

多変量正規分布の乱数生成について

清家大嗣

平成 31 年 10 月 20 日

1 多変量正規分布の乱数生成について

1.1 一次元の正規分布の乱数生成 (ボックスミュラー法) [1]

正規分布の CDF (累積分布関数) を解析的に求めることはできない. 従って, 逆関数法を用いた乱数生成手法を用いることはできないため, 別のアプローチを取る必要がある. そこで, 2 つの独立した標準正規分布に従う確率変数 x, y に変数変換を施すことをベースとしたボックスミュラー法を用いる. x, y は共に $(-\infty, \infty)$ に含まれる実数であるため, r, θ を用いて次式で表せる.

$$x = \sqrt{r} \cos \theta \quad (1)$$

$$y = \sqrt{r} \sin \theta \quad (2)$$

ここで, 確率変数 x, y の同時確率密度 $p(x, y)$ がヤコビアン $J = \partial(x, y) / \partial(r, \theta)$ を用いて次式のように表せることに着目する ($|J|$ は体積拡張率であることに注意).

$$p(x, y) dx dy = p(r, \theta) |J| dr d\theta \quad (3)$$

このことから次式が成立する.

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-(x^2 + y^2)/2) dx dy = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-r/2)}{2} dr d\theta \quad (4)$$

$$(5)$$

(4) 式の右辺から, 確率変数 r は平均 2 の指数分布に従い, θ は $[0, 2\pi]$ 上の一様分布に従うと見做すことができる. 従って, 確率変数 r, θ は次式のように, 定義域が $[0, 1]$ である一様乱数 t_1, t_2 を用いて表現することができる (逆関数法).

$$r = -2 \log(1 - t_1) \quad (6)$$

$$\theta = 2\pi t_2 \quad (7)$$

(6, 7) 式に実際に一様分布に従う乱数 t_1, t_2 を代入して得られた r, θ を (1, 2) 式に代入すれば, 正規分布に従う乱数 x, y を得ることができる.

1.2 多変量正規分布 (Multivariate Normal Distribution) の乱数生成

最初に, 標準正規分布 (平均 0, 分散 1) に従っている n 個の乱数 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ について考える. この確率変数ベクトルに対し, 行列 P による線形変換したベクトルを \mathbf{y} と置く.

$$\mathbf{y} = P\mathbf{x} \quad (8)$$

ここで、 n 個の確率変数の同時確率密度 $p(\mathbf{x})$ について考えると、ヤコビアン $J = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{y}$ を用いて次式が成立する。

$$p(\mathbf{x})dx_1dx_2\dots dx_n = p(\mathbf{y})|J|dy_1dy_2\dots dy_n \quad (9)$$

また、 $p(\mathbf{x})$ は n 個の独立な正規分布の結合確率密度であるため、次式が成立する。

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x})dx_1dx_2\dots dx_n &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x_i^2/2)dx_1dx_2\dots dx_n \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \exp(-\mathbf{x}^T \mathbf{x}/2)dx_1dx_2\dots dx_n \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \exp(-\mathbf{y}^T (P^{-1})^T P^{-1} \mathbf{y}/2)|J|dy_1dy_2\dots dy_n \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n} \exp(-\mathbf{y}^T \Sigma^{-1} \mathbf{y}/2)|J|dy_1dy_2\dots dy_n \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 $PP^T \equiv \Sigma$ と置いた。ここで、 Σ がどのような意味を持つか考える。実は Σ は、確率変数ベクトル \mathbf{y} の共分散行列なのである。このことは次の式変形により確かめられる。

$$\begin{aligned} E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T] &= E[P\mathbf{x}\mathbf{x}^T P^T] \\ &= PE[\mathbf{x}\mathbf{x}^T]P^T \\ &= PIP^T = PP^T = \Sigma \end{aligned} \quad (11)$$

2 行目の式変形は確率変数が \mathbf{x} 部分のみであるため可能である。3 行目の式変形は、 \mathbf{x} が互いに独立な正規分布に従う確率変数ベクトルのため可能である。また、ヤコビアン J の絶対値は Σ を用いて次式のように計算可能である。

$$\begin{aligned} |J| &= |\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{y}| = \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} (P^{-1} \mathbf{y}) \right| \\ &= |\det P^{-1}| = |\det (P^{-1})^T \det P^{-1}|^{1/2} \\ &= |\det \Sigma^{-1}|^{1/2} = 1/|\det \Sigma|^{1/2} \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、3 行目の式変形は行列の積の行列式は行列式の積に等しい ([2] の式 (21) 参照) を利用した。このことから、(10) 式は次のように変形することが可能となる。

$$p(\mathbf{x})dx_1dx_2\dots dx_n = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\det \Sigma|}} \exp(-\mathbf{y}^T \Sigma^{-1} \mathbf{y}/2)dy_1dy_2\dots dy_n \quad (13)$$

この (13) 式は PRML [3] の (2, 43) 式と本質的に同じ意味を持っている。このことは、 \mathbf{y} を仮に平均値分移動したとしても、ヤコビアンの計算結果に影響を与えないことから簡単にわかる。従って、(8) 式に代入する P が求めれば、正規分布に従う乱数を生成し、それを線形変換するという手続きで多変量正規分布に従う乱数を生成できる。 P はコレスキー分解 [4] により、共分散行列から求めることができる。

参考文献

- [1] 高校数学の美しい物語「ボックスミュラー法（正規乱数の生成）の証明」<https://mathtrain.jp/boxmuller>
- [2] K. B. Petersen et al., 「Matrix Cookbook」<https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf>

- [3] C.M. Bishop. 元田浩, 栗田多喜夫他訳, 吉識知明訳. 2006. 『パターン認識と機械学習』 発行: 丸善出版株式会社, 編集: 主プリンガー・ジャパン株式会社.
- [4] 統計数理研究所 乱数ライブラリー 「多変量正規分布」 http://random.ism.ac.jp/info01/distribution_random_number_generation/node2.html