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 21, 2025

目次

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、$x_1, \ldots, x_n$ 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 。

$$f(X) = (2\pi)^{-np/2}|\Sigma|^{-n/2}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)'\Sigma^{-1}(x_i-\mu)\right] \tag{7.1}$$

$$= (2\pi)^{-np/2}|\Sigma|^{-n/2}e^{-\frac{n}{2}\mu'\Sigma^{-1}\mu}\mathrm{etr}\left[-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\ \Sigma^{-1}X'X + n\mu'\Sigma^{-1}\bar{x}\right]$$

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

1行目

確率変数ベクトル $X = (x_1, \ldots, x_p)'$ 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。

2行目

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

$$
\begin{aligned}
&(x_i-\mu)'\Sigma^{-1}(x_i-\mu)\\
&=(x_i'-\mu')\Sigma^{-1}(x_i-\mu)\\
&=x_i'\Sigma^{-1}x_i-x_i'\Sigma^{-1}\mu-\mu'\Sigma^{-1}x_i+\mu'\Sigma^{-1}\mu\\
&=x_i'\Sigma^{-1}x_i-2x_i'\Sigma^{-1}\mu+\mu'\Sigma^{-1}\mu
\end{aligned}
$$

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

2行目

- 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列の行ベクトルになります。
- Σ^{-1}は共分散行列Σの逆行列を表し、Σはp*pの正方行列なので、Σ^{-1}もp*pの正方行列になります。
- 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。

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。

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

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

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 $(i = 1, \ldots, n)$、

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

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、

$$P(|Z| = 0) = P(|Z| = 0, |Z_{22}| \neq 0) + P(|Z| = 0, |Z_{22}| = 0)$$

$$= P(z_{11} = z_{12}' Z_{22}^{-1} z_{21}, |Z_{22}| \neq 0)$$

$$= E[P(z_{11} = z_{12}' Z_{22}^{-1} z_{21}, |Z_{22}| \neq 0 | z_{12}, z_{21}, Z_{22})] = 0$$

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。

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、$Z' = (z_1, \ldots, z_m)$ かつ z_i は独立同分布の $N_p(0, I)$ に従う。
$\text{rank } W \stackrel{d}{=} \text{rank } Z'Z = \text{rank } Z \geq \text{rank } (z_1, \ldots, z_p)$ 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。