正定値対称確率行列の分布と変数変換

$X=(x_{ij})$ を p 次対称行列や, $T=(t_{ij})$ を下三角行列に対して, 下三角部分の成分を並べた $p(p+1)/2$ 次行ベクトルを $\boldsymbol{\ell}(X), \boldsymbol{\ell}(T)$ と表す.

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\ell}(X) &= (x_{11}, x_{21}, x_{22}, x_{31}, x_{32}, x_{33}, \ldots, x_{pp})\\ \boldsymbol{\ell}(T) &= (t_{11}, t_{21}, t_{22}, t_{31}, t_{32}, t_{33}, \ldots, t_{pp})\end{aligned}$$

対称行列 X や 下三角行列 T の実数値関数 $f(X)$, $g(T)$ を それぞれ, $\boldsymbol{\ell}(X)$, $\boldsymbol{\ell}(T)$ の関数とみなし,$\mathcal{D}$ を $\mathbb{R}^{p(p+1)/2}$ の領域に対して, $\mathcal{D}$ 上の $f(X)$ や $g(T)$ の積分を

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{D}} f(X)(dX) &= \int_{\mathcal{D}} f(x_{11}, x_{21}, \ldots, x_{pp}) dx_{11} d_{x21} dx_{22} \cdots dx_{pp}\\ \int_{\mathcal{D}} g(T)(dT) &= \int_{\mathcal{D}} g(t_{11}, t_{21}, \ldots, t_{pp}) dt_{11} dt_{21} dt_{22} \cdots dt_{pp}\end{aligned}$$

と表す. また $\int_{X>0} f(X)(dX)$ は, X が正定値対称行列となるような $\boldsymbol{\ell}(X)$ の領域全体での積分を表すとする. 例えば, $p=3$ のとき

$$\int_{X>0} f(X)(dX) = \int_{\{(x_{11}, x_{21}, x_{22});\, x_{11}x_{22} - x_{12}^2 > 0\}} f(x_{11}, x_{21}, x_{22}) dx_{11} dx_{21} dx_{22}$$

となる.

$\boldsymbol{y} = (y_1, \ldots, y_m)$ の各成分が $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ の関数であるとき,

$$J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{y}) := \frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}'} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_1}\\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_2}\\ \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial y_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n}\end{pmatrix}$$

を表すとする.

Theorem 0.1 X を p 次正定値対称行列, T を対角成分がすべて正の p 次下三角行列とし, $Y = TXT'$ と変換する. このとき

$$\int_{Y>0} f(Y)(dY) = |T|^{p+1} \int_{X>0} f(TXT')(dX)$$

が成り立つ.

Proof "$X>0$" と "$Y>0$" は 1 対 1 対応であるので, $J(\boldsymbol{\ell}(X) \to \boldsymbol{\ell}(Y)) = |T|^{p+1}$ であることを示せばよい.

p に関する帰納法で証明する. $p=1$ のとき, $y_1 = x_1 t_1^2$ より $J(x_1 \to y_1) = t_1^2$ となり, 主張は正しい.

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & \boldsymbol{x}_2\\ \boldsymbol{x}_2' & x_{pp}\end{pmatrix},\ Y = \begin{pmatrix} Y_{11} & \boldsymbol{y}_2\\ \boldsymbol{y}_2' & y_{pp}\end{pmatrix},\ T = \begin{pmatrix} T_{11} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{t}_2' & t_{pp}\end{pmatrix}$$

と分割する．ただし，X_{11}, Y_{11}, T_{11} は $p-1$ 次正方行列，$\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y}_2, \boldsymbol{t}_2$ は $p-1$ 次列ベクトル，x_{pp}, y_{pp}, t_{pp} はスカラーである．

$$\begin{aligned}
&Y_{11} = T_{11}X_{11}T_{11}',\ \boldsymbol{y}_2' = \boldsymbol{t}_2'X_{11}T_{11}' + t_{pp}\boldsymbol{x}_2'T_{11}',\\
&y_{pp} = \boldsymbol{t}_2'X_{11}\boldsymbol{t}_2 + \boldsymbol{t}_2'\boldsymbol{x}_2 t_{pp} + t_{pp}\boldsymbol{x}_2\boldsymbol{t}_2 + t_{pp}x_{pp}t_{pp},\\
&\boldsymbol{\ell}(Y) = (\boldsymbol{\ell}(Y_{11}), \boldsymbol{y}_2', y_{pp}), \boldsymbol{\ell}(X) = (\boldsymbol{\ell}(X_{11}), \boldsymbol{x}_2', x_{pp})
\end{aligned}$$

であるから，

$$\begin{aligned}
J(\boldsymbol{\ell}(X) \to \boldsymbol{\ell}(Y)) &= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{y}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to y_{pp}) \\ J(\boldsymbol{x}_2 \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11})) & J(\boldsymbol{x}_2 \to \boldsymbol{y}_2') & J(\boldsymbol{x}_2 \to y_{pp}) \\ J(x_{pp} \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11})) & J(x_{pp} \to \boldsymbol{y}_2') & J(x_{pp} \to y_{pp}) \end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{y}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to y_{pp}) \\ \frac{\partial \boldsymbol{\ell}(Y_{11})}{\partial \boldsymbol{x}_2} & \frac{\partial \boldsymbol{y}_2'}{\partial \boldsymbol{x}_2} & J(\boldsymbol{x}_2 \to y_{pp}) \\ \frac{\partial \boldsymbol{\ell}(Y_{11})}{\partial x_{pp}} & \frac{\partial \boldsymbol{y}_2'}{\partial x_{pp}} & \frac{\partial y_{pp}}{\partial x_{pp}} \end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{y}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to y_{pp}) \\ O & t_{pp}T_{11}' & J(\boldsymbol{x}_2 \to y_{pp}) \\ \mathbf{0}' & \mathbf{0}' & t_{pp}^2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

したがって，

$$\begin{aligned}
|J(\boldsymbol{\ell}(X) \to \boldsymbol{\ell}(Y))| &= |J(\boldsymbol{\ell}(X_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(Y_{11}))| \cdot |T_{11}| t_{pp}^{p-1} t_{pp}^2\\
&= \prod_{j=1}^{p-1} t_{jj}^{p+1} t_{pp}^{p+1} = |T|^{p+1}
\end{aligned}$$

Theorem 0.2 X を p 次正定値対称行列とし，$X = TT'$ と変換する．ただし，T は対角成分が正の下三角行列である．このとき，$\mathcal{T} = \{\boldsymbol{\ell}(T);\ t_{jj} > 0\ (j = 1, \ldots, p), t_{ij} \in \mathbb{R}\ (i > j)\}$ とすると

$$\int_{X>0} f(X)(dX) = 2^p \int_{\mathcal{T}} f(TT') \prod_{j=1}^{p} t_{jj}^{p-j+1} (dT)$$

が成り立つ．

Proof “$X > 0$” と $\mathcal{T}$ は 1 対 1 対応であるので，$J(\boldsymbol{\ell}(T) \to \boldsymbol{\ell}(X)) = 2^p \prod_{j=1}^{p} t_{jj}^{p-j+1}$ であることを示せばよい．

p に関する帰納法で証明する．$p = 1$ のとき，$x_1 = t_{11}^2$ より $J(t_{11} \to x_1) = 2t_{11}$ となり，主張は正しい．

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & \boldsymbol{x}_2 \\ \boldsymbol{x}_2' & x_{pp} \end{pmatrix},\ T = \begin{pmatrix} T_{11} & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{t}_2' & t_{pp} \end{pmatrix}$$

と分割する．ただし，X_{11}, T_{11} は $p-1$ 次正方行列，$\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{t}_2$ は $p-1$ 次列ベクトル，x_{pp}, t_{pp} はスカラーである．

$$
\begin{aligned}
&X_{11} = T_{11}T_{11}',\ \boldsymbol{x}_2' = \boldsymbol{t}_2'T_{11}',\ x_{pp} = \boldsymbol{t}_2'\boldsymbol{t}_2 + t_{pp}^2 \\
&\boldsymbol{\ell}(X) = (\boldsymbol{\ell}(X_{11}), \boldsymbol{x}_2', x_{pp}),\ \boldsymbol{\ell}(T) = (\boldsymbol{\ell}(T_{11}), \boldsymbol{t}_2', t_{pp}),
\end{aligned}
$$

であるから，

$$
\begin{aligned}
J(\boldsymbol{\ell}(T) \to \boldsymbol{\ell}(X)) &= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(X_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{x}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to x_{pp}) \\ J(\boldsymbol{t}_2 \to \boldsymbol{\ell}(X_{11})) & J(\boldsymbol{t}_2 \to \boldsymbol{x}_2') & J(\boldsymbol{t}_2 \to x_{pp}) \\ J(t_{pp} \to \boldsymbol{\ell}(X_{11})) & J(t_{pp} \to \boldsymbol{x}_2') & J(t_{pp} \to x_{pp}) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(X_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{x}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to x_{pp}) \\ \frac{\partial \boldsymbol{\ell}(X_{11})}{\partial \boldsymbol{t}_2} & \frac{\partial \boldsymbol{x}_2'}{\partial \boldsymbol{t}_2} & J(\boldsymbol{t}_2 \to x_{pp}) \\ \frac{\partial \boldsymbol{\ell}(X_{11})}{\partial t_{pp}} & \frac{\partial \boldsymbol{X}_2'}{\partial t_{pp}} & \frac{\partial x_{pp}}{\partial t_{pp}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(X_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{x}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to x_{pp}) \\ O & T_{11}' & J(\boldsymbol{t}_2 \to x_{pp}) \\ \mathbf{0}' & \mathbf{0}' & 2t_{pp} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

したがって，

$$
\begin{aligned}
|J(\boldsymbol{\ell}(T) \to \boldsymbol{\ell}(X))| &= |J(\boldsymbol{\ell}(T_{11}) \to \boldsymbol{\ell}(X_{11}))| \cdot |T_{11}| \cdot (2t_{pp}) \\
&= 2^{p-1} \prod_{j=1}^{p-1} t_{jj}^{(p-1-j+1)} \cdot \prod_{j=1}^{p-1} t_{jj} \cdot (2t_{pp}) \\
&= 2^p \prod_{j=1}^{p-1} t_{jj}^{(p-j+1)} \cdot t_{pp} = 2^p \prod_{j=1}^{p} t_{jj}^{(p-j+1)}
\end{aligned}
$$

$S = (s_{ij})$ を対角成分が正の p 次上三角行列とし，$\tilde{\boldsymbol{\ell}}(S) = (s_{11}, s_{12}, \ldots, s_{pp})$ とし，

$$
\int_{\mathcal{D}} g(S)(dS) = \int_{\mathcal{D}} g(s_{11}, s_{12}, \ldots, s_{pp}) ds_{11} ds_{12} \cdots ds_{1p} ds_{22} \cdots ds_{2p} \cdots ds_{pp}
$$

と定める．

Corollary 0.3 X を p 次正定値対称行列とする．変換 $X = SS'$ に対して

$$
|J(\tilde{\boldsymbol{\ell}}(S) \to \boldsymbol{\ell}(X))| = 2^p \prod_{j=1}^{p} s_{jj}^{j}
$$

が成り立つ．

Theorem 0.4 T を対角成分が正の p 次下三角行列とし，$S = T^{-1}$ と変換する．このとき，

$$
|J(\boldsymbol{\ell}(T) \to \boldsymbol{\ell}(S))| = (-1)^{p(p+1)/2} |T|^{-(p+1)}
$$

Proof $p=1$ のときは, $ds_{11}/dt_{11}=-t_{11}^{-2}$ より成立.

$$S=\begin{pmatrix} S_{11} & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{s}_2' & s_{pp} \end{pmatrix},\ T=\begin{pmatrix} T_{11} & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{t}_2' & t_{pp} \end{pmatrix}$$

と分割する. ただし, S_{11}, T_{11} は $p-1$ 次正方行列, $\boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{t}_2$ は $p-1$ 次列ベクトル, s_{pp}, t_{pp} はスカラーである.

$$\begin{aligned}
&S_{11}=T_{11}^{-1},\ s_{pp}=t_{pp}^{-1} \\
&\boldsymbol{s}_2'T_{11}+s_{pp}\boldsymbol{t}_2'=\mathbf{0} \text{ より } \boldsymbol{s}_2'=-t_{pp}^{-1}\boldsymbol{t}_2'T_{11}^{-1} \\
&\boldsymbol{\ell}(S)=(\boldsymbol{\ell}(S_{11}),\boldsymbol{s}_2',s_{pp}),\ \boldsymbol{\ell}(T)=(\boldsymbol{\ell}(T_{11}),\boldsymbol{t}_2',t_{pp}),
\end{aligned}$$

であるから,

$$\begin{aligned}
J(\boldsymbol{\ell}(T)\to\boldsymbol{\ell}(S)) &= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{\ell}(S_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{s}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to s_{pp}) \\ J(\boldsymbol{t}_2\to\boldsymbol{\ell}(S_{11})) & J(\boldsymbol{t}_2\to\boldsymbol{s}_2') & J(\boldsymbol{t}_2\to s_{pp}) \\ J(t_{pp}\to\boldsymbol{\ell}(S_{11})) & J(t_{pp}\to\boldsymbol{s}_2') & J(t_{pp}\to s_{pp}) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{\ell}(S_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{s}_2') & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to s_{pp}) \\ \frac{\partial\boldsymbol{\ell}(S_{11})}{\partial\boldsymbol{t}_2} & \frac{\partial\boldsymbol{s}_2'}{\partial\boldsymbol{t}_2} & J(\boldsymbol{t}_2\to s_{pp}) \\ \frac{\partial\boldsymbol{\ell}(S_{11})}{\partial t_{pp}} & \frac{\partial\boldsymbol{s}_2'}{\partial t_{pp}} & \frac{\partial s_{pp}}{\partial t_{pp}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{\ell}(S_{11})) & J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{s}_2') & \mathbf{0} \\ O & -t_{pp}^{-1}T_{11}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & t_{pp}^{-2}\boldsymbol{t}_2'T_{11} & -t_{pp}^{-2} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

したがって,

$$\begin{aligned}
|J(\boldsymbol{\ell}(T)\to\boldsymbol{\ell}(S))| &= |J(\boldsymbol{\ell}(T_{11})\to\boldsymbol{\ell}(S_{11}))|\cdot(-t_{pp})^{-(p-1)}|T_{11}|^{-1}\cdot(-t_{pp}^{-2}) \\
&= (-1)^{p(p-1)/2}|T_{11}|^{-p}(-1)^p|T_{11}|^{-1}t_{pp}^{-(p+1)} = (-1)^{p(p+1)/2}|T|^{-(p+1)}
\end{aligned}$$

Theorem 0.5 X を p 次正定値対称行列とし, $Y=X^{-1}$ と変換する.

Proof 対角成分が正の下三角行列 T を用いて $X=TT'$ と表すと, $Y=(T')^{-1}T^{-1}$ チェインルールより

$$\begin{aligned}
J(\boldsymbol{\ell}(T)\to\boldsymbol{\ell}(Y)) &= J(\boldsymbol{\ell}(T)\to\boldsymbol{\ell}(X))J(\boldsymbol{\ell}(X)\to\boldsymbol{\ell}(Y)) \\
&= J(\boldsymbol{\ell}(T)\to\tilde{\boldsymbol{\ell}}(T'))J(\tilde{\boldsymbol{\ell}}(T')\to\tilde{\boldsymbol{\ell}}((T')^{-1}))J(\tilde{\boldsymbol{\ell}}((T')^{-1})\to\boldsymbol{\ell}(Y))
\end{aligned}$$

より

$$2^p\prod_{j=1}^{p}t_{jj}^{p-j+1}|J(\boldsymbol{\ell}(X)\to\boldsymbol{\ell}(Y))| = (-1)^{p(p+1)/2}|T'|^{-(p+1)}2^p\prod_{j=1}^{p}t_{jj}^{-j},$$

$$\therefore\ |J(\boldsymbol{\ell}(X) \to \boldsymbol{\ell}(Y))| = (-1)^{p(p+1)/2}|TT'|^{-(p+1)} = (-1)^{p(p+1)/2}|X|^{-(p+1)}$$

V を p 次正定値対称な確率行列とする. V を $\mathbb{R}^{p(p+1)/2}$ 次元確率ベクトル $\boldsymbol{\ell}(V)$ と同一視し, V の確率密度関数 $f(V)$ は, $\boldsymbol{\ell}(V) \in \mathbb{R}^{p(p+1)/2}$ の関数と考える.

Theorem 0.6 正定値対称な $p \times p$ 確率行列 V の確率密度関数を $f(V)$ とする. T を対角成分が正の下三角 *(*定数*)* 行列とし, $W = TVT'$ と変換すると W の確率密度関数は

$$|T|^{-(p+1)}f(T^{-1}W(T')^{-1})\ (W > 0)$$

となる.

Theorem 0.7 正定値対称な $p \times p$ 確率行列 V の確率密度関数を $f(V)$ とする. T を対角成分が正の下三角確率行列とし $V = TT'$ であるならば, T の確率密度関数は

$$2^p \prod_{j=1}^{p} t_{jj}^{p-j+1} f(TT')\ (T \in \mathcal{T})$$

によって与えられる.

Theorem 0.8 正定値対称な $p \times p$ 確率行列 V の確率密度関数を $f(V)$ とする. $W = V^{-1}$ と変換すると W の確率密度関数は

$$|W|^{-(p+1)}f(W^{-1})\ (W > 0)$$

となる.