[\mathbf{x}]$ について, 次が成り立つ.

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{Var}[\mathbf{x}] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]^\top = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top$$

- スカラの場合は, 次のようになる.

$$\sigma^2 = \mathrm{Var}[x] = \mathbb{E}\left[x^2\right] - (\mathbb{E}[x])^2 = \mathbb{E}\left[x^2\right] - \mu^2$$

- 以下のように示せる.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Sigma} &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\boldsymbol{\mu}^\top\right] - \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\mu}\mathbf{x}^\top\right] + \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\boldsymbol{\mu}^\top - \boldsymbol{\mu}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]^\top + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top
\end{aligned}$$

独立 (Independent), 無相関 (Uncorrelated)

- 以下が成り立つとき, x, y は独立である:

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})$$

- 以下が成り立つとき, x, y は無相関である:

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]^\top$$

- 独立 $\Rightarrow$ 無相関は成り立つが, 無相関 $\Rightarrow$ 独立は成り立たない.
- 独立 $\Rightarrow$ 無相関は, 次のように示せる.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] &= \iint \mathbf{x}\mathbf{y}^\top p(\mathbf{x}, \mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{y} = \iint \mathbf{x}\mathbf{y}^\top p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{y} \quad (\because \text{独立}) \\ &= \int \mathbf{x}p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \int \mathbf{y}^\top p(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y} = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]^\top\end{aligned}$$

相互共分散 (Cross-covariance)

- $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ との間の**相互共分散** $\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は, 次のようにかける.

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top$$

- 左辺を展開すれば, 次のように示せる.

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top\right] - \mathbb{E}\left[\mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbf{y}^\top\right] + \mathbb{E}\left[\mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top + \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top
\end{aligned}$$

- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ が無相関 ($\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] = \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top$) であれば, 相互共分散は $\mathbf{0}$.
- 独立 $\Rightarrow$ 無相関であるから, 独立であれば, 相互共分散は $\mathbf{0}$.

相互共分散 (Cross-covariance)

- $\mathrm{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathrm{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})^\top$ が成り立つ:

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{y}-\mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] \\ &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{y}-\mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right]^\top = \mathrm{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})^\top\end{aligned}$$

- $\mathrm{Cov}(\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{z}) = \mathrm{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{z}) + \mathrm{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{z})$ も成り立つ:

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{z}) &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x}+\mathbf{y}-\mathbb{E}[\mathbf{x}+\mathbf{y}])(\mathbf{z}-\mathbb{E}[\mathbf{z}])^\top\right] \\ &= \mathbb{E}\left[((\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])+(\mathbf{y}-\mathbb{E}[\mathbf{y}]))(\mathbf{z}-\mathbb{E}[\mathbf{z}])^\top\right] \\ &= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{z}-\mathbb{E}[\mathbf{z}])^\top\right] + \mathbb{E}\left[(\mathbf{y}-\mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{z}-\mathbb{E}[\mathbf{z}])^\top\right] \\ &= \mathrm{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{z}) + \mathrm{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{z})\end{aligned}$$

- ただし, $\mathbb{E}[\mathbf{x}+\mathbf{y}] = \mathbb{E}[\mathbf{x}] + \mathbb{E}[\mathbf{y}]$.

相互共分散 (Cross-covariance)

- $\mathrm{Cov}\left(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{B}\mathbf{y}\right) = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)\mathbf{B}^\top$ も成り立つ:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\left(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{B}\mathbf{y}\right) &= \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{A}\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{B}\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{B}\mathbf{y}\right]\right)^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{A}\left(\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{B}\left(\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]\right)\right)^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{A}\left(\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]\right)^\top\mathbf{B}^\top\right] \\
&= \mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]\right)^\top\right]\mathbf{B}^\top = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)\mathbf{B}^\top
\end{aligned}$$

- $\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x} + \mathbf{a}, \mathbf{y} + \mathbf{b}\right) = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)$ も成り立つ:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x} + \mathbf{a}, \mathbf{y} + \mathbf{b}\right) &= \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x} + \mathbf{a}\right]\right)\left(\mathbf{y} + \mathbf{b} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y} + \mathbf{b}\right]\right)\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x} + \mathbf{a} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] - \mathbf{a}\right)\left(\mathbf{y} + \mathbf{b} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right] - \mathbf{b}\right)\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]\right)^\top\right] = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)
\end{aligned}$$

共分散と相互共分散

- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ の共分散を $\mathrm{Var}[\mathbf{x}], \mathrm{Var}[\mathbf{y}]$, 相互共分散を $\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ とする.
- $\mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$ としたとき, $p(\mathbf{z})$ の共分散 $\mathrm{Var}[\mathbf{z}]$ は,

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[(\mathbf{z} - \mathbb{E}[\mathbf{z}])(\mathbf{z} - \mathbb{E}[\mathbf{z}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{y}])(\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{x} + \mathbf{y}])^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[((\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}]) + (\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}]))((\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}]) + (\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}]))^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right] + \mathbb{E}\left[(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] \\
&\quad + \mathbb{E}\left[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])^\top\right] + \mathbb{E}\left[(\mathbf{y} - \mathbb{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right] \\
&= \mathrm{Var}[\mathbf{x}] + \mathrm{Var}[\mathbf{y}] + \mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \mathrm{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{x})
\end{aligned}
$$

- 同様に, $z = x + y$ の分散は, $\mathrm{Var}[z] = \mathrm{Var}[x] + \mathrm{Var}[y] + 2\,\mathrm{Cov}(x, y)$.

平均, 共分散, 相互共分散 (1 変数の場合)

平均, 共分散, 相互共分散 (1 変数の場合)

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[x+y\right] &= \mathbb{E}\left[x\right] + \mathbb{E}\left[y\right] \\
\mathbb{E}\left[x+a\right] &= \mathbb{E}\left[x\right] + a \\
\mathbb{E}\left[ax\right] &= a\,\mathbb{E}\left[x\right] \\
\mathrm{Var}\left[x\right] &= \mathbb{E}\left[(x-\mathbb{E}\left[x\right])^2\right] \\
\mathrm{Var}\left[ax\right] &= a^2\,\mathrm{Var}\left[x\right] \\
\mathrm{Var}\left[x+a\right] &= \mathrm{Var}\left[x\right] \\
\mathrm{Var}\left[x\right] &= \mathbb{E}\left[x^2\right] - \mathbb{E}\left[x\right]^2
\end{aligned}
$$

平均, 共分散, 相互共分散 (1 変数の場合)

平均, 共分散, 相互共分散 (1 変数の場合)

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\left(x, y\right) &= \mathbb{E}\left[(x - \mathbb{E}\left[x\right])(y - \mathbb{E}\left[y\right])\right] \\
\mathrm{Cov}\left(x, y\right) &= \mathbb{E}\left[xy\right] - \mathbb{E}\left[x\right]\mathbb{E}\left[y\right] \\
\mathrm{Cov}\left(x + y, z\right) &= \mathrm{Cov}\left(x, z\right) + \mathrm{Cov}\left(y, z\right) \\
\mathrm{Cov}\left(ax, by\right) &= ab\,\mathrm{Cov}\left(x, y\right) \\
\mathrm{Cov}\left(x + a, y + b\right) &= \mathrm{Cov}\left(x, y\right) \\
\mathrm{Var}\left[x + y\right] &= \mathrm{Var}\left[x\right] + \mathrm{Var}\left[y\right] + 2\,\mathrm{Cov}\left(x, y\right)
\end{aligned}
$$

平均, 共分散, 相互共分散 (1 変数の場合)

無相関 (Uncorrelated)

x, y が無相関であれば, $\mathbb{E}[xy] = \mathbb{E}[x]\,\mathbb{E}[y]$.
独立であれば $(p(x,y) = p(x)p(y))$, 無相関.

$$\mathrm{Cov}\,(x, y) = 0$$

$$\mathrm{Var}\,[x + y] = \mathrm{Var}\,[x] + \mathrm{Var}\,[y]$$

平均, 共分散, 相互共分散 (多変数の場合)

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}+\mathbf{y}\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right] \\
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}+\mathbf{a}\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbf{a} \\
\mathbb{E}\left[\mathbf{A}\mathbf{x}\right] &= \mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] \\
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{A}\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{A} \\
\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] &= \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x}-\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{x}-\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)^\top\right] \\
\mathrm{Var}\left[\mathbf{A}\mathbf{x}\right] &= \mathbf{A}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{A}^\top \\
\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}+\mathbf{a}\right] &= \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] \\
\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top
\end{aligned}
$$

平均, 共分散, 相互共分散 (多変数の場合)

平均, 共分散, 相互共分散 (多変数の場合)

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x} - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{y} - \mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]\right)^{\top}\right]$$

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^{\top}\right] - \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]^{\top}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{y}, \mathbf{x}\right)^{\top}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{z}\right) = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{z}\right) + \mathrm{Cov}\left(\mathbf{y}, \mathbf{z}\right)$$

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{B}\mathbf{y}\right) = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)\mathbf{B}^{\top}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x} + \mathbf{a}, \mathbf{y} + \mathbf{b}\right) = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)$$

$$\mathrm{Var}\left[\mathbf{x} + \mathbf{y}\right] = \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathrm{Var}\left[\mathbf{y}\right] + \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) + \mathrm{Cov}\left(\mathbf{y}, \mathbf{x}\right)$$

平均, 共分散, 相互共分散 (多変数の場合)

無相関 (Uncorrelated)

$\mathbf{x}, \mathbf{y}$ が無相関であれば, $\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right] = \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top$.
独立であれば ($p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})$), 無相関.

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \mathbf{0}$$

$$\mathrm{Var}\left[\mathbf{x} + \mathbf{y}\right] = \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathrm{Var}\left[\mathbf{y}\right]$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

二次形式

$$\mathbb{E}\left[(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b})^\top(\mathbf{C}\mathbf{x}+\mathbf{d})\right] = \mathrm{tr}\big(\mathbf{A}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{C}^\top\big) + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{b})^\top(\mathbf{C}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{d})$$

- これまでにみてきた公式を駆使すれば, 導出できる.
- 上式を基に, 次が直ちに得られる:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}^\top\mathbf{x}\right] &= \mathrm{tr}(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]) + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] \\
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}^\top\mathbf{C}\mathbf{x}\right] &= \mathrm{tr}(\mathbf{C}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]) + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\mathbf{C}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right] \\
\mathbb{E}\left[(\mathbf{A}\mathbf{x})^\top(\mathbf{A}\mathbf{x})\right] &= \mathrm{tr}\left(\mathbf{A}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{A}^\top\right) + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right])^\top(\mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]) \\
\mathbb{E}\left[(\mathbf{x}+\mathbf{a})^\top(\mathbf{x}+\mathbf{a})\right] &= \mathrm{tr}(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]) + (\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{a})^\top(\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{a})
\end{aligned}$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

- $\mathbb{E}[\cdot]$ の中身がスカラーであることを考えて, 式を変形すると,

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[(\mathbf{Ax}+\mathbf{b})^\top(\mathbf{Cx}+\mathbf{d})\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathrm{tr}\left((\mathbf{Cx}+\mathbf{d})(\mathbf{Ax}+\mathbf{b})^\top\right)\right] = \mathrm{tr}\left(\mathbb{E}\left[(\mathbf{Cx}+\mathbf{d})(\mathbf{Ax}+\mathbf{b})^\top\right]\right) \\
&= \mathrm{tr}\left(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d},\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right)+\mathbb{E}\left[\mathbf{Cx}+\mathbf{d}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right]^\top\right) \\
&= \mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d},\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right))+\mathrm{tr}\left(\mathbb{E}\left[\mathbf{Cx}+\mathbf{d}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right]^\top\right) \\
&= \mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d},\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right))+\mathbb{E}\left[\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right]^\top\mathbb{E}\left[\mathbf{Cx}+\mathbf{d}\right] \\
&= \mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d},\mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right))+\left(\mathbf{A}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{b}\right)^\top\left(\mathbf{C}\,\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]+\mathbf{d}\right)
\end{aligned}
$$

- ただし, 以下の関係を用いた:

$$
\mathbb{E}\left[\mathrm{tr}(\mathbf{A})\right]=\mathrm{tr}(\mathbb{E}\left[\mathbf{A}\right]),\quad \mathrm{tr}\left(\mathbf{a}\mathbf{b}^\top\right)=\mathbf{b}^\top\mathbf{a}
$$

$$
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{y}^\top\right]=\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)+\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{y}\right]^\top
$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

- 続いて, $\mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d}, \mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right)) = \mathrm{tr}\left(\mathbf{A}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{C}^\top\right)$ を示す.

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}+\mathbf{d}, \mathbf{Ax}+\mathbf{b}\right)) &= \mathrm{tr}(\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Cx}, \mathbf{Ax}\right)) \\
&= \mathrm{tr}\left(\mathbf{C}\,\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}\right)\mathbf{A}^\top\right) \\
&= \mathrm{tr}\left(\mathbf{C}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{A}^\top\right) = \mathrm{tr}\left(\mathbf{A}\,\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]\mathbf{C}^\top\right)
\end{aligned}
$$

- ただし, 以下の関係を用いた:

$$
\begin{gathered}
\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}+\mathbf{a}, \mathbf{y}+\mathbf{b}\right) = \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) \\
\mathrm{Cov}\left(\mathbf{Ax}, \mathbf{By}\right) = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)\mathbf{B}^\top \\
\mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}\right) = \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x}-\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)\left(\mathbf{x}-\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\right)^\top\right] = \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] \\
\mathrm{tr}\left(\mathbf{A}^\top\right) = \mathrm{tr}(\mathbf{A}), \quad \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]^\top = \mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right]
\end{gathered}
$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

二次関数

$$\mathbb{E}\left[(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b})(\mathbf{C}\mathbf{x}+\mathbf{d})^\top\right] = \mathbf{A}\,\mathrm{Var}[\mathbf{x}]\,\mathbf{C}^\top + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{b})(\mathbf{C}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{d})^\top$$

- 上式を基に, 次が直ちに得られる:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] &= \mathrm{Var}[\mathbf{x}] + \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]^\top \\
\mathbb{E}\left[(\mathbf{A}\mathbf{x})(\mathbf{A}\mathbf{x})^\top\right] &= \mathbf{A}\left(\mathrm{Var}[\mathbf{x}] + \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]^\top\right)\mathbf{A}^\top \\
\mathbb{E}\left[(\mathbf{x}+\mathbf{a})(\mathbf{x}+\mathbf{a})^\top\right] &= \mathrm{Var}[\mathbf{x}] + (\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{a})(\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{a})^\top
\end{aligned}$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

- 次のように変形できる:

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[(\mathbf{Ax}+\mathbf{b})(\mathbf{Cx}+\mathbf{d})^\top\right] \\
&= \mathrm{Cov}(\mathbf{Ax}+\mathbf{b}, \mathbf{Cx}+\mathbf{d}) + \mathbb{E}[\mathbf{Ax}+\mathbf{b}]\,\mathbb{E}[\mathbf{Cx}+\mathbf{d}]^\top \\
&= \mathrm{Cov}(\mathbf{Ax}, \mathbf{Cx}) + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{b})(\mathbf{C}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{d})^\top \\
&= \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x})\,\mathbf{C}^\top + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{b})(\mathbf{C}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{d})^\top \\
&= \mathbf{A}\,\mathrm{Var}[\mathbf{x}]\,\mathbf{C}^\top + (\mathbf{A}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{b})(\mathbf{C}\,\mathbb{E}[\mathbf{x}]+\mathbf{d})^\top
\end{aligned}
$$

- ただし, 以下の関係を用いた:

$$
\mathbb{E}\left[\mathbf{xy}^\top\right] = \mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \mathbb{E}[\mathbf{x}]\,\mathbb{E}[\mathbf{y}]^\top
$$

$$
\mathrm{Cov}(\mathbf{x}+\mathbf{a}, \mathbf{y}+\mathbf{b}) = \mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \mathrm{Cov}(\mathbf{Ax}, \mathbf{By}) = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\,\mathbf{B}^\top
$$

$$
\mathrm{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \mathbb{E}\left[(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\mathbf{x}])^\top\right] = \mathrm{Var}[\mathbf{x}]
$$

平均, 共分散, 相互共分散の関係 (発展)

二次関数

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{a}^\top\mathbf{x}\right] = \left(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\right)\mathbf{a}$$

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{x}^\top\mathbf{a}\mathbf{x}^\top\right] = \mathbf{a}^\top\left(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\right)$$

- 次のように確認できる:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\left(\mathbf{a}^\top\mathbf{x}\right)\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\mathbf{a}\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right]\mathbf{a} \\
&= \left(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\right)\mathbf{a} \\
\mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{a}\right)\mathbf{x}^\top\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{a}^\top\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] = \mathbf{a}^\top\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] \\
&= \mathbf{a}^\top\left(\mathrm{Var}\left[\mathbf{x}\right] + \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}\right]^\top\right)
\end{aligned}$$

イェンセンの不等式 (Jensen's Inequality)

- 下に凸な関数 $f(\mathbf{x})$ を考える.
- $p(\mathbf{x})$ を, $\displaystyle\int p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = 1$ をみたす関数とする.
- $f(\mathbf{x}), p(\mathbf{x})$ について, イェンセンの不等式が成り立つ:

$$\int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \geq f\left(\int \mathbf{x}p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}\right)$$

- $p(\mathbf{x})$ を確率分布とすれば, 期待値 $\mathbb{E}[\cdot]$ を用いて, 次のようにかける:

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] \geq f(\mathbb{E}[\mathbf{x}])$$

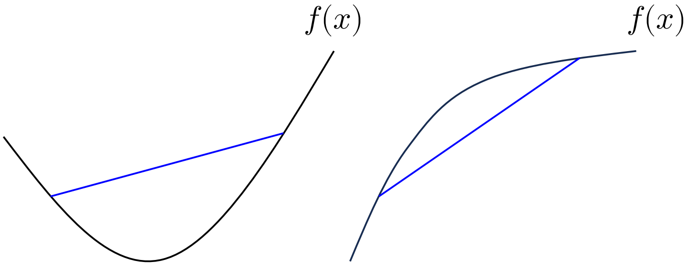
- $f(\mathbf{x})$ が上に凸であれば, 次が成り立つ (不等号が逆になる):

$$\int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \leq f\left(\int \mathbf{x}p(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}\right)$$

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] \leq f(\mathbb{E}[\mathbf{x}])$$

イェンセンの不等式 (Jensen's Inequality)

- 下に凸であれば，任意の 2 点を結ぶ直線が，上側にある (凸関数，左).
  - x^2, $x \ln x$, $\dfrac{1}{x}$ $(x > 0)$, $\tan x$ $(0 < x < \dfrac{\pi}{2})$ など
- 上に凸であれば，任意の 2 点を結ぶ直線が，下側にある (凹関数，右).
  - $\ln x$, $\tan x$ $(-\dfrac{\pi}{2} < x < 0)$ など



エントロピー (Entropy)

- 確率分布 $p(\mathbf{x})$ について，次の量 $\mathrm{H}[\mathbf{x}]$ を考える．

$$\mathrm{H}[\mathbf{x}] = -\mathbb{E}[\ln p(\mathbf{x})] = -\int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- $\mathrm{H}[\mathbf{x}]$ を，エントロピー，シャノン情報量，平均情報量とよぶ．
- 直感的には，$\mathbf{x}$ を，どのくらい予測しづらいのかを表す．
    - $\mathbf{x}$ が離散変数であれば，一様分布のときにエントロピーが最大である．
    - $\mathbf{x}$ が連続変数であれば，正規分布 (ガウス分布) のときに最大．
    - この証明には，変分計算が必要である．

条件付きエントロピー (Conditional Entropy)

- 同時分布 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ のエントロピー $\mathrm{H}[\mathbf{x}, \mathbf{y}]$ を考える.

$$\mathrm{H}[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = -\mathbb{E}[\ln p(\mathbf{x}, \mathbf{y})] = -\iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y}$$

- $p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x})$ のように分解できるので, 代入すれば

$$\begin{aligned}
\mathrm{H}[\mathbf{x}, \mathbf{y}] &= -\iint p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x}) \left(\ln p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) + \ln p(\mathbf{x}) \right) \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y} \\
&= -\iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y} \\
&\quad - \int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} \underbrace{\int p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{y}}_{=1} \\
&= \mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}] + \mathrm{H}[\mathbf{x}]
\end{aligned}$$

条件付きエントロピー (Conditional Entropy)

- 条件付き確率分布 $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ について, $\mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}]$ を次のように定める.

$$\mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}] = -\mathbb{E}[\ln p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})] = -\iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y}$$

- $\mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}]$ を, 条件付きエントロピーとよぶ.
- 次が成り立つ:

$$\mathrm{H}[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = \mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}] + \mathrm{H}[\mathbf{x}] = \mathrm{H}[\mathbf{x} \mid \mathbf{y}] + \mathrm{H}[\mathbf{y}]$$

- $\mathrm{H}[\mathbf{x}]$: $\mathbf{x}$ の予測しづらさ
- $\mathrm{H}[\mathbf{x}, \mathbf{y}]$: $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ の予測しづらさ
- $\mathrm{H}[\mathbf{y} \mid \mathbf{x}]$: $\mathbf{x}$ が既知であるときの, $\mathbf{y}$ の予測しづらさ

カルバック–ライブラーダイバージェンス (Kullback-Leibler Divergence)

- 2 つの確率分布 $p(\mathbf{x}), q(\mathbf{x})$ があるとき, 次の量 $\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right)$ を考える.

$$\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right) = -\mathbb{E}\left[\ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\right] = -\int p(\mathbf{x}) \ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- $\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right)$ を, カルバック–ライブラーダイバージェンスとよぶ.
- 長いので, KL ダイバージェンスともよぶ.
- 確率分布 $p(\mathbf{x})$ と $q(\mathbf{x})$ との距離のような概念である.
- $\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right) \neq \mathrm{KL}\left(q \parallel p\right)$ であるから, 厳密な距離ではない.

カルバック–ライブラーダイバージェンス (Kullback-Leibler Divergence)

- カルバック–ライブラーダイバージェンス:

$$\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right) = -\,\mathbb{E}\left[\ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\right] = -\int p(\mathbf{x}) \ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

- $-\ln x$ は下に凸だから，イェンセンの不等式より ($\mathbb{E}\left[f(x)\right] \leq f(\mathbb{E}\left[x\right])$)

$$\begin{aligned}\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right) &= -\,\mathbb{E}\left[\ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\right] \geq -\ln \mathbb{E}\left[\frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\right] \\ &= -\ln \int p(\mathbf{x}) \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\,\mathrm{d}\mathbf{x} = -\ln \int q(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = -\ln 1 = 0\end{aligned}$$

- 以上より，$\mathrm{KL}\left(p \parallel q\right) \geq 0$.
- $\forall \mathbf{x}\ p(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x})$ のときのみ 0.

相互情報量 (Mutual Information)

- 確率変数 x, y について, 次の量 $I(\mathrm{x}, \mathrm{y})$ を考える.

$$I(\mathrm{x}, \mathrm{y}) = \mathbb{E}\left[\ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}\right] = \iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})} \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y}$$

- $I(\mathrm{x}, \mathrm{y})$ を, **相互情報量**とよぶ.
- x (y) を得たとき, y (x) についての情報がどのくらい増えるか.
- x, y が独立であれば $(p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x})p(\mathbf{y}))$, $I(\mathrm{x}, \mathrm{y}) = 0$.

$$I(\mathrm{x}, \mathrm{y}) = \iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln \frac{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})} \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y} = \iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln 1 \, \mathrm{d}\mathbf{x} \, \mathrm{d}\mathbf{y} = 0$$

- x, y が独立であれば, x (y) のことが分かっても, y (x) については何の情報ももたらさない.

相互情報量 (Mutual Information)

- 相互情報量 $I\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)$:

$$I\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)=\mathbb{E}\left[\ln\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}\right]=\iint p(\mathbf{x},\mathbf{y})\ln\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{y}$$

- エントロピー $\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\right],\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\right],\mathrm{H}\left[\mathbf{x},\mathbf{y}\right]$ を使って，次のようにかける．

$$I\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)=\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\right]+\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\right]-\mathrm{H}\left[\mathbf{x},\mathbf{y}\right]$$

- $\mathrm{H}\left[\mathbf{x},\mathbf{y}\right]=\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\mid\mathbf{x}\right]+\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\right]=\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\mid\mathbf{y}\right]+\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\right]$ であるから，

$$I\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)=\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\right]-\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\mid\mathbf{x}\right]=\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\right]-\mathrm{H}\left[\mathbf{x}\mid\mathbf{y}\right]$$

- $\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\right]$: $\mathbf{y}$ の予測しづらさ
- $\mathrm{H}\left[\mathbf{y}\mid\mathbf{x}\right]$: $\mathbf{x}$ が既知であるときの，$\mathbf{y}$ の予測しづらさ
- $I\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)$: $\mathbf{x}$ が分かったとき，$\mathbf{y}$ がどのくらい予測しやすくなるか

相互情報量 (Mutual Information)

- 相互情報量 $I(\mathbf{x}, \mathbf{y})$:

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbb{E}\left[\ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}\right] = \iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{y}$$

- カルバック–ライブラーダイバージェンスを用いると,

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\mathbb{E}\left[\ln \frac{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}\right] = \mathrm{KL}\left(p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \parallel p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})\right)$$

- KL ダイバージェンスの性質 (≥ 0) から, $I(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$.
- $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}\ p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x})p(\mathbf{y})$ のとき (独立であるとき) に限って 0.
- 確率変数 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ が, 独立に近いかどうかを表している.

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ をもつ $\mathbf{x}$ の確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ を考える.
- この確率分布から, 観測データが得られたとする.

$$\mathbf{x}_{\text{meas}} \leftarrow p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$$

- 観測データ $\mathbf{x}_{\text{meas}}$ を基に, パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を推定したい.
- パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ が, 不偏推定量であるとき, 以下が成り立つ:

$$\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}}\right] = \boldsymbol{\theta} \quad \longrightarrow \quad \mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right] = \mathbf{0}$$

- 推定量の期待値 $\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}}\right]$ が, 真のパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ に一致する (偏りがない).

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- 例えば, 平均 $\boldsymbol{\mu}$ と共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ をもつ $\mathbf{x}$ の確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ から, N 個の観測データが得られたとする:

$$\{\mathbf{x}_{1,\mathrm{meas}}, \ldots, \mathbf{x}_{N,\mathrm{meas}}\} \leftarrow p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{\mathrm{meas}}\right] = \boldsymbol{\mu}, \quad \mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x}_{\mathrm{meas}} - \boldsymbol{\mu}\right)\left(\mathbf{x}_{\mathrm{meas}} - \boldsymbol{\mu}\right)^{\top}\right] = \boldsymbol{\Sigma}$$

- 観測データは, 互いに独立であるとする.
- 観測データ $\{\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\}$ を基に, 分布の平均 $\boldsymbol{\mu}$ と共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ を推定したい.

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- 平均 $\boldsymbol{\mu}$ と共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ をもつ $\mathbf{x}$ の確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ から, N 個の観測データが得られたとする:

$$\{\mathbf{x}_{1,\mathrm{meas}}, \ldots, \mathbf{x}_{N,\mathrm{meas}}\} \leftarrow p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

- 観測データ $\{\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\}$ を基に, 分布の平均 $\boldsymbol{\mu}$ と共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ を推定したい.
- 平均と共分散の不偏推定量は, 次のようになる:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}, \quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right) \left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}$$

- 共分散については, 分母が N の代わりに $N-1$ となることに注意.
- $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ は, 標本平均という.
- $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ は, 不偏分散という (分母が N のときは, 標本分散).

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- 不偏分散は, 分母が N の代わりに $N-1$ になる (少し大きく補正):

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right) \left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^\top$$

- 共分散の計算に, 真の平均 $\boldsymbol{\mu}$ ではなく, 観測データから計算された標本平均 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ を使っているから.
  - 観測データ $\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}$ と, 標本平均 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ の間には相関がある.
  - 差分 $\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}$ は, 真の平均から計算された, 本当の差分 $\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \boldsymbol{\mu}$ よりは小さくなりがちである.
- $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ が平均の不偏推定量であることは, 次のように分かる:

$$\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\right] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\right] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\right]}_{=\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}$$

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- また, $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\right] - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top$ を用いて,

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^\top\right] &= \mathbb{E}\left[\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\right)\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\mathbf{x}_{j,\mathrm{meas}}\right)^\top\right] \\
&= \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\mathbf{x}_{j,\mathrm{meas}}^\top\right] \\
&= \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}^\top\right] + \frac{1}{N^2}\sum_{i\neq j}\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\mathbf{x}_{j,\mathrm{meas}}^\top\right] \\
&= \frac{1}{N^2}\cdot N\left(\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top\right) + \frac{1}{N^2}\cdot N(N-1)\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top = \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top
\end{aligned}
$$

- 観測データは互いに独立だから, 無相関であって, $i \neq j$ のとき

$$
\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\mathbf{x}_{j,\mathrm{meas}}^\top\right] = \mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}\right]\mathbb{E}\left[\mathbf{x}_{j,\mathrm{meas}}\right]^\top = \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top
$$

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ の共分散 $\mathbb{E}\left[(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}])(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}])^\top\right]$ は,

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}])(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}])^\top\right] &= \mathbb{E}\left[(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu})(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu})^\top\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^\top\right] - \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}]\,\boldsymbol{\mu}^\top - \boldsymbol{\mu}\,\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}]^\top + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top \\
&= \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top \\
&= \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma}
\end{aligned}
$$

- $\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^\top\right] = \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^\top$, $\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}] = \boldsymbol{\mu}$ を用いた.
- 観測データが増えれば $(N \to \infty)$, 上記の共分散は $\mathbf{0}$ に近づく.
- 言い換えると, 平均の不偏推定量 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ は, $\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\mu}}] = \boldsymbol{\mu}$ に近づいてゆく.

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- $\hat{\Sigma}$ が共分散の不偏推定量であることも，次のように分かる:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right] &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}\right] \\
&= \frac{1}{N-1}\left(\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}\left[\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}\right)\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}\right)^{\top}\right]\right. \\
&\quad+\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}\right)\left(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}\right] \\
&\quad\left.+\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu}\right)^{\top}\right]+\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}\left[\left(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}\right]\right)
\end{aligned}
$$

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- 各項は,

$$\mathbb{E}\left[(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu})^\top\right]=\boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbb{E}\left[(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})^\top\right]=\frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N}(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})^\top\right]=\mathbb{E}\left[N(\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})^\top\right]=-\boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}-\boldsymbol{\mu})^\top\right]=\mathbb{E}\left[N(\boldsymbol{\mu}-\hat{\boldsymbol{\mu}})(\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})^\top\right]=-\boldsymbol{\Sigma}$$

- $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}$ であるから, $\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}=N\hat{\boldsymbol{\mu}}$.
- これらを, $\mathbb{E}\left[\hat{\Sigma}\right]$ の式に代入する.

不偏推定量 (Unbiased Estimate)

- $\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right]$ を計算すると,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right] &= \frac{1}{N-1}\left(\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma} + \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma}\right) \\ &= \frac{1}{N-1}\left(N\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\right) = \frac{1}{N-1}(N-1)\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}\end{aligned}$$

- 以上より, 平均と共分散の不偏推定量は, 次のようになる:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}}, \quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\mathbf{x}_{i,\mathrm{meas}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^{\top}$$

$$\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\right] = \boldsymbol{\mu}, \quad \mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right] = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\top}\right] = \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\top}, \quad \mathbb{E}\left[\left(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}\right)\left(\hat{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}\right)^{\top}\right] = \frac{1}{N}\boldsymbol{\Sigma}$$

クラメール・ラオの下限 (Cramér–Rao Lower Bound)

- パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ をもつ $\mathbf{x}$ の確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ を考える.
- この確率分布から, 観測データが得られたとする.

$$\mathbf{x}_{\text{meas}} \leftarrow p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$$

- 観測データ $\mathbf{x}_{\text{meas}}$ を基に, パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の不偏推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ を計算する.

$$\mathbb{E}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right] = \mathbf{0}$$

- 不偏推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ の共分散について, 以下が成り立つ:

$$\mathbb{E}\left[\left(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right)\left(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right)^{\top}\right] \geq \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$$

- これを, クラメール・ラオの下限という.

クラメール・ラオの下限 (Cramér–Rao Lower Bound)

- 確率分布 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ のパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の不偏推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ について,

$$\mathbb{E}\left[\left(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right)\left(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}\right)^\top\right] \geq \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$$

- $\mathbf{I}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})$ は, フィッシャー情報行列とよぶ.

$$\mathbf{I}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial \ln p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right)^\top \left(\frac{\partial \ln p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right)\right]$$

- 不等号 $\mathbf{A} \geq \mathbf{B}$ は, 行列 $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ が半正定値になることを意味する.

$$\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^\top (\mathbf{A} - \mathbf{B})\, \mathbf{x} \geq 0 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{A} - \mathbf{B} \geq 0$$

- 観測データを使ってパラメータを推定するとき, その精度には限度がある.

目次

微分のレイアウト (再掲)

- 以下の 2 つのレイアウトに大別される ($\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を縦ベクトルとする).
- 分子レイアウト (Numerator Layout)
  - $\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$ は, 縦ベクトル, $\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$ は, 横ベクトル
- 分母レイアウト (Denominator Layout)
  - $\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$ は, 横ベクトル, $\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$ は, 縦ベクトル

スカラによる微分 (再掲)

分子レイアウト	分母レイアウト
$\dfrac{\partial y}{\partial x}$	$\dfrac{\partial y}{\partial x}$
$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial y_m}{\partial x} \end{pmatrix}$	$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial \mathbf{y}^\top}{\partial x}$
$\dfrac{\partial \mathbf{Y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_{11}}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_{1n}}{\partial x} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y_{m1}}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_{mn}}{\partial x} \end{pmatrix}$	まれ

ベクトルによる微分 (再掲)

分子レイアウト	分母レイアウト
$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_n} \end{pmatrix}$
$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial \mathbf{y}^\top}{\partial \mathbf{x}}$

行列による微分 (再掲)

分子レイアウト	分母レイアウト
$\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial y}{\partial x_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y}{\partial x_{1n}} & \cdots & \dfrac{\partial y}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{X}^\top}$	$\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial y}{\partial x_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y}{\partial x_{m1}} & \cdots & \dfrac{\partial y}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}$

ヤコビ行列, ヤコビアン (Jacobi Matrix, Jacobian)

- n, m 次変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_m)^\top$ を考える.
- $\dfrac{\partial y_i}{\partial x_j}$ を (i, j) 成分とした $m \times n$ 行列 $\mathbf{J}$ を, ヤコビ行列という.

$$\mathbf{J} = \frac{\partial(y_1, y_2, \ldots, y_m)}{\partial(x_1, x_2, \ldots, x_n)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y_m}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

- 分子レイアウトにおける $\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \equiv \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^\top}$ と同じ.
- ヤコビ行列の行列式 $\det \mathbf{J}$ を, ヤコビアンとよぶ.

積分の変数変換

- n, m 次変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_m)^\top$ を考える.
- 関数 $f(\mathbf{y})$ があり, 次の積分を行いたいとする:

$$\int f(\mathbf{y})\, \mathrm{d}\mathbf{y}$$

- $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$, $m \times n$ 行列を $\mathbf{G} = \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}$ とおく.
- ヤコビアン $\det \mathbf{G}$ を使うと, 次のように変数変換できる:

$$\int f(\mathbf{y})\, \mathrm{d}\mathbf{y} \quad \longrightarrow \quad \int f(\mathbf{g}(\mathbf{x}))\, |\det \mathbf{G}|\, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- $\mathrm{d}\mathbf{y} = |\det \mathbf{G}|\, \mathrm{d}\mathbf{x}$ のように関連付けられる.
- ヤコビアンは, 変数変換による微小な体積 $\mathrm{d}\mathbf{x}$, $\mathrm{d}\mathbf{y}$ の変化率を表す.

積分の変数変換 (スカラの場合)

- 関数 $f(y)$ があり, 次の計算を行いたいとする:

$$\int f(y)\,\mathrm{d}y$$

- $y = g(x)$ とすると, 次のように変数変換できる:

$$\int f(y)\,\mathrm{d}y \quad \longrightarrow \quad \int f(g(x))\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x$$

偶関数の積分

- 関数 $f(x)$ が偶関数であれば, $f(-x) = f(x)$ となる.
- $-a$ から a までの積分は,

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-a}^{0} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x$$

- 第一項において $x = -y$ とすると, $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y} = -1$, 積分範囲は $[-a, 0]$ から $[a, 0]$ になるので,

$$\begin{aligned}\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{a}^{0} \color{red}{f(-y)}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{a}^{0} \color{red}{f(y)}(-1)\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{0}^{a} f(y)\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = 2\int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

奇関数の積分

- 関数 $f(x)$ が奇関数であれば，$f(-x) = -f(x)$ となる．
- $-a$ から a までの積分は，

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-a}^{0} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x$$

- 第一項において $x = -y$ とすると，$\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y} = -1$，積分範囲は $[-a, 0]$ から $[a, 0]$ になるので，

$$\begin{aligned}\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{a}^{0} f(-y)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{a}^{0} -f(y)(-1)\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x \\ &= -\int_{0}^{a} f(y)\,\mathrm{d}y + \int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = 0\end{aligned}$$

偶関数, 奇関数の積分

偶関数, 奇関数の積分

$f(x)$ が偶関数であれば, $[-a, a]$ の積分は, $[0, a]$ の積分の 2 倍:

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = 2\int_{0}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x$$

$f(x)$ が奇関数であれば, $[-a, a]$ の積分は 0:

$$\int_{-a}^{a} f(x)\,\mathrm{d}x = 0$$

- 以下も成り立つ:
- (奇関数) $\times$ (奇関数) $=$ (偶関数)
- (奇関数) $\times$ (偶関数) $=$ (奇関数)
- (偶関数) $\times$ (偶関数) $=$ (偶関数)

偶関数，奇関数の積分 (多変数関数)

- n 次変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$ を考える．
- $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)^\top$ として，$-\mathbf{a}$ から $\mathbf{a}$ までの $f(\mathbf{x})$ の積分は，

$$\int_{-\mathbf{a}}^{\mathbf{a}} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{-a_1}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n$$

x_1 に関する積分を，$[-a_1, 0]$，$[0, a_1]$ の 2 つの範囲に分割すると，

$$\begin{aligned}\int_{-\mathbf{a}}^{\mathbf{a}} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} &= \int_{-a_1}^{0}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n \\ &\quad + \int_{0}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n\end{aligned}$$

偶関数, 奇関数の積分 (多変数関数)

- 第一項について $x_i = -y_i$ とすると, $\dfrac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}y_i} = -1$ であり, 積分範囲の正負も入れ替わるから,

$$
\begin{aligned}
&\int_{-a_1}^{0} \int_{-a_2}^{a_2} \cdots \int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_n \\
&= \int_{a_1}^{0} \int_{a_2}^{-a_2} \cdots \int_{a_n}^{-a_n} f(-y_1, -y_2, \ldots, -y_n)(-1)^n\,\mathrm{d}y_1\,\mathrm{d}y_2 \cdots \mathrm{d}y_n \\
&= \int_{0}^{a_1} \int_{-a_2}^{a_2} \cdots \int_{-a_n}^{a_n} f(-y_1, -y_2, \ldots, -y_n)\,\mathrm{d}y_1\,\mathrm{d}y_2 \cdots \mathrm{d}y_n \\
&= \int_{0}^{a_1} \int_{-a_2}^{a_2} \cdots \int_{-a_n}^{a_n} f(-\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y}
\end{aligned}
$$

- 積分範囲を交換すると, 符号が反転する.
- 上記の例では, n 個の積分範囲を交換したので, $(-1)^n$ が消える.

偶関数, 奇関数の積分 (多変数関数)

- この結果を使って, 第一項を置き換えれば,

$$\int_{-\mathbf{a}}^{\mathbf{a}} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{-a_1}^{0}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n$$
$$+\int_{0}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n$$
$$=\int_{0}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(-\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y} + \int_{0}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

- 偶関数なら $f(-\mathbf{y}) = f(\mathbf{y})$, 奇関数なら $f(-\mathbf{y}) = -f(\mathbf{y})$ だから,

$$\int_{-\mathbf{a}}^{\mathbf{a}} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \begin{cases} 2\displaystyle\int_{0}^{a_1}\int_{-a_2}^{a_2}\cdots\int_{-a_n}^{a_n} f(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} & (f(\mathbf{x})\text{ が偶関数}) \\ 0 & (f(\mathbf{x})\text{ が奇関数}) \end{cases}$$

ガウス積分

ガウス積分の基本形

$$\int_0^\infty \exp\left(-x^2\right) \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

上記の積分を I とおくと，I^2 は

$$I^2 = \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\left(x^2 + y^2\right)\right) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y$$

$x = r\cos\theta$，$y = r\sin\theta$ のように変数変換すると，ヤコビアンは

$$\begin{aligned}\left|\det \frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}\right| &= \left|\det \begin{pmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial r} & \dfrac{\partial x}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial y}{\partial r} & \dfrac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix}\right| = \left|\det \begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix}\right| \\ &= \left|r\left(\cos^2\theta + \sin^2\theta\right)\right| = |r|\end{aligned}$$

ガウス積分

$x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$, $x, y \in [0, \infty]$ であるから, $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \dfrac{\pi}{2}]$.
ヤコビアンは $|r| = r$ であるから, $\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta$.
以上より, I^2 は

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\left(x^2+y^2\right)\right) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\ &= \int_0^\infty \int_0^{\frac{\pi}{2}} \exp\left(-r^2\right) r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathrm{d}\theta \int_0^\infty \exp\left(-r^2\right) r\,\mathrm{d}r \\ &= \frac{\pi}{2}\left[-\frac{1}{2}\exp\left(-r^2\right)\right]_0^\infty = \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$

であるから, $I = \dfrac{\sqrt{\pi}}{2}$.

ガウス積分

ガウス積分の基本形

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-x^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$$

上記の積分を I とおくと，I^2 は

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(x^2 + y^2\right)\right) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y$$

$x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$ のように変数変換すると，ヤコビアンは r. よって，$\mathrm{d}x \, \mathrm{d}y = r \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}\theta$. $x, y \in (-\infty, \infty)$ であるから，$r \in [0, \infty]$, $\theta \in [0, 2\pi]$.

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \exp\left(-r^2\right) r \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}\theta = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\infty} \exp\left(-r^2\right) r \, \mathrm{d}r \\ &= 2\pi \left[-\frac{1}{2} \exp\left(-r^2\right)\right]_0^{\infty} = \pi \quad \longrightarrow \quad I = \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

ガウス積分

ガウス積分の基本形

$$\int_0^{\infty} \exp\left(-x^2\right) \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-x^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$$

$\exp\left(-x^2\right)$ は偶関数 $(f(x) = f(-x))$ であるから，$-\infty$ から ∞ までの積分値は，0 から ∞ までの積分値の倍となる．

ガウス積分

ガウス積分の基本形

$$\int_0^\infty \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$$

$$\int_{-\infty}^\infty \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$$

$y = \sqrt{a}x$ とすると, $x = \dfrac{y}{\sqrt{a}}, \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y} = \dfrac{1}{\sqrt{a}}$ だから,

$$\int_0^\infty \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \int_0^\infty \exp\left(-y^2\right) \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y} \mathrm{d}y = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_0^\infty \exp\left(-y^2\right) \mathrm{d}y = \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$\exp\left(-ax^2\right)$ は偶関数だから, 積分範囲を $[0, \infty)$ から $(-\infty, \infty)$ に広げると, 積分値は倍となる.

ガウス積分

ガウス積分の基本形

$$\int_0^\infty x \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2a} \quad (a > 0)$$
$$\int_{-\infty}^\infty x \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = 0 \quad (a > 0)$$

次のように計算できる:

$$\int_0^\infty x \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \left[-\frac{1}{2a} \exp\left(-ax^2\right)\right]_0^\infty = \frac{1}{2a}$$

$x \exp\left(-ax^2\right)$ は奇関数だから，$-\infty$ から ∞ までの積分は 0.

ガウス積分

ガウス積分の漸化式

$I_n = \int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x$ とおくと $(a > 0)$,

$$I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$$

次のように部分積分すれば ($\lim_{x\to\infty} x^n \exp(-x) = 0$ に注意):

$$\begin{aligned} I_n &= \int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x \\ &= \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} \exp\left(-ax^2\right)\right]_0^\infty + \frac{2a}{n+1} \int_0^\infty x^{n+2} \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x \\ &= \frac{2a}{n+1} \int_0^\infty x^{n+2} \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{2a}{n+1} I_{n+2} \end{aligned}$$

ガウス積分

ガウス積分の漸化式

$I_n = \int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x$ とおくと $(a > 0)$,

$$I_{n+2} = -\frac{\partial}{\partial a} I_n$$

次のように計算できる:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial a} I_n &= \frac{\partial}{\partial a} \int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x \\ &= \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial a} x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x \\ &= -\int_0^\infty x^{n+2} \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = -I_{n+2}\end{aligned}$$

微分と積分の交換については条件がある (上の場合は可能).

ガウス積分

ガウス積分 (2 乗)

$$\int_0^\infty x^2 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (a > 0)$$
$$\int_{-\infty}^\infty x^2 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (a > 0)$$

$I_n = \displaystyle\int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x$ とすると，$I_{n+2} = \dfrac{n+1}{2a} I_n$ である．

$I_0 = \displaystyle\int_0^\infty \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ だから，

$$I_2 = \int_0^\infty x^2 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{0+1}{2a} I_0 = \frac{1}{2a}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

$x^2 \exp\left(-ax^2\right)$ は偶関数なので，$(-\infty, \infty)$ の積分は，$[0, \infty)$ の積分の 2 倍．

ガウス積分

ガウス積分 (3 乗)

$$\int_0^\infty x^3 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2a^2} \quad (a > 0)$$

$$\int_{-\infty}^\infty x^3 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = 0 \quad (a > 0)$$

$I_n = \int_0^\infty x^n \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x$ とすると，$I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$ である．

$I_1 = \int_0^\infty x \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2a}$ だから，

$$I_3 = \int_0^\infty x^3 \exp\left(-ax^2\right) \mathrm{d}x = \frac{1+1}{2a} I_1 = \frac{1}{a}\frac{1}{2a} = \frac{1}{2a^2}$$

$x^3 \exp\left(-ax^2\right)$ は奇関数だから，$-\infty$ から ∞ までの積分は 0.

ガウス積分

ガウス積分 (二次関数の一般形)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2 + bx + c\right) \mathrm{d}x = \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$-ax^2 + bx + c = -a\left(x - \dfrac{b}{2a}\right)^2 + \dfrac{b^2}{4a} + c$ と平方完成できる.

$y = x - \dfrac{b}{2a}$ とすると, $\dfrac{\partial x}{\partial y} = 1$, 積分範囲は $(-\infty, \infty)$ だから,

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2 + bx + c\right) \mathrm{d}x &= \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ay^2\right) \frac{\partial x}{\partial y} \mathrm{d}y \\
= \quad \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ay^2\right) \mathrm{d}y &= \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \sqrt{\frac{\pi}{a}}
\end{aligned}$$