論　　文

ビジネスデータ分析の理論的基礎（Ⅰ）
—遡及Cholesky分解と多変量分布—

Theoretical Foundation of Business Data Analysis (I)
−Retrospective Cholesky Decomposition and Multivariate Distribution−

松　縄　　規
MATSUNAWA Tadashi

概要：　ビジネスデータ分析など様々な分野での多変量データ解析に関連して、標記事項について、教育的な効果も考え、提案・議論する。正値対称行列**A**に対して、通常のコレスキー分解とある種の対をなす、遡及（そきゅう）コレスキー分解**A=T'T**を与える。ここで**T**は対角線要素が全て正の実下三角行列である。この分解の特徴は多変量解析での応用に役立つよう、行列**T**のベクトル化を行う際にその要素を遡及的に行うことにある。応用として、線形代数学の基本的知識に基づいて、**T**に関する一つの多変量版カイ分布の密度関数およびそれと関連するWishart分布の密度関数の誘導を系統的に行う。

キーワード：　多変量解析、遡及コレスキー分解、行列の遡及的ベクトル化、多変量分布の誘導、多変量カイ分布、Wishart分布。

1．はじめに

ビジネスデータ等の分析に関わる統計推測において、二次形式統計量の分布を扱うことは非常に多い。その際、考察対称の統計量になんらかの変換を施して、解析し易くする工夫が必要になることがしばしばある。本稿の遡及Cholesky分解もそのような状況に対処するために導入したものである（cf .補題2.1）。これは、通常よく知られた上三角行列に基づくCholesky 分解とは異なり、下三角行列に基づく分解である。この分解は、多変量超幾何分布に従う無作為標本に基づく、カイ二乗適合度検定統計量に類似の二次形式統計量の分布関数の漸近理論を考察する際に有効である（cf. 松縄（2007））。その際の考察対象は正値定数行列を持つ、離散分布に従うランダムベクトルに関連する二次形式である．遡及Cholesky分解はその正値定数行列に適用され、上記統計量の分布関数等の近似を行う際に見通しのよい解析的表現を与えるなど有効である。上記二種類の分解の差異は，関連する平方根の分布を考える時顕著に現れる。例えば，後述の多変量カイ分布では，上三角平方根と下三角平方根では異なった密度関数型を取る。また、時系列解析のARモデルでのYule-Walker方程式における推定問題を、逆行列を用いずに、遡及Cholesky分解が利用できる。このように、遡及Cholesky分解は、通常のCholesky分解を

まつなわ　ただし（経営情報学科）

補完するだけでなく、それ自体がデータ分析等の理論において有用である。そこで、次章でこの分解を補題として取上げ証明する。

上述の多変量カイ分布に限らず、この遡及Cholesky分解は連続型多変量分布に従うランダム行列の密度関数の誘導にも有効であろうと推察される。そのことを確かめるために、第3章で、多変量分布のもっとも基本的なもの一つである、Wishart分布の密度関数の導出を行う。Wishart分布は、今日の多変量統計推論発展の嚆矢となった代表的な多変量分布である。その密度関数の導出は、Wishart（1928）による幾何学的方法にはじまり、その後、特殊で高度な行列や行列式の計算を伴うもの、多変量特性関数とその逆変換を利用するものなど、様々な解析的方法でも行われてきた。統計学の教科書（cf. Anderson（1958、1984、2003）、Wilks（1962））、Muirhead（1982））においても、そのいくつかを見ることができる。しかし、筆者の見るところ、いずれの導出方法も、線形代数学や多変量解析理論のかなり進んだ知識を必要とする。どの証明についてもそれらの行間を埋めることは少々面倒なように思える。本稿では、基本的には大学教養程度の線形代数学の知識で導出される遡及Cholesky分解と、積和行列の下三角平方根行列の分布を求め、それを利用して、Wishart確率密度関数を導出する。なお、通常のCholesky分解をBartlett 分解と呼ぶ多変量解析の教科書も多い。Bartlett分解は、例えば、Wishart密度関数が与えられている時、それを互いに独立な複数個のカイ二乗密度と複数個の標準正規密度の積への分割可能性を示すために用いられている（cf. Muirhead（1982), Theorem 3.2.14）。本稿では、それとは逆に、遡及Cholesky分解を利用して、Wishart 確率密度関数を既存の多くの方法よりも見通しがよいと思える仕方で導出する。

2．遡及コレスキー分解

次の補題が成立する.

補題 2. 1.（正値行列の下三角行列による平方根分解）

$\mathbf{A} = (a_{ij})_{p \times p}$ を $p \times p$ の実対称かつ正値な行列とする時、

(2.1) $$\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T}$$

となる、主対角要素が全て正値の、 $p \times p$ の実下三角行列（lower triangular matrix）$\mathbf{T} = (t_{i,j})_{p \times p}$ が存在する。この時、$\mathbf{T}$の各要素は次のように与えられる：

(2.2) $$t_{p,p} = \sqrt{a_{p,p}} \quad and \quad t_{p,i} = a_{p,i} / t_{p,p}, \quad (1 \le i \le p-1),$$

(2.3) $$t_{i,i} = \left(a_{i,i} - \sum\nolimits_{k=i+1}^{p} t_{k,i}^2\right)^{1/2}, \quad (1 \le i \le p-1),$$

(2.4) $$t_{i,j} = \left(a_{i,j} - \sum\nolimits_{k=i+1}^{p} t_{k,i} t_{k,j}\right) / t_{i,i}\,, \quad (1 \le j \le i \le p-1),$$

(2.5) $$t_{i,j} = 0, \ (1 \le i < j \le p).$$

証明　数学的帰納法により証明する。正値実対称行列

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{i,1} & a_{i+1,1} & \cdots & a_{p-1,1} & a_{p,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{i,1} & \cdots & a_{i,i} & a_{i,i+1} & \cdots & a_{p-1,i} & a_{p,i} \\ a_{i+1,1} & \cdots & a_{i+1,i} & a_{i+1,i+1} & \cdots & a_{p-1,i+1} & a_{p,i+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{p-1,1} & \cdots & a_{p-1,i} & a_{p-1,i+1} & \cdots & a_{p-1,p-1} & a_{p,p-1} \\ a_{p,1} & \cdots & a_{p,i} & a_{p,i+1} & \cdots & a_{p,p-1} & a_{p,p} \end{pmatrix}_{p\times p}$$

に対し、次の下方首座行列の数列 $\left\{\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}\right\}(i = 1,2,\cdots,p)$ を考える：

（2.6）
$$\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i} = \begin{pmatrix} a_{i,i} & \cdots & a_{p,i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p,i} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix}_{(\overline{p+1}-i)\times(\overline{p+1}-i)}$$

ここで、$\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}$ の添え字 $p+1-i$ は行列のサイズを、この添え字中の p は元の行列のサイズを表すと共に、当該の下方首座行列の対角最終要素の行番号を表し、対応する要素$a_{p,p}$ は基準の要素として固定される。また、上記添え字中の i はこの行列の対角先頭要素の行番号を表す。すなわち、次の関係を満たすように対角先頭要素の添え字番号が与えられる。

（2.7）　$\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}$ のサイズ
＝（元の行列$\mathbf{A}$のサイズ+1）－（ $\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}$ の対角先頭要素の添字番号）.

実際、次のようになる：

$$\underline{\mathbf{A}}_1 = (a_{p,p})_{1\times1=(\overline{p+1}-p)\times(\overline{p+1}-p)},\quad \underline{\mathbf{A}}_2 = \begin{pmatrix} a_{p-1,p-1} & a_{p,p-1} \\ a_{p,p-1} & a_{p,p} \end{pmatrix}_{2\times2=(\overline{p+1}-\overline{p-1})\times(\overline{p+1}-\overline{p-1})},$$

$$\cdots\cdots\cdots,$$

$$\underline{\mathbf{A}}_{p-i} = \begin{pmatrix} a_{i+1,i+1} & \cdots & a_{p,i+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p,i+1} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix}_{(p-i)\times(p-i)=(\overline{p+1}-\overline{i+1})\times(\overline{p+1}-\overline{i+1})}.$$

さて、数学的帰納法において、サイズ= 1 $\left(\text{i.e. } i = p-1 \ \ in \ \ \underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right)$ の下方首座行列 $\underline{\mathbf{A}}_1$ に対して、 $\sqrt{a_{p,p}} =: t_{p,p}, (p \geq 2)$ とすればよいから、定理は成立している。サイズ $2,3,\cdots,p-i,(\text{i.e. } i = p-2,\cdots,i \text{ in } \underline{\mathbf{A}}_{p-i})$ の時成立を仮定する。$\underline{\mathbf{A}}_{p-i}$は上の定義により、行列$\mathbf{A}$の下側から $p-i$ 行、右側から $p-i$ 列からなる、下方首座行列である。仮定から、

（2.8）
$$\underline{\mathbf{T}}'_{p-i}\underline{\mathbf{T}}_{p-i} = \underline{\mathbf{A}}_{p-i} = \begin{pmatrix} a_{i+1,i+1} & a_{i+2,i+1} & \cdots & a_{p,i+1} \\ a_{i+2,i+1} & a_{i+2,i+2} & & a_{p,i+2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{p,i+1} & a_{p,i+2} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix}_{(p-i)\times(p-i)}$$

となる主対角要素が正の $(p-i)\times(p-i)$ の下三角行列 $\underline{\mathbf{T}}_{p-i}$ が存在する。そこで、

(2.9) $$t_{i,i}^2 = a_{i,i} - t_{i+1,i}^2 - t_{i+2,i}^2 - \cdots - t_{p,i}^2 ,$$

(2.10) $$\begin{aligned}\mathbf{t}'_{p-i} &:= \begin{pmatrix} t_{i+1,i} & t_{i+2,i} & \cdots & t_{p-1,i} & t_{p,i} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{i+1,i} & a_{i+2,i} & \cdots & a_{p-1,i} & a_{p,i} \end{pmatrix}\left(\underline{\mathbf{T}}_{p-i}\right)^{-1} =: \mathbf{a}'_{p-i}\underline{\mathbf{T}}_{p-i}^{-1} ,\end{aligned}$$

(2.11) $$\underline{\mathbf{T}}'_{p+1-i} := \begin{pmatrix} t_{i,i} & \mathbf{t}'_{p-i} \\ \mathbf{0}'_{p-i} & \underline{\mathbf{T}}'_{p-i} \end{pmatrix}$$

と定義する時、 $\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}$ が（2.8）に対応する所要の、サイズ $p+1-i$ の下三角行列であることを示す：

(2.12) $$\underline{\mathbf{T}}'_{p+1-i}\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i} = \begin{pmatrix} t_{i,i} & \mathbf{t}'_{p-i} \\ \mathbf{0}_{p-i} & \underline{\mathbf{T}}'_{p-i} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} t_{i,i} & \mathbf{0}'_{p-i} \\ \mathbf{t}_{p-i} & \underline{\mathbf{T}}'_{p-i} \end{pmatrix}$$

となる。ここに、 $\mathbf{0}'_{p-i} = (0,\cdots,0)_{1\times(p-i)}$ を表す。 $\mathbf{t}'_{p+1-i} := \begin{pmatrix} t_{i,i} & \mathbf{t}'_{p-i} \end{pmatrix}$ と置くと（2.8）～（2.11）により

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{t}'_{p+1-i}\mathbf{t}_{p+1-i} & \mathbf{t}'_{p-i}\underline{\mathbf{T}}_{p-i} \\ \underline{\mathbf{T}}'_{p-i}\mathbf{t}_{(p-i),i} & \underline{\mathbf{T}}'_{p-i}\underline{\mathbf{T}}_{p-i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{i,i} & \mathbf{a}'_{p-i} \\ \mathbf{a}_{p-i} & \underline{\mathbf{A}}_{p-i} \end{pmatrix}.$$

となる。すなわち、

(2.13) $$\underline{\mathbf{T}}'_{p+1-i}\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i} = \underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}$$

となる。（2.8）から

(2.14) $$\left|\underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right| = \left|\underline{\mathbf{T}}'_{p-i}\underline{\mathbf{T}}_{p-i}\right| = \prod_{r=i+1}^{p} t_{r,r}^2 .$$

この結果と（2.11）から

(2.15) $$\left|\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}\right| = t_{i,i}\cdot\left|\underline{\mathbf{T}}'_{p-i}\right| = t_{i,i}\cdot\sqrt{\prod_{r=i+1}^{p} t_{r,r}^2} = \prod_{r=i}^{p} t_{r,r}$$

となる。したがって

(2.16) $$t_{i,i}^2 = \prod_{r=i}^{p} t_{r,r}^2 \Big/ \prod_{r=i+1}^{p} t_{r,r}^2 = \left|\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}\right| \Big/ \left|\underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right| > 0$$

が成立する。正の解 $t_{i,i} = \sqrt{\left|\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}\right| / \left|\underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right|}$ を選べば、（2.11）から

(2.17) $$\begin{aligned}\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i} &= \begin{pmatrix} t_{i,i} & \mathbf{0}'_{p-i} \\ \mathbf{t}_{p-i} & \underline{\mathbf{T}}_{p-i} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} t_{i,i} & & & & & \\ t_{i+1,i} & t_{i+1,i+1} & & & \mathbf{0} & \\ t_{i+2,i} & t_{i+2,i+1} & t_{i+2,i+2} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ t_{p-1,i} & t_{p-1,i+1} & t_{p-1,i+2} & \cdots & t_{p-1,p-1} & \\ t_{p,i} & t_{p,i+1} & t_{p,i+2} & \cdots & t_{p,p-1} & t_{p,p} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる。故に、（2.7）の関係は $\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}$ に対しても成立していることが示された。そこで、（2.17）で $i=1$ とすると、（2.7）により、下方首座行列の対角先頭要素が $a_{1,1}$ と

なる。すなわち、

$$(2.18)\qquad \underline{\mathbf{T}}_{\overline{p+1}-1} = \begin{pmatrix} t_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ t_{2,1} & t_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ t_{p,1} & t_{p,2} & \cdots & t_{p,p} \end{pmatrix}_{p\times p=(\overline{p+1}-1)\times(\overline{p+1}-1)} =: \mathbf{T}$$

にほかならない。よって、

$$(2.19)\qquad \mathbf{T}'\mathbf{T} = \underline{\mathbf{T}}'_{\overline{p+1}-1}\underline{\mathbf{T}}_{\overline{p+1}-1} = \underline{\mathbf{A}}_{\overline{p+1}-1} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{p,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p,1} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix}_{p\times p} = \mathbf{A}.$$

すなわち、正値行列**A**を平方根分解する、対角部分が正値の実下三角行列**T**を構成できることが証明された。

次に、（2.2）～（2.5）の関係式の成立を証明する。（2.2）は前半の証明中で、$t_{i,i} > 0$ と選択したことに注意すれば、（2.9）からも従うが、以下では、（2.1）の関係 $\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T}$ から直接 **T** の諸要素を導出する。

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & \cdots & a_{p,1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & & a_{p,2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{p,1} & a_{p,2} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{2,1} & \cdots & t_{p,1} \\ 0 & t_{2,2} & \cdots & t_{p,2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & t_{p,p} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} t_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ t_{2,1} & t_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ t_{p,1} & t_{p,2} & \cdots & t_{p,p} \end{pmatrix}$$

と表せることが分かったから、右辺の行列の積を計算して、次の関係式群を得る：

$$\begin{array}{lllcl}
a_{1,1} &=& t_{1,1}^2 + t_{2,1}^2 + \cdots + t_{p,1}^2 & \Rightarrow & t_{1,1}^2 = a_{1,1} - \sum_{k=2}^{p} t_{k,1}^2 \\
a_{2,1} &=& t_{2,2}t_{2,1} + t_{3,2}t_{3,1} + \cdots + t_{p,2}t_{p,1} & \Rightarrow & t_{2,1} = (a_{2,1} - \sum_{k=3}^{p} t_{k,2}t_{k,1})t_{2,2}^{-1} \\
a_{3,1} &=& t_{3,3}t_{3,1} + t_{4,3}t_{4,1} + \cdots + t_{p,3}t_{p,1} & \Rightarrow & t_{3,1} = (a_{3,1} - \sum_{k=4}^{p} t_{k,3}t_{k,1})t_{3,3}^{-1} \\
\vdots & & & & \vdots \\
a_{p,1} &=& t_{p,p}t_{p,1} & \Rightarrow & t_{p,1} = a_{p,1}t_{p,p}^{-1} \\
a_{2,2} &=& t_{2,2}^2 + t_{3,2}^2 + \cdots + t_{p,2}^2 & \Rightarrow & t_{2,2}^2 = a_{2,2} - \sum_{k=3}^{p} t_{k,2}^2 \\
a_{3,2} &=& t_{3,3}t_{3,2} + t_{4,3}t_{4,2} + \cdots + t_{p,3}t_{p,2} & \Rightarrow & t_{3,2} = (a_{3,2} - \sum_{k=4}^{p} t_{k,3}t_{k,2})t_{3,3}^{-1} \\
a_{4,2} &=& t_{4,4}t_{4,2} + t_{5,4}t_{5,2} + \cdots + t_{p,4}t_{p,2} & \Rightarrow & t_{4,2} = (a_{4,2} - \sum_{k=5}^{p} t_{k,4}t_{k,2})t_{4,4}^{-1} \\
\vdots & & & & \vdots \\
a_{p,2} &=& t_{p,p}t_{p,2} & \Rightarrow & t_{p,2} = a_{p,2}t_{p,p}^{-1} \\
a_{3,3} &=& t_{3,3}^2 + t_{4,3}^2 + \cdots + t_{p,3}^2 & \Rightarrow & t_{3,3}^2 = a_{3,3} - \sum_{k=4}^{p} t_{k,3}^2 \\
a_{4,3} &=& t_{4,4}t_{4,3} + t_{5,4}t_{5,3} + \cdots + t_{p,4}t_{p,3} & \Rightarrow & t_{4,3} = (a_{4,3} - \sum_{k=5}^{p} t_{k,4}t_{k,3})t_{4,4}^{-1} \\
\vdots & & & & \vdots \\
a_{p,4} &=& t_{p,p}t_{p,4} & \Rightarrow & t_{p,4} = a_{p,4}t_{p,p}^{-1} \\
\vdots & & & & \vdots \\
a_{p-1,p-1} &=& t_{p-1,p-1}^2 + t_{p,p-1}^2 & \Rightarrow & t_{p-1,p-1}^2 = a_{p-1,p-1} - t_{p,p-1}^2 \\
a_{p,p-1} &=& t_{p,p}t_{p,p-1} & \Rightarrow & t_{p,p-1} = a_{p,p-1}t_{p,p}^{-1} \\
a_{p,p} &=& t_{p,p}^2 & \Rightarrow & t_{p,p}^2 = a_{p,p}
\end{array}$$

これらを整理すれば、（2.2）～（2.4）を得る。（2.5）は明らか（証明了）。

注 2.1. 本補題は、行列論のCholesky分解定理（*cf.* Rencher（1995））と、多変量解析におけるBartlett分解（*cf.* Muirhead）とも関係している。それらは、実上三角行列（*upper triangular matrix*）で、実正値行列を平方根分解するもので、よく使われている。首座行列も従来のものは元の正値行列 $\mathbf{A}$ の対角先頭要素を常に含む形で構成されるが、本補題の場合、$\mathbf{A}$ の対角最終項を常に含む形で構成されるという違いを持つ。以下に、通常のCholesky分解と本稿での遡及Cholesky分解の比較を、表２.１にまとめる。

表２.１．Cholesky分解と遡及Cholesky分解

$\mathbf{A} = (a_{i,j})_{p\times p}$ ： 実対称正値、 $\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T},\ \mathbf{T} = (t_{i,j})_{p\times p}$ ： 三角行列		
分解の名称	Cholesky 分解	遡及Cholesky分解
Tの型	上三角	下三角
Tの要素	$t_{1,1} = \sqrt{a_{1,1}}$	$t_{p,p} = \sqrt{a_{p,p}}$
	$t_{1,j} = a_{1,j}t_{1,1}^{-1},\ 2 \le j \le p$	$t_{p,i} = a_{p,i}t_{p,p}^{-1},\ 1 \le i \le p-1$
	$t_{i,i} = \left(a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{k,i}^2\right)^{½},\quad 2 \le i \le p$	$t_{i,i} = (a_{i,i} - \sum_{k=i+1}^{p} t_{k,i}^2)^{½},\quad 1 \le i \le p-1$
	$t_{i,j} = \frac{a_{i,j}-\sum_{k=1}^{i-1} t_{k,i}t_{k,j}}{t_{i,i}},\quad 2 \le i < j \le p$	$t_{i,j} = \frac{a_{i,j}-\sum_{k=i+1}^{p} t_{k,i}t_{k,j}}{t_{i,i}},\quad 1 \le j < i \le p-1$
	$t_{i,j} = 0,\quad 1 \le j < i \le p$	$t_{i,j} = 0,\quad 1 \le i < j \le p$
首座行列	$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{i,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i,1} & \cdots & a_{i,i} \end{pmatrix}_{i\times i}$	$\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i} = \begin{pmatrix} a_{i,i} & \cdots & a_{p,i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p,i} & \cdots & a_{p,p} \end{pmatrix}_{(p+1-i)\times(p+1-i)}$
関連行列式	$\lvert\mathbf{A}_i\rvert = \left\lvert\mathbf{T}_i'\mathbf{T}_i\right\rvert = \prod_{r=1}^{i} t_{r,r}^2$	$\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i} = \left\lvert\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}'\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}\right\rvert = \prod_{r=i}^{p} t_{r,r}^2$
	$t_{i,i} = \sqrt{\lvert\mathbf{A}_i\rvert/\lvert\mathbf{A}_{i-1}\rvert} > 0$	$t_{i,i} = \sqrt{\left\lvert\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}\right\rvert/\left\lvert\underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right\rvert} > 0$

３．Wishart 分布の密度関数の導出

$\mathbf{z}_i(i = 1,\cdots,n)$ を $p-$次元標準正規分布 $N_p(\mathbf{0},\mathbf{I}_p)$ に従う独立な確率ベクトルとし、$\mathbf{X}$ を $p\times n$ のランダム行列 $\mathbf{X}_{p\times n} := (\mathbf{z}_1,\cdots,\mathbf{z}_n)$ とする。これを基に

$$\mathbf{A}_{p\times p} := \mathbf{X}_{p\times n}\mathbf{X}_{n\times p}' = (\mathbf{z}_1,\cdots,\mathbf{z}_n)_{p\times n}\begin{pmatrix} \mathbf{z}_1' \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n' \end{pmatrix}_{n\times p} \tag{3.1}$$

を考える。周知のように $\mathbf{A}$ の確率密度関数（標準Wishart分布の確率密度関数）は次式で与えられる：

(3.2) $$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{\sqrt{2^{np}}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)}|\mathbf{A}|^{\frac{n-p-1}{2}}etr\left(-\frac{1}{2}\mathbf{A}\right),\ (n \geq p),\ (\mathbf{A} > 0),$$

ここで、 $|\mathbf{A}|$ は行列 $\mathbf{A}$ に対する行列式、 $\mathbf{A} > 0$ は大きさ $p \times p$ の正値対称行列の空間を表す。すなわち、$p(p+1)/2-$次元Euclid空間の部分集合で、次の不等式系によって記述されるopen coneを表す：

(3.3) $$a_{i,i} > 0, \quad \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} > 0, \cdots, |\mathbf{A}| > 0.$$

また、 $\Gamma_p(a)[a > (p-1)/2]$ は多変量ガンマ関数で、通常の一変数ガンマ関数 $\Gamma(\cdot)$ により、次のように与えられる：

(3.4) $$\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right) = \pi^{\frac{p(p-1)}{4}} \prod_{r=1}^{p} \Gamma\left(\frac{n-\overline{r-1}}{2}\right)$$

誘導. $\mathbf{A} > 0$ から、遡及Cholesky分解により、補題2.1に示した $p \times p$ の下三角行列 $\mathbf{T} = (t_{i,j})$ が存在して、

(3.5) $$\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T}$$

と分解される。さらに、

(3.6) $$\mathbf{T}'_{p\times p}\mathbf{E}_p\mathbf{T}_{p\times p} = \mathbf{T}'_{p\times p}\begin{pmatrix} \mathbf{u}'_p \\ \mathbf{u}'_{p-1} \\ \vdots \\ \mathbf{u}'_1 \end{pmatrix}_{p\times n} (\mathbf{u}_p, \mathbf{u}_{p-1}, \cdots, \mathbf{u}_1)_{n\times p}\mathbf{T}_{p\times p}$$

と変形する。ここに、 $\mathbf{E}_p$ はサイズ $p \times p$ の単位行列 $\mathbf{u}'_i$ は第i番要素が1である、長さnの横ベクトルを表す。すなわち、

(3.7) $$\mathbf{u}'_i = \left(\underbrace{0, \cdots, 0}_{i-1}, 1, \underbrace{0, \cdots, 0}_{n-i}\right)_{1\times n}, (i = 1, \cdots, p \leq n)$$

とする。よって、

(3.8) $$\mathbf{T}'_{p\times p}\begin{pmatrix} \mathbf{u}'_p \\ \mathbf{u}'_{p-1} \\ \vdots \\ \mathbf{u}'_2 \\ \mathbf{u}'_1 \end{pmatrix}_{p\times n} = \begin{pmatrix} t_{p,1} & t_{p,2} & \cdots & t_{2,1} & t_{1,1} & \\ t_{p,2} & t_{p-1,2} & \cdots & t_{2,2} & 0 & \\ \vdots & \vdots & & 0 & \vdots & \mathbf{0}_{p\times(n-p)} \\ t_{p,p-1} & t_{p-1,p-1} & & & \vdots & \\ t_{p,p} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \end{pmatrix}_{p\times n}$$

(3.9) $$=: \left(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2,\ \cdots,\ \mathbf{x}'_{p-1}\ \mathbf{x}'_p\right)' = \mathbf{X}_{p\times n}$$

と表せる。ここで $\mathbf{0}_{(n-p)\times p}$ は全要素が0からなる大きさ $(n-p)\times p$ の行列を表す。同様に

(3.10) $$(\mathbf{u}_p, \mathbf{u}_{p-1}, \mathbf{u}_{p-2}, \cdots, \mathbf{u}_1)_{n\times p}\mathbf{T}_{p\times p} = \begin{pmatrix} t_{p,1} & t_{p,2} & \cdots & t_{p,p-1} & t_{p,p} \\ t_{p-1,1} & t_{p-1,2} & \cdots & t_{p-1,p-1} & 0 \\ \vdots & \vdots & & 0 & \vdots \\ t_{2,1} & t_{2,2} & & & \vdots \\ t_{1,1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ & & \mathbf{0}_{(n-p)\times p} & & \end{pmatrix}_{n\times p}$$

(3.11) $$:= (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_{p-1}, \mathbf{x}_p)_{n\times p} = \mathbf{X}'_{n\times p}$$

と表せる。よって、

(3.12) $$\begin{cases} \mathbf{x}_p = \begin{pmatrix} t_{p,p}, & 0, & \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots, & 0 \end{pmatrix}' = t_{p,p}\mathbf{u}_1 \\ \mathbf{x}_{p-1} = \begin{pmatrix} t_{p,p-1}, & t_{p-1,p-1}, & 0, & \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots, & 0 \end{pmatrix}' = \sum_{k=p-1}^{p} t_{k,p-1}\mathbf{u}_{p-k+1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} t_{p,2}, & t_{p-1,2}, & \cdots, & t_{2,2}, & 0, & \cdots, & \cdots, & 0 \end{pmatrix}' = \sum_{k=2}^{p} t_{k,2}\mathbf{u}_{p-k+1} \\ \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} t_{p,1}, & t_{p-1,1}, & \cdots, & t_{2,1}, & t_{1,1}, & 0, & \cdots, & 0 \end{pmatrix}' = \sum_{k=1}^{p} t_{k,1}\mathbf{u}_{p-k+1} \end{cases}$$

と記述できる。すなわち、 p 個の線形独立な n 次元ベクトルからなる組 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_p\}$ が、互いに直行するベクトルの組 $\{\mathbf{u}_p, \mathbf{u}_{p-1}, \cdots, \mathbf{u}_1\}$ で作ることが可能である。換言すれば、上記方程式系はGarm-Schmidtの直行化プロセスの特別な場合に相当する。その場合の諸変換係数は補題2.1の遡及Ｃｈｏｌｅｓｋｙ分解における下三角行列 $\mathbf{T}_{p\times p}$ の要素 $t_{i,j}(i \geq j), (i,j = 1, \cdots, p)$ によって与えられる。

なお、補題から、 $\mathbf{A} = (a_{i,j})_{p\times p} = \mathbf{T}'\mathbf{T}$ において、 $\mathbf{T}_{p\times p}$ の要素は

(3.14) $$\begin{cases} t_{p,p} = a_{p,p}^{1/2} \\ t_{i,i} = (a_{i,i} - \sum_{k=i+1}^{p} t_{k,i}^2)^{1/2}, \ (1 \leq i \leq p-1) \\ t_{p,i} = a_{p,i}t_{p,p}^{-1}, \ (1 \leq i \leq p-1) \end{cases}$$

および

(3.15) $$\begin{cases} t_{i,j} = (a_{i,j} - \sum_{k=i+1}^{p} t_{k,i}t_{k,j})t_{i,i}^{-1}, \ (1 \leq j < i \leq p-1), \\ t_{i,j} = 0, \ \ (1 \leq i < j \leq p) \end{cases}$$

である。

さて、(3.1) の設定の下、(3.8)～(3.12) に注意し、所要のWishart分布の密度関数を誘導する。$\|\mathbf{x}_i\|, (i = 1, \cdots, p)$ をベクトル $\mathbf{x}_i$ のEuclidノルムとする。上記 $\mathbf{u}_i$ の部分ベクトル

(3.16) $$\mathbf{e}_i = \left(\underbrace{0, \cdots, 0}_{i-1}, 1, \underbrace{0, \cdots, 0}_{p-i}\right)', \quad (i = 1, \cdots, p)$$

を考える。 $P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_{p-1}$ を線形部分空間 $\mathcal{L}(\mathbf{e}_2)$ に沿った、 $\mathcal{L}(\mathbf{e}_1)$ 上への正射影ベクトルとし、 $\{P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_{p-1}\}$ をその符号付長さとする。また、 $\|P_{\mathcal{L}(\mathbf{e}_1)^\perp}\mathbf{x}_{p-1}\|$ は線形部分空間 $\mathcal{L}(\mathbf{e}_1)$

の直行補空間上への正射影ベクトルのノルムを表す。以下で、その他の類似の量も同様な内容を表すものとする。この時、行列 $\mathbf{T}$ の各要素は、次の表現と密度関数が従う：

$$
\begin{aligned}
t_{p,p} &= a_{p,p}^{1/2} = \|\mathbf{x}_p\| = \left(x_{p,1}^2 + x_{p,2}^2 + \cdots + x_{p,n}^2\right)^{1/2} \sim \chi(n), \left(\text{自由度}n\text{の}\chi\text{分布}\right),\\
t_{p,p-1} &= \left\{P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_{p-1}\right\} \sim \varphi(0,1), \left(\text{標準正規分布}\right),\\
&\ \vdots\\
t_{p,2} &= \left\{P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_2\right\} \sim \varphi(0,1),\\
t_{p,1} &= \left\{P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_1\right\} \sim \varphi(0,1),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
t_{p-1,p-1} &= \left(\|\mathbf{x}_{p-1}\|^2 - \|P_{\mathbf{e}_1}\mathbf{x}_{p-1}\|^2\right)^{1/2} = \|P_{\mathcal{L}(\mathbf{e}_1)^\perp}\mathbf{x}_{p-1}\| \sim \chi(n-1),\\
&\ \vdots\\
t_{p-1,2} &= \left\{P_{\mathbf{e}_2}\mathbf{x}_2\right\} \sim \varphi(0,1),\\
t_{p-1,1} &= \left\{P_{\mathbf{e}_2}\mathbf{x}_1\right\} \sim \varphi(0,1),\\
&\ \vdots\\
t_{2,2} &= \left(\|\mathbf{x}_2\|^2 - \textstyle\sum_{i=1}^{p-2}\|P_{\mathbf{e}_i}\mathbf{x}_2\|^2\right)^{1/2} = \left\|P_{\mathcal{L}(\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{p-2})^\perp}\mathbf{x}_2\right\| \sim \chi\left(n-\overline{p-2}\right),\\
t_{2,1} &= \left\{P_{\mathbf{e}_{p-1}}\mathbf{x}_1\right\} \sim \varphi(0,1),\\
t_{1,1} &= \left(\|\mathbf{x}_1\|^2 - \textstyle\sum_{i=1}^{p-1}\|P_{\mathbf{e}_i}\mathbf{x}_1\|^2\right)^{1/2} = \left\|P_{\mathcal{L}(\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{p-1})^\perp}\mathbf{x}_1\right\| \sim \chi\left(n-\overline{p-1}\right).
\end{aligned}
$$

以上の分析に基づき、下三角ランダム行列 $\mathbf{T}$ の密度関数 $g(\mathbf{T})$ を導く。その際、 $\mathbf{T}_{p\times p}$ の*triangular elements*を積上げ（*stack*）して、ベクトル化を遡及的（*retrospectively*）に行うことにより得られる、次の長さ $p(p+1)/2$ のランダムベクトル

（3.17） $|\mathrm{trs}_r\mathbf{T}\rangle = (t_{p,p}, t_{p,p-1}, t_{p-1,p-1}, \cdots, t_{p,2}, t_{p-1,2}, \cdots, t_{2,2}, t_{p,1}, t_{p-1,1}, \cdots, t_{2,1}, t_{1,1})'$

の密度関数を誘導する。

（3.18）
$$
\begin{aligned}
g(\mathbf{T}) &:= g(|\mathrm{trs}_r\mathbf{T}\rangle)\\
&= g(t_{p,p}, t_{p,p-1}, t_{p-1,p-1}, \cdots, t_{p,2}, t_{p-1,2}, \cdots, t_{2,2}, t_{p,1}, t_{p-1,1}, \cdots, t_{2,1}, t_{1,1})
\end{aligned}
$$

と表記すると、条件付確率の連鎖法則により

$$
\begin{aligned}
&= g_p^*(t_{p,p}) \cdot g_{p-1}^*(t_{p,p-1}, t_{p-1,p-1}|t_{p,p}) \cdot g_{p-2}^*(t_{p,p-2}, t_{p-1,p-2}, t_{p-2,p-2}|t_{p,p}, t_{p,p-1}, t_{p-1,p-1})\\
&\quad \cdot \cdots \cdot g_1^*(t_{p,1}, t_{p-1,1}, t_{p-2,1}\cdots, t_{2,1}, t_{1,1}|t_{p,p}, t_{p,p-1}, t_{p-1,p-1}, \cdots, t_{2,2})
\end{aligned}
$$

と表せる。よって、

$$
\begin{aligned}
&= \chi(n) \cdot \varphi(t_{p,p-1})\chi(n-1) \cdot \varphi(t_{p,p-2})\varphi(t_{p-1,p-2})\chi(n-2)\\
&\quad \cdot \cdots \cdot \varphi(t_{p,1})\varphi(t_{p-1,1})\varphi(t_{p-2,1})\cdots\varphi(t_{2,1})\chi\left(n-\overline{p-1}\right)\\
&= \chi(n)\chi(n-1)\cdots\chi\left(n-\overline{p-1}\right)\\
&\quad \cdot \varphi(t_{p,p-1})\varphi(t_{p,p-2})\varphi(t_{p-1,p-2})\cdots\varphi(t_{p,1})\varphi(t_{p-1,1})\varphi(t_{p-2,1})\cdots\varphi(t_{2,1})\\
&= \frac{t_{p,p}^{n-1}e^{-t_{p,p}^2/2}}{2^{\frac{n}{2}-1}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \cdot \frac{t_{p-1,p-1}^{n-2}e^{-t_{p-1,p-1}^2/2}}{2^{\frac{n-1}{2}-1}\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \cdot \cdots \cdot \frac{t_{1,1}^{n-\overline{p-1}}e^{-t_{1,1}^2/2}}{2^{\frac{n-\overline{p-1}}{2}-1}\Gamma\left(\frac{n-\overline{p-1}}{2}\right)}\\
&\quad \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^{\frac{p(p-1)}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\textstyle\sum_{i\geq j}^{p} t_{i,j}^2\right),\ (n \geq p).
\end{aligned}
$$

故に、

$$g(\mathbf{T}) = \frac{1}{2^{\frac{np}{2}-p}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)} \prod_{i=1}^{p} t_{i,i}^{n+i-p-1} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i\geq j}^{p} t_{i,j}^2\right),\ (n \geq p), \tag{3.19}$$

ここで、

$$\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right) = \pi^{\frac{p(p-1)}{4}} \prod_{r=1}^{p} \Gamma\left(\frac{n-\overline{r-1}}{2}\right),\ (n \geq p). \tag{3.20}$$

と置いた。これは（3.4）で定義した多変量ガンマ関数に他ならない。

ところで、前章の考察により、$t_{i,i} = \sqrt{\left|\underline{\mathbf{A}}_{p+1-i}\right| / \left|\underline{\mathbf{A}}_{p-i}\right|} = \left|\underline{\mathbf{T}}_{p+1-i}\right| / \left|\underline{\mathbf{T}}_{p-i}\right|$ であるから

$$t_{p,p}^{n-1} t_{p-1,p-1}^{n-2} t_{p-2,p-2}^{n-3} \cdot \cdots \cdot t_{1,1}^{n-p} = |\underline{\mathbf{T}}_1||\underline{\mathbf{T}}_2| \cdots \left|\underline{\mathbf{T}}_{p-1}\right| |\mathbf{T}|^{n-p}.$$

また、$\sum_{i\geq j}^{p} t_{i,j}^2 = tr\left(\mathbf{T}'\mathbf{T}\right)$ であるから、$g(\mathbf{T})$ はまた次のように表せる：

$$g(\mathbf{T}) = \frac{1}{2^{\frac{np}{2}-p}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)} |\underline{\mathbf{T}}_1||\underline{\mathbf{T}}_2| \cdots \left|\underline{\mathbf{T}}_{p-1}\right| |\mathbf{T}|^{n-p} etr\left(-\frac{1}{2}\mathbf{T}'\mathbf{T}\right),\ (n \geq p), \tag{3.21}$$

$$t_{i,i} > 0, (i = 1, \cdots, p).$$

次に、$g(\mathbf{T})$ を利用して、$\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T}$ の密度関数 $f(\mathbf{A})$ を求める。

$$f(\mathbf{A}) := f(|\mathrm{trs}_r \mathbf{A}\rangle) = g(|\mathrm{trs}_r \mathbf{T}'(\mathbf{A})\rangle) \cdot |J_r(\mathbf{T}' \to \mathbf{A})| \tag{3.22}$$

である。$\langle \mathrm{trs}_r \mathbf{A}| = \left(a_{p,p}, a_{p,p-1}, a_{p-1,p-1}, \cdots, a_{p,2}, a_{p-1,2}, \cdots, a_{2,2}, a_{p,1}, a_{p-1,1} \cdots, a_{2,1}, a_{1,1}\right)$ と記すと、変換のJacobianは

$$\begin{aligned} |J_r(\mathbf{T}' \to \mathbf{A})| &= |J_r(\mathbf{A} \to \mathbf{T}')|^{-1} = \left|\frac{\partial}{\partial|\mathrm{trs}_r \mathbf{T}'\rangle}\langle \mathrm{trs}_r \mathbf{A}|\right|^{-1} \\ &= \left(2^p t_{p,p}^{p} t_{p-1,p-1}^{p-1} \cdots t_{2,2}^{2} t_{1,1}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{3.23}$$

となる。よって、$t_{i,i} > 0, (i = 1, \cdots, p)$ に対し、

$$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{2^{\frac{np}{2}}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\prod_{i=1}^{p} t_{i,i}\right)^{n-p-1} etr\left(-\frac{1}{2}\mathbf{T}'\mathbf{T}\right), (n \geq p). \tag{3.24}$$

遡及Cholesky分解により、$\mathbf{T}'\mathbf{T} = \mathbf{A},\ \prod_{i=1}^{p} t_{i,i} = |\mathbf{A}|^{1/2}$ であったから、結局

$$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{2^{\frac{np}{2}}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)} |\mathbf{A}|^{(n-p-1)/2} etr\left(-\frac{1}{2}\mathbf{A}\right), (n \geq p), (\mathbf{A} > 0) \tag{3.25}$$

と求まる。これは所要の標準Wishart分布の密度関数である。

上記の結果を利用して、一般のWishart分布の密度関数の表現を誘導する。
$\mathbf{y}_i (i = 1, \cdots, n) \sim i.i.d. N_p(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_{p\times p}) (p \leq n)$ とし、この n 個の独立なランダム列ベクトルからなる行列を $\mathbf{Y}_{p\times n} := (\mathbf{y}_1, \cdots, \mathbf{y}_n)$ と記す。この時、ランダム行列

$$\mathbf{W}_{p\times p} := \mathbf{Y}_{p\times n} \mathbf{Y}'_{p\times n} = (\mathbf{y}_1, \cdots, \mathbf{y}_n) \begin{pmatrix} \mathbf{y}'_1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}'_n \end{pmatrix} \tag{3.26}$$

の密度関数 $h(\mathbf{W})$ を求める。$\mathbf{\Sigma} > 0$ だから、遡及Cholesky分解により、対角要素が全て

正の下三角行列 $\mathbf{C}$ が存在し、 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}'\mathbf{C}$ と表現できる。故に、 $\mathbf{C}^{-1\prime}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{I}_p$ となる。そこで、$\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{y}_i =: \mathbf{z}_i, (i = 1,\cdots,p)$ と置くと、$\mathbf{z}_i \sim i.i.d. N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I}_p), (i = 1,\cdots,p)$ であり、

$$\begin{aligned}\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{W}\mathbf{C}^{-1} &= \mathbf{C}^{-1\prime}(\textstyle\sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i\mathbf{y}_i')\mathbf{C}^{-1} = \textstyle\sum_{i=1}^n \left(\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{y}_i\right)\left(\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{y}_i\right)' = \\ &= \textstyle\sum_{i=1}^n \mathbf{z}_i\mathbf{z}_i' = \mathbf{A} \sim W_p(n, \mathbf{I}_p)\end{aligned}$$

となる。したがって、$\mathbf{W}$ の密度関数は、$\mathbf{A}$ の密度関数 $f(\mathbf{A})$ に基づいて、

(3.27) $$h(\mathbf{W}) = f(\mathbf{A})\,|J_r(\mathbf{A} \to \mathbf{W})|$$

となる。すなわち、

(3.28) $$h(|\mathrm{trs}_r\mathbf{W}\rangle) = f(|\mathrm{trs}_r\mathbf{A}\rangle)\,|J_r(\mathbf{A} \to \mathbf{W})|$$

である。 $\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{W}\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{A}$ および $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}'\mathbf{C}$ に注意すると、

(3.29) $$|J_r(\mathbf{A} \to \mathbf{W})| = \left|\frac{\partial}{\partial|\mathrm{trs}_r\mathbf{W}\rangle}\langle\mathrm{trs}_r\mathbf{A}|\right| = \left|\mathbf{C}^{-1\prime}\right|^{p+1} = |\mathbf{C}|^{-(p+1)} = |\boldsymbol{\Sigma}|^{-(p+1)/2},$$

$$|\mathbf{A}| = \left|\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{W}\mathbf{C}^{-1}\right| = |\mathbf{C}|^{-2}|\mathbf{W}| = |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1}|\mathbf{W}|,$$

$$tr\mathbf{A} = tr\left(\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{W}\mathbf{C}^{-1}\right) = tr\left(\mathbf{W}\mathbf{C}^{-1\prime}\mathbf{C}^{-1}\right) = tr\left(\mathbf{W}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right)$$

となるから、結局、一般の場合のWishart分布の密度関数が次のように求まる：

(3.30) $$h(\mathbf{W}) = \frac{1}{2^{\frac{np}{2}}\Gamma_p\left(\frac{n}{2}\right)|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}|\mathbf{W}|^{(n-p-1)/2}etr\left(-\frac{1}{2}\mathbf{W}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right),\ (\mathbf{W} > 0).$$

注 3.1. 本章での $g(\mathbf{T})$、$f(\mathbf{A})$ および $h(\mathbf{W})$ の形および誘導過程から、それらは表2.1の通常のCholesk分解でも導出可能である。Anderson（1984，2003）はそのような線での誘導とも見れるが、本稿で試みた説明に比べ、難解に思える。

注 3.2. (3.19)、(3.21) は遡及Cholesky分解による下三角行列 $\mathbf{T}$ の密度関数である。これに対して、通常のCholesky分解による上三角行列の密度関数は若干異なる形を持つ。一変量の場合で言えば、カイ分布が二種類の表現を持つとも言える。しかし、最終的な $f(\mathbf{A})$ および $h(\mathbf{W})$ はどちらの分解でも一致する（*cf.* Anderson（1984））。

4．あとがき

多変量データ分析の理論的基盤にある多変量解析を学ぶ際、初心者を悩ますことの一つとして、基本的な多変量分布を確認・誘導することにあると思われる。もちろんそのようなことを気にせず、標準的なソフトウェアーを用いて形式的にデータ解析を行うことも可能である。しかしより深く多変量分布の理論面を知りたいと言う人たちにとって、基本的な多変量分布の誘導は一度は経験しておくことが望ましいと思われる。そのような場合に、本稿で述べた遡及的なCholesky分解は、これまでの筆者の経験から、多変量解析の基礎分野においてかなり有効であると実感してきた。実際、かなりの多変量分布の導出に際し、ベクトル化ルを遡及的に行うことの有用さを見てきた。そこで、本稿では、通常のCholesky分解に立ち返らず、はじめから独立して遡及Cholesky分解を提案し整理しておくことに意義があると考え、補題２．１としてまとめた。その応用として、

Whishart分布の導出に有効なことを第３章で見た。紙数の都合で割愛せざるを得なかったが、本稿の遡及Cholesky分解は、他の代表的な多変量分布、例えば、Hottelingの T^2 統計量の分布や、Wilksの Λ 統計量の分布誘導に対して役立つことを示せる。 これらのことや遡及Cholesky分解に関連する数値計算プログラムの作成については、稿を改めて議論することとしたい。

参考文献

Anderson, T. W.（1958）. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, Wiley, New York.

Anderson, T. W.（1984）. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, 2nd ed. John Wiley and Sons, Inc., New York.

Anderson, T. W.（2003）. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, 3rd ed. John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.

Huberty, C. J.（1994）. *Applied Discriminant Analysis*, John Wiley and Sons, Inc., New York.

松縄　規（2007）. 小標本での適合度統計量の提案とその数理的考察　Ⅱ. ―累積分布関数の近似―, *共創福祉*　2, No.1, 33-47.

Muirhead, R. J.（1982）. *Aspects of Multivariate Statistical Analysis*, John Wiley and Sons, Inc., New York.

Rencher, A. C.（1995）. *Methods of Multivariate Analysis*, John Wiley and Sons, Inc., New York.

斎藤正彦（1966）. *線型代数学入門*、東京大学出版会.

Wilks, S. S.（1962）. *Mathematical Statistics*, Wiley, New York.

Wishart, J.（1928）. The generalized product moment distribution in samples from a normal multivariate distribution, *Biometrika*, 20A, 32-52.

（平成19年９月18日受付、平成19年10月29日受理）