

Wishart分布とその性質

多変量正規分布の推定とBox-Cox変換

山北倫太郎

June 25, 2025

1 Wishart分布

7.1 はじめに

- $X = \begin{pmatrix} x'_1 \\ \vdots \\ x'_n \end{pmatrix}$ は標本行列を表す。
- \bar{x} と S は、それぞれ μ と Σ の一貫性のある不偏推定量を提供する。
 - $n\bar{x} = X'1$ (標本平均ベクトル(\bar{x}))
 - ここで、 1 は n 次元のベクトルで、すべての要素が 1 である。
 - $(n-1)S = X'X - n\bar{x}\bar{x}'$ (標本共分散行列(S))
 - S は母集団の共分散行列の不偏推定量であり、 $X'X$ は標本行列の転置と自身の積である。

7.1 はじめに

- 7.2節では、 x_1, \dots, x_n が独立同分布で $x \sim N_p(\mu, \Sigma)$ かつ $\Sigma > 0$ の場合の μ と Σ の最尤推定量が導出される。
- \bar{x} と S の同時分布に関する基本的な結果が命題7.1で証明される。
- 7.3節では、Wishart分布の基本的な特性が研究される。
- 7.4節では、データの多変量正規性を高めるためのBox-Cox変換が提示される。

7.2 \bar{x} と S の同時分布

- 正規性がある場合、 \bar{x} と S はいくつかの点で「最適」である。
- $V = (n - 1)S$ とする。
- X の確率密度関数は様々な方法で記述できる。

$$\begin{aligned} f(X) &= (2\pi)^{-np/2} |\Sigma|^{-n/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i - \mu) \right] \\ &= (2\pi)^{-np/2} |\Sigma|^{-n/2} e^{-\frac{n}{2} \mu' \Sigma^{-1} \mu} \text{etr} \left[-\frac{1}{2} \text{tr} \Sigma^{-1} X' X + n \mu' \Sigma^{-1} \bar{x} \right] \\ &= (2\pi)^{-np/2} |\Sigma|^{-n/2} \text{etr} \left[-\frac{1}{2} [V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1} \right] \end{aligned} \quad (7.1)$$

確率変数ベクトル $X = (x_1, \dots, x_p)'$ が平均ベクトル μ と共分散行列 Σ を持つ多変量正規分布に従う場合、その確率密度関数 $f(x)$ は次のように表される。

p次元多変量正規分布の確率密度関数 (p.d.f.)

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

- ここで、 x は確率変数ベクトル X がとりうる値を示す p 次元の列ベクトルである。
- μ は、各確率変数の平均値を要素とする p 次元の平均ベクトルである。
- Σ は、 $p \times p$ の共分散行列であり、各確率変数間の分散と共分散を表す対称な正定値行列である。

$\exp[\text{tr}(\boxtimes)] = \text{etr}(\boxtimes)$ の記法を用いると、確率密度関数は次のように表される。

$$\begin{aligned}
 & (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \\
 &= (\mathbf{x}_i' - \boldsymbol{\mu}') \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \\
 &= \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i + \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} \\
 &= \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i - 2\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}
 \end{aligned}$$

- ここで、 $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i$ はスカラー値であり、スカラーの転置は自分自身なので、 $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i = (\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu})'$ です。
したがって、 $\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i$ は同じスカラー値を表します。

2行目 (続き)

$\exp[\text{tr}(\boxtimes)] = \text{etr}(\boxtimes)$ の記法を用いると、確率密度関数は次のように表される。

$$\begin{aligned} & (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \\ &= (\mathbf{x}_i' - \boldsymbol{\mu}') \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \\ &= \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i + \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} \\ &= \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i - 2\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} \end{aligned}$$

ここで、 $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i$ はスカラー値であり、スカラーの転置は自分自身なので、 $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i = (\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu})'$ です。したがって、 $\mathbf{x}_i' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{\mu}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i$ は同じスカラー値を表します。

2行目 (さらに続き)

- μ' は平均ベクトル μ の転置を表し、 μ は p 次元の列ベクトルなので、 μ' は1行 p 列の行ベクトル。
 - Σ^{-1} は共分散行列 Σ の逆行列を表し、 Σ は $p \times p$ の正方行列なので、 Σ^{-1} も $p \times p$ の正方行列。
 - x_i は p 次元の列ベクトルであり、 x_i' はその転置で1行 p 列の行ベクトルになります。
- よって、 $(x_i - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i - \mu)$ はスカラー値であります。
- また、 $\mu' \Sigma^{-1} \mu$ は、 $e^{-\frac{1}{2} n \mu' \Sigma^{-1} \mu}$ の形で指数関数に含まれます。

1項目

- 行列のトレースは、行列の対角成分の総和であり、 $\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_i a_{ii}$ で定義される。

トレースの性質

- $\text{tr}(\mathbf{AB}) = \text{tr}(\mathbf{BA})$
- $\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n a_{ii}$, ここで $\mathbf{A} = (a_{ij})$ は $n \times n$ 行列である。

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i' \Sigma^{-1} \mathbf{x}_i &= \sum_{i=1}^n \text{tr}(\Sigma^{-1} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i') \\ &= \text{tr}\left(\Sigma^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i'\right) \\ &= \text{tr}(\Sigma^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{X})\end{aligned}$$

1項目 (続き)

- $X = \begin{pmatrix} x'_1 \\ \vdots \\ x'_n \end{pmatrix}$ であるから、 $X'X = \sum_{i=1}^n x_i x'_i$ となる。
- ここで、 x'_i は x_i の転置を表し、 $x_i x'_i$ は x_i の外積を表す。
- Σ^{-1} は共分散行列の逆行列であり、 $x_i x'_i$ は x_i の外積を表す。

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n -2\mathbf{x}_i' \Sigma^{-1} \mu &= -2 \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i' \right) \Sigma^{-1} \mu \\ &= -2 \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i' \right) \Sigma^{-1} \mu \\ \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i' &= (\mathbf{x}_1' + \cdots + \mathbf{x}_n') = (n\bar{\mathbf{x}})' \text{であるので} \\ &= -2(n\bar{\mathbf{x}})' \Sigma^{-1} \mu \\ &= -2n\bar{\mathbf{x}}' \Sigma^{-1} \mu\end{aligned}$$

$\sum_{i=1}^n \mu' \Sigma^{-1} \mu$ はスカラー値であり、これが n 回足されます。

$$\sum_{i=1}^n \mu' \Sigma^{-1} \mu = n \mu' \Sigma^{-1} \mu$$

したがって、これら3つの項を合わせると、指数部分は次のようになります。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \mu) &= \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i' \Sigma^{-1} \mathbf{x}_i - 2n \bar{\mathbf{x}}' \Sigma^{-1} \mu + n \mu' \Sigma^{-1} \mu \\ &= \text{tr}(\Sigma^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{X}) - 2n \bar{\mathbf{x}}' \Sigma^{-1} \mu + n \mu' \Sigma^{-1} \mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} [\text{tr}(\Sigma^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}) - 2\mathbf{n}\bar{\mathbf{x}}'\Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{n}\boldsymbol{\mu}'\Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu}] \\ & = -\frac{1}{2}\text{tr}(\Sigma^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}) + \mathbf{n}\bar{\mathbf{x}}'\Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu} - \frac{\mathbf{n}}{2}\boldsymbol{\mu}'\Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu} \end{aligned}$$

となり、2行目の指数部分と完全に一致します。

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \mu) &= \sum_{i=1}^n ((\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) + (\bar{\mathbf{x}} - \mu))' \Sigma^{-1} ((\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) + (\bar{\mathbf{x}} - \mu)) \\ &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n (\bar{\mathbf{x}} - \mu)' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \mu) \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \mu)\end{aligned}$$

3行目 (続き)

ここで、最後の項は

$$2 \left(\sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) \right)' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}) = 2(n\bar{\mathbf{x}} - n\bar{\mathbf{x}})' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}) = 0$$

となるので、

$$\sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) = \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) + n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu})' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu})$$
$$\mathbf{V} = (n-1)\mathbf{S} = \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})'$$

証明

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})' &= \sum_{i=1}^n [x_i x_i' - x_i \bar{x}' - \bar{x} x_i' + \bar{x} \bar{x}'] \\&= \sum_{i=1}^n x_i x_i' - \sum_{i=1}^n x_i \bar{x}' - \sum_{i=1}^n \bar{x} x_i' + \sum_{i=1}^n \bar{x} \bar{x}' \\&= X'X - n\bar{x}\bar{x}' - n\bar{x}\bar{x}' + n\bar{x}\bar{x}' \\&= X'X - n\bar{x}\bar{x}' \\&= (n-1)S\end{aligned}$$

したがって、 $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})' = (n-1)S = V$ である。

証明（各項の詳細な計算）

- $\sum_{i=1}^n x_i x_i'$: 標本行列 X は各行が x_i' (x_i

は列ベクトル) として定義されるので、 $X = \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ x_n' \end{pmatrix}$ 。その転置は $X' = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n)$

となる。したがって、 $X'X = \sum_{i=1}^n x_i x_i'$ 。

- $\sum_{i=1}^n x_i \bar{x}'$: \bar{x}' は和のインデックス i に依存しないので、 $\sum_{i=1}^n x_i \bar{x}' = (\sum_{i=1}^n x_i) \bar{x}' = n\bar{x}\bar{x}'$ 。
- $\sum_{i=1}^n \bar{x} x_i'$: \bar{x} も和のインデックス i に依存しないので、 $\sum_{i=1}^n \bar{x} x_i' = \bar{x}(\sum_{i=1}^n x_i') = n\bar{x}\bar{x}'$ 。
- $\sum_{i=1}^n \bar{x}\bar{x}'$: これは n 回足し合わせるので、 $n\bar{x}\bar{x}'$ 。

7.2 \bar{x} と S の同時分布

- $(X'X, \bar{x})$ (または (S, \bar{x}) のような一対一関数) は、 (Σ, μ) の最小十分完全統計量である。
- Rao-Blackwell/Lehmann-Schefféの定理により、不偏推定量の中で (\bar{x}, S) は最小分散を持つ。
- $n - 1 \geq p$ の場合の最尤推定量 (MLE) $\hat{\mu}$ と $\hat{\Sigma}$ を得るには、対数尤度関数を最小化する。

$$\ln |\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} + (\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \mu) \quad (7.2)$$

- 最尤推定量は $\hat{\mu} = \bar{x}$ と $\hat{\Sigma} = \frac{1}{n} V$ である。

定理 (Rao-Blackwell)

$\hat{\theta}$ がパラメータ θ の不偏推定量であり、 T が十分統計量であるとする。このとき、 $\hat{\theta}^* = E[\hat{\theta} \mid T]$ と定義すると、

- $\hat{\theta}^*$ は θ の不偏推定量である。
- $\text{Var}(\hat{\theta}^*) \leq \text{Var}(\hat{\theta})$ が成り立つ。

定理 (Lehmann-Scheffé)

T がパラメータ θ の完全かつ十分な統計量であるとする。もし $\hat{\theta}^* = g(T)$ が T の関数であり、かつ θ の不偏推定量であるならば、 $\hat{\theta}^*$ は θ の最小分散不偏推定量 (MVUE) である。

なぜ $(X'X, \bar{x})$ または (S, \bar{x}) なのか？

多変量正規分布の確率密度関数（尤度関数）の指数部分を見返すと、 μ と Σ を含む項が、 $X'X$ と \bar{x} の形で表現されていることがわかります。特に、

$$\text{etr} \left\{ -\frac{1}{2} [V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1} \right\}$$

という形で書けることから、観測されたデータ X の情報のうち、パラメータ μ と Σ に影響を与える部分は、本質的に V （または S ）と \bar{x} に集約されていることが読み取れます。これにより、これらが十分統計量であることが示唆

前提となる事実

- $\mathbf{x}_i \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ (i.i.d.)
- $\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i$
- $(n-1)\mathbf{S} = \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})'$ [これは $(n-1)\mathbf{S} = \mathbf{X}'\mathbf{X} - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}'$ に等しい]
- $(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{S})$ が $(\boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\mu})$ に対して最小十分かつ完全な統計量である。

ステップ1: 不偏性 (Unbiasedness) の確認

a. \bar{x} が μ の不偏推定値であること

$$\begin{aligned} E[\bar{x}] &= E\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i\right] \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E[x_i] \end{aligned}$$

各 x_i は $N_p(\mu, \Sigma)$ に従うため、 $E[x_i] = \mu$ です。

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mu \\ &= \frac{1}{n} (n\mu) \\ &= \mu \end{aligned}$$

ステップ1: 不偏性 (Unbiasedness) の確認

b. S が Σ の不偏推定値であること

$$\begin{aligned} E[S] &= E \left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})' \right] \\ &= \frac{1}{n-1} E \left[\sum_{i=1}^n (x_i x_i' - x_i \bar{x}' - \bar{x} x_i' + \bar{x} \bar{x}') \right] \\ &= \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n E[x_i x_i'] - \sum_{i=1}^n E[x_i \bar{x}'] - \sum_{i=1}^n E[\bar{x} x_i'] + \sum_{i=1}^n E[\bar{x} \bar{x}'] \right) \end{aligned}$$

ここで、各項を評価します。

- $E[x_i x_i'] = \text{Cov}(x_i) + E[x_i] E[x_i'] = \Sigma + \mu \mu'$.
- $E[\bar{x} \bar{x}'] = \text{Cov}(\bar{x}) + E[\bar{x}] E[\bar{x}'] = \frac{1}{n} \Sigma + \mu \mu' (\because \bar{x} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n} \Sigma))$.
- $\sum_{i=1}^n E[x_i \bar{x}'] = E[(\sum_{i=1}^n x_i) \bar{x}'] = E[n \bar{x} \bar{x}'] = n E[\bar{x} \bar{x}'] = n(\frac{1}{n} \Sigma + \mu \mu') = \Sigma + n \mu \mu'$

ステップ1: 不偏性 (Unbiasedness) の確認 (続き)

b. S が Σ の不偏推定値であること (続き)

これらを $E[S]$ の式に代入します。

$$\begin{aligned} E[S] &= \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n (\Sigma + \mu\mu') - (\Sigma + n\mu\mu') - (\Sigma + n\mu\mu') + n\left(\frac{1}{n}\Sigma + \mu\mu'\right) \right) \\ &= \frac{1}{n-1} (n\Sigma + n\mu\mu' - \Sigma - n\mu\mu' - \Sigma - n\mu\mu' + \Sigma + n\mu\mu') \\ &= \frac{1}{n-1} ((n-1)\Sigma) \\ &= \Sigma \end{aligned}$$

したがって、 $E[S] = \Sigma$ であり、 S は Σ の不偏推定値です。

ステップ2: Rao-Blackwell / Lehmann-Scheffé の定理の適用

Lehmann-Schefféの定理の記述

Lehmann-Schefféの定理は、「もし、ある統計量 T が完全かつ十分 (Complete and Sufficient) であり、 $\hat{\theta}^* = g(T)$ が T の関数であり、かつパラメータ θ の不偏推定値であるならば、 $\hat{\theta}^*$ は θ の最小分散不偏推定量 (MVUE) である」と述べています。

定理の適用

- パラメータ θ は (μ, Σ) に対応します。
- 統計量 T は (\bar{x}, S) に対応します。テキストには、 $(X'X, \bar{x})$ (または (S, \bar{x}) のような1対1関数) が (Σ, μ) に対して最小十分かつ完全であることが述べられています。
- \bar{x} は $T = (\bar{x}, S)$ の関数 (具体的には第一成分) であり、ステップ1で μ の不偏推定値であることを示しました。
- S は $T = (\bar{x}, S)$ の関数 (具体的には第二成分) であり、ステップ1で Σ

上記の条件がすべて満たされるため、Lehmann-Schefféの定理により、 \bar{x} は μ のMVUEであり、 S は Σ のMVUEであると結論付けられます。したがって、 (\bar{x}, S) は (Σ, μ) のMVUEであると述べることができます。

最尤推定値 (MLE) の目的

- この式 $\ln|\Sigma| + \text{tr}\frac{1}{n}V\Sigma^{-1} + (\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1}(\bar{x} - \mu)$ (7.2) を最小化するのは、未知のパラメータである平均ベクトル μ と共分散行列 Σ の最尤推定値 (Maximum Likelihood Estimates, MLE) を求めるためです.
- 最尤推定法は、観測されたデータが最も「もっともらしい」と思われるようなパラメータ
- これを数学的に行うには、データの確率密度関数（または確率質量関数）をパラメータ

尤度関数から対数尤度関数へ

- 多変量正規分布の場合、観測された標本行列 X の同時確率密度関数（尤度関数）は、以下のような形をしていました:

$$f(X) = (2\pi)^{-\frac{np}{2}} |\Sigma|^{-\frac{n}{2}} \text{etr} \left\{ -\frac{1}{2} [V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1} \right\} \quad (7.1)$$

-
- この尤度関数を直接最大化する代わりに、通常は計算が容易な対数尤度関数を最大化し
- 上記の確率密度関数に自然対数 \ln を取ると、以下のようになります:

$$\begin{aligned} \ln f(X) &= \ln \left((2\pi)^{-\frac{np}{2}} |\Sigma|^{-\frac{n}{2}} \text{etr} \left\{ -\frac{1}{2} [V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1} \right\} \right) \\ &= -\frac{np}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln |\Sigma| - \frac{1}{2} \text{tr} ([V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1}) \end{aligned}$$

対数尤度関数の簡略化と最小化 (1)

- この対数尤度関数を $l(\Sigma, \mu)$ と表すとき、MLEを得るためには $l(\Sigma, \mu)$ を最大化する必要があります.
- ここで、定数項である $-\frac{np}{2}\ln(2\pi)$ はパラメータ Σ や μ に依存しないため、最大化には影響しません.
- したがって、最大化すべきは残りの項です:

$$l(\Sigma, \mu) \propto -\frac{n}{2}\ln|\Sigma| - \frac{1}{2}\text{tr}([V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)']\Sigma^{-1})$$

- この式を最大化することは、符号を反転させて最小化することと同じです.
- そして、全体を $\frac{n}{2}$ で割っても最大化/最小化の結果は変わらないため、以下の式を最小化することになり

対数尤度関数の簡略化と最小化 (2)

$$\begin{aligned}& \frac{1}{n} \text{tr} ([V + n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)'] \Sigma^{-1}) + \ln |\Sigma| \\&= \frac{1}{n} \text{tr}(V \Sigma^{-1}) + \frac{1}{n} \text{tr}(n(\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1}) + \ln |\Sigma| \\&= \frac{1}{n} \text{tr}(V \Sigma^{-1}) + \text{tr}((\bar{x} - \mu)(\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1}) + \ln |\Sigma| \\&= \ln |\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} + (\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \mu) \quad (7.2)\end{aligned}$$

- (最後の項はスカラーなので tr を外すことができます。)
- この式は、テキストに示されている式 (7.2) と完全に一致します。



したがって、この式を最小化する目的は、観測されたデータの下で、母集団パラメータ μ と共分散行列 Σ

が最も「もっともらしい」値（すなわち最尤推定値）を見つけるためです。

ステップ1: $\hat{\mu} = \bar{x}$ の特定と最後の項の除去（まとめて解説）

- テキストにあるように、「（最後の項は ≥ 0 なので） $\hat{\mu} = \bar{x}$ であることは明らか」です。
- この「最後の項」とは、 $+(\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \mu)$ のことです。
- この項は、 Σ が正定値行列（つまり Σ^{-1} も正定値行列）であるため、常に0以上（ ≥ 0 ）です。
- この項を最小化するためには、その値を0にするのが最も小さい値です。
- $(\bar{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \mu) = 0$ となるのは、 $\bar{x} - \mu = 0$ のとき、すなわち $\mu = \bar{x}$ のときです。
- したがって、 μ に関する最尤推定値 $\hat{\mu}$ は \bar{x} であると直ちに分かります。
- $\hat{\mu} = \bar{x}$ を元の式に代入すると、最後の項は0になります。

$$\begin{aligned} & \ln|\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} + (\bar{x} - \bar{x})' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \bar{x}) \\ &= \ln|\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} + 0' \Sigma^{-1} 0 \\ &= \ln|\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} \end{aligned}$$

ステップ2: $\ln|\Sigma|$ の変形と V の導入

- 最小化すべき式：

$$\ln|\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1}$$

●

ここで、テキストでは「 $\ln|nV^{-1}\Sigma|$ 」という項が導入されています。これは、最小化の

- 行列式の性質を利用します。
 - $|AB| = |A||B|$
 - $|cA| = c^p|A|$ （ここで c はスカラー、 A は $p \times p$ 行列）
- $\ln|\Sigma|$ を V を含む形に変換するために、恒等式 $I = V^{-1}V$ を利用することを考えます。

$$\begin{aligned}\ln|\Sigma| &= \ln|V^{-1}V\Sigma| \\ &= \ln|V^{-1}(V\Sigma)| \\ &= \ln|nV^{-1}| + \ln\left|\frac{1}{n}V\Sigma\right|\end{aligned}$$

式変形のまとめ (1)

- $$\ln|nV^{-1}\Sigma| + \text{tr}\frac{1}{n}V\Sigma^{-1}$$

- これは、以下の恒等式（定数を追加・削除しても最小化の問題は変わらない）に基づいて

$$\ln|\Sigma| = \ln|nV^{-1}\Sigma| - \ln|nV^{-1}|$$

- ここで、 $\ln|nV^{-1}|$ は Σ に依存しない定数です。
- したがって、最小化すべき式 $\ln|\Sigma| + \text{tr}\frac{1}{n}V\Sigma^{-1}$ は、定数項 $\ln|nV^{-1}|$ を追加（または削除）しても、 Σ の最適値は変わりません。

式変形のまとめ (2)



$$\begin{aligned} & \ln|\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} \\ &= (\ln|nV^{-1}\Sigma| - \ln|nV^{-1}|) + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} \\ &= \ln|nV^{-1}\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1} - \ln|nV^{-1}| \end{aligned}$$

- テキストでは、この定数項 $-\ln|nV^{-1}|$ を「追加された定数」として無視し、以下の式を最小化することに焦点を当てています

$$\ln|nV^{-1}\Sigma| + \text{tr} \frac{1}{n} V \Sigma^{-1}$$

ステップ3: Σ の MLE の最終導出

定数 $\ln |nV^{-1}|$ は Σ の最適化には影響しません。条件 $n - 1 \geq p$ は V が確率1で非特異（正則）であることを保証します（これは後の系7.2で証明されます）。変数変換 $T = nV^{-1}\Sigma$ を導入すると、最小化すべき式は

$$\ln |T| + \text{tr}(T^{-1})$$

となります。この式は T のすべての固有値が1のとき最小値をとります。したがって、 $\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}V$ が最尤推定値となります。

固有値による表現

- 対称行列 T の場合、そのトレースと行列式は固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ を用いて次のように表現できます。
 - $\text{tr}(T) = \sum_{j=1}^p \lambda_j$
 - $|T| = \prod_{j=1}^p \lambda_j$
- したがって、 $\ln|T| + \text{tr } T^{-1}$ は、固有値の関数として次のように書くことができます。
 - $\ln|T| = \ln(\prod_{j=1}^p \lambda_j) = \sum_{j=1}^p \ln(\lambda_j)$
 - $\text{tr}(T^{-1}) = \sum_{j=1}^p \frac{1}{\lambda_j}$ (T の固有値が λ_j なら、 T^{-1} の固有値は $1/\lambda_j$)
- これにより、最小化すべき関数は、各固有値 λ_j の関数として次のように分解できます。

$$f(\lambda_1, \dots, \lambda_p) = \sum_{j=1}^p \left(\ln(\lambda_j) + \frac{1}{\lambda_j} \right)$$

各固有値ごとの最小化 (1)

- この関数は、各固有値 λ_j について独立に最小化できます。

$$g(\lambda) = \ln(\lambda) + \frac{1}{\lambda}$$

- この関数 $g(\lambda)$ を最小化するために、 λ について微分し、導関数を0と置きます。

$$g'(\lambda) = \frac{d}{d\lambda}(\ln(\lambda) + \lambda^{-1})$$

$$g'(\lambda) = \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2}$$

- $g'(\lambda) = 0$ とすると、

$$\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2} = 0$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda^2}$$

$$\lambda^2 = \lambda$$

$$\lambda(\lambda - 1) = 0$$

各固有値ごとの最小化 (2)

- $\lambda = 0$ または $\lambda = 1$ 。
- しかし、行列式 $|T|$ は非ゼロでなければならない（ウィシャート分布の文脈で V は非特異なので）ため、固有値 λ は0ではありません。
- したがって、唯一の極値点は $\lambda = 1$ です。
- 二階微分を調べて、これが最小値であることを確認します。

$$g''(\lambda) = \frac{d}{d\lambda}(\lambda^{-1} - \lambda^{-2})$$

$$g''(\lambda) = -\lambda^{-2} + 2\lambda^{-3} = -\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^3}$$

- $\lambda = 1$ のとき、 $g''(1) = -1 + 2 = 1 > 0$
なので、これは極小値であり、唯一の最小値です。

各固有値ごとの最小化 (3) および結論

- 関数 $f(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ は、すべての固有値 λ_j が 1 のときに最小値を取ります。
- すべての固有値が1である対称行列は、単位行列 I だけです。
- よって、 $T=I$ のとき最小値となり、 $nV^{-1}\hat{\Sigma} = I$ 、すなわち $\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}V$ となります。
- これが多変量正規分布における共分散行列の最尤推定値です。

備考

Gaussに遡るよく知られた結果として、 \mathbb{R} 上の確率密度関数 $f(x - \theta)$ で、 x が θ の最尤推定量 (MLE) となる唯一の場所族は正規密度に由来します。

この正規密度のMLE特性は \mathbb{R}^p でも成り立ちます [Stadje (1993)]。すなわち、 $f(x - \theta)$ という形の密度で、 x が常に θ のMLEとなるのは正規分布の場合のみです。

$\bar{x} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n}\Sigma)$ が「明らか」な理由 (1)



この記述が「明らか」とされるのは、多変量正規分布の線形変換と標本平均の性質に関

- 前提: 各観測ベクトル x_i は独立同分布 (i.i.d.) で $x_i \sim N_p(\mu, \Sigma)$ に従います。

- 標本平均の定義: 標本平均 \bar{x} は、 $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ です。

- 正規分布の和の性質:

- 独立な正規分布に従う確率変数の和も正規分布に従います。
- $E[\sum x_i] = \sum E[x_i] = \sum \mu = n\mu$ 。
- $\text{Cov}(\sum x_i) = \sum \text{Cov}(x_i) = \sum \Sigma = n\Sigma$ (独立性の仮定による)。
- したがって、 $\sum_{i=1}^n x_i \sim N_p(n\mu, n\Sigma)$ です。

$\bar{x} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n}\Sigma)$ が「明らか」な理由 (2)

- 正規分布の定数倍の性質: $c \cdot Y \sim N_p(c \cdot E[Y], c^2 \cdot \text{Cov}(Y))$ です。
 - ここで、 $Y = \sum x_i$ 、 $c = \frac{1}{n}$ とすると、

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum x_i \sim N_p \left(\frac{1}{n}(n\mu), \left(\frac{1}{n}\right)^2 (n\Sigma) \right)$$

$$\bar{x} \sim N_p \left(\mu, \frac{1}{n^2} n\Sigma \right)$$

$$\bar{x} \sim N_p \left(\mu, \frac{1}{n} \Sigma \right)$$

標本平均の変換

- \bar{x} は x_i の標本平均です。

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

- $x_i = Az_i + \mu$ を代入すると、

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Az_i + \mu) \\ &= \frac{1}{n} \left(A \sum_{i=1}^n z_i + \sum_{i=1}^n \mu \right) \\ &= \frac{1}{n} (A(n\bar{z}) + n\mu) \\ &= A\bar{z} + \mu\end{aligned}$$

- したがって、 \bar{x} の分布は $A\bar{z} + \mu$ の分布と一致します。

標本分散共分散行列の変換 (1/2)

- S_x は x_i の標本分散共分散行列です。

$$(n-1)S_x = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})'$$

- $x_i - \bar{x}$ の部分を変換します。

$$\begin{aligned}x_i - \bar{x} &= (Az_i + \mu) - (A\bar{z} + \mu) \\&= Az_i - A\bar{z} \\&= A(z_i - \bar{z})\end{aligned}$$

- これを標本分散共分散行列の定義に代入します。

$$\begin{aligned}(n-1)S_x &= \sum_{i=1}^n (A(z_i - \bar{z}))(A(z_i - \bar{z}))' \\&= \sum_{i=1}^n A(z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})'A'\end{aligned}$$

標本共分散行列の変換 (1)

- 標本共分散行列 S は

$$(n-1)S_z = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})'$$

で定義されます。

- $x_i = Az_i + \mu$ および $\bar{x} = A\bar{z} + \mu$ を代入すると、

$$x_i - \bar{x} = A(z_i - \bar{z})$$

- よって、

$$\begin{aligned}(n-1)S &= \sum_{i=1}^n A(z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})' A' \\ &= A \left(\sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})' \right) A' \\ &= A(n-1)S_z A'\end{aligned}$$

- したがって、 S の分布は $AS_z A'$ の分布と一致します。

「 $\perp\!\!\!\perp$ 」の意味

- 数学や統計学において、「 $\perp\!\!\!\perp$ 」という記号は、通常統計的独立性 (statistical independence) を意味します.
- $A \perp\!\!\!\perp B$ と書かれた場合、それは確率変数（またはベクトル、行列） A と B が互いに統計的に独立であることを意味します.
- 統計的独立性とは、一方の変数の値が分かっていても、もう一方の変数の値に関する情報がつかない状態を指します.
- つまり、2つの事象や変数が互いに影響し合わない状態を指します.

PZ $\perp\!\!\!\perp$ QZ であることが明らかである理由

- PZ と QZ が独立 ($\perp\!\!\!\perp$) である理由は、P と Q が直交射影行列であり、 $P + Q = I$ かつ $PQ = QP = 0$ という性質に基づきます。
- Z の各列は独立な標準正規ベクトルなので、PZ (平均成分) と QZ (偏差成分) はともに正規分布に従います。
- PZ と QZ の和は Z そのものであり、PZ と QZ は直交する部分空間への射影なので、 $\text{Cov}(PZ, QZ) = 0$ が成り立ちます。
- 多変量正規分布では、無相関 (共分散ゼロ) は独立と同値なので、PZ と QZ は独立です。
- したがって、PZ $\perp\!\!\!\perp$ QZ となることは「明らか」です。

PZ $\perp\!\!\!\perp$ QZ であることが明らかである理由 (続き)

- 直交射影: P と Q は、互いに直交する射影行列です.

- $P^2 = P$ かつ $Q^2 = Q$ (射影性)
- $PQ = QP = 0$ (直交性).

これは、平均への射影と平均からの偏差への射影が互いに直交していることを意味します

したがって $\bar{x} \perp S_x$ の理由

- これは、独立性が線形変換によって保たれるという性質に基づきます。
- 先に示したように、 $x_i = Az_i + \mu$ から $(\bar{x}, S_x) = (A\bar{z} + \mu, AS_zA')$ となります。
- \bar{x} は \bar{z} の線形変換、 S_x は S_z の線形変換です。
- $\bar{z} \perp S_z$ であるため、 \bar{x} と S_x も独立です。
- よって、 $\bar{x} \perp S_x$ が成り立ちます。

$\bar{z} \perp\!\!\!\perp S_z$ の理由

- 多変量標準正規分布において、標本平均 \bar{z} と標本分散共分散行列 S_z は独立です。
- これは、 PZ （平均成分）と QZ （偏差成分）が直交射影行列 P と Q による射影であり、 $PZ \perp\!\!\!\perp QZ$ が成り立つためです。
- \bar{z} は PZ の線形変換、 S_z は QZ のみから構成されるため、 PZ と QZ の独立性から \bar{z} と S_z も独立となります。
- この性質は、正規分布の直交射影による分割が独立性をもたらすことに由来します。

$n\bar{z} = Z'P1$ の導出

- $n\bar{z} = Z'P1$ の理由:
 - 標本平均ベクトル \bar{z} の定義は $\bar{z} = n^{-1}Z'1$ です。
 - ここで、 $P = n^{-1}11'$ は平均への射影行列です。
 - $Z'P1 = Z'(n^{-1}11')1 = n^{-1}Z'1(1'1)$ となります。
 - $1'1 = n$ なので、 $Z'P1 = n^{-1}Z'1 \cdot n = Z'1$ です。
 - よって、 $n\bar{z} = Z'1 = Z'P1$ となります。

$n\bar{z} = Z'P1$ と $(n-1)S_z = Z'QQZ$ の導出 (続き)

- $(n-1)S_z = Z'QQZ$ の理由:
 - 標本分散共分散行列 S_z の定義は

$$(n-1)S_z = \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})'$$

- $Q = I - n^{-1}11'$ は、平均ベクトルへの射影を除去する直交射影行列です。
- $Qz_i = z_i - \bar{z}$ となるので、 QZ は各行から平均を引いた行列になります。
- よって、 QZ の i 行目は $(z_i - \bar{z})'$ です。
- QZ の各行を縦に並べたものが QZ 、その転置が $(QZ)' = Z'Q$ です。
- したがって、

$$(n-1)S_z = (QZ)'(QZ) = Z'Q'QZ$$

- Q は射影行列なので $Q' = Q$ かつ $Q^2 = Q$ です。よって

$$(n-1)S_z = Z'QQZ$$

7.3 Wishart分布の性質 - 命題

命題 7.3

$W \sim W_p(m)$ かつ $m \geq p$ ならば、 W は確率1で非特異である。

$W \stackrel{d}{=} Z'Z$ であり、 $Z' = (z_1, \dots, z_m)$ かつ z_i は独立同分布の $N_p(0, I)$ に従う。

$\text{rank } W \stackrel{d}{=} \text{rank } Z'Z = \text{rank } Z \geq \text{rank } (z_1, \dots, z_p)$ は確率1で p となる。

したがって、 $\text{rank } W$ は確率1で p となる。

7.2 \bar{x} と S の同時分布 (続き)

- 一般的な結果として、 \bar{x} は $N_p(\mu, \Sigma/n)$ に従う。
- 標本行列 X を Z を用いて表す。 $X \stackrel{d}{=} ZA' + 1\mu'$, ここで $Z \sim N_n^p(0, I_n \otimes I_p)$ かつ $\Sigma = AA'$ 。
- \bar{x} と S_x の分布は \bar{x} と S_z の分布に等しい。
- $P = n^{-1}11'$ と $Q = I - n^{-1}11'$ は直交射影である。
- $PZ \perp QZ$ であるため、 $\bar{z} \perp S_z$ である。
- $Q = HH'$ は直交基底を与えるため、 $(n-1)S_z = Z'HH'Z = U'U$ となる。

7.2 \bar{x} と S の同時分布 (続き)

定義 7.1 Wishart分布

$W \sim W_p(m)$ ならば $W \stackrel{d}{=} \sum_{i=1}^m z_i z_i'$, ここで z_i は独立同分布で $N_p(0, I)$ に従う。

$V \sim W_p(m, \Sigma)$ ならば $V \stackrel{d}{=} AWA'$, ここで $\Sigma = AA'$ かつ $W \sim W_p(m)$ 。

命題 7.1

x_i が独立同分布で $N_p(\mu, \Sigma)$ に従う場合 ($i = 1, \dots, n$)、

- $\bar{x} \sim N_p(\mu, \Sigma/n)$
- $(n-1)S \sim W_p(n-1, \Sigma)$
- $\bar{x} \perp S$

7.3 Wishart分布の性質 - 補題

補題 7.1

$Z = (z_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が独立同分布の $N(0, 1)$ に従う場合、 $P(|Z| = 0) = 0$ 。

$n = 1$ の場合は z_{11} が絶対連続分布を持つため、結果は成立する。
 Z を以下のように分割する。

$$Z = \begin{pmatrix} z_{11} & z'_{12} \\ z_{21} & Z_{22} \end{pmatrix}$$

$Z_{22} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ に対して結果が成立すると仮定すると、

$$\begin{aligned} P(|Z| = 0) &= P(|Z| = 0, |Z_{22}| \neq 0) + P(|Z| = 0, |Z_{22}| = 0) \\ &= P(z_{11} = z'_{12} Z_{22}^{-1} z_{21}, |Z_{22}| \neq 0) \\ &= E[P(z_{11} = z'_{12} Z_{22}^{-1} z_{21}, |Z_{22}| \neq 0 | z_{12}, z_{21}, Z_{22})] = 0 \end{aligned}$$

7.3 Wishart分布の性質 - 系

系 7.1

$Z = (z_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が独立同分布の $N(0, 1)$ に従う場合、 $P(|Z| = t) = 0, \forall t$ 。

$$P(|Z| = t) = E[P(z_{11} = z'_{12} Z_{22}^{-1} z_{21} + t/|Z_{22}|, |Z_{22}| \neq 0 | z_{12}, z_{21}, Z_{22})] = 0.$$

補題7.1と系7.1は、 Z が任意の絶対連続分布を持つ場合にも有効である。

7.3 Wishart分布の性質 - 命題

命題 7.3

$W \sim W_p(m)$ かつ $m \geq p$ ならば、 W は確率1で非特異である。

$W \stackrel{d}{=} Z'Z$ であり、 $Z' = (z_1, \dots, z_m)$ かつ z_i は独立同分布の $N_p(0, I)$ に従う。

$\text{rank } W \stackrel{d}{=} \text{rank } Z'Z = \text{rank } Z \geq \text{rank } (z_1, \dots, z_p)$ は確率1で p となる。

したがって、 $\text{rank } W$ は確率1で p となる。