数理解析研究所講究録
第44巻1968年1-8

多変量解析において用いられる
ヤコビアンについて

東京理科大　津村善郎

§1.　多変量解析では各種の変換を用い，これに対応する Jacobian が必要となる．これまでにも種々の Jacobian がえられているが，多変量解析で特に必要な固有値および固有ベクトルに対応する Jacobian がえられていなかった．このため nul case でさえ，統一的な方法を用いることができず，non nul case には直接に積分することをあきらめ，James-Constantine にしたがって直交行列に measure を与えて積分する方法をとってきた．直交行列による変換に対応する Jacobian が求められれば，初等的に，しかも全一の方法で non nul case まで行いうる．

他方，主成分分析，判別の問題において，第一に必要なのはベクターであって，単なる固有値ではない．固有ベクトルの分布がえられていないため，これらの分野でいろいろの不便を感ずる．ベクトルの分布に進むためにも，Jacobian による方法が便利であろう，ただし現在の所，この研究に必要な

形はまだえられていない．

§2　ここで取扱う固有値問題は主として次のものである．これらの変換に対応するJacobianを求めることが目的である．

I.　$U\ (p\times p)$，symm. とすれば

$$U = LD_\lambda L'$$

なる直交行列存在し，λは $|U-\lambda I_p|=0$ の根で，固有値が異るとき（符号とD_λの順序を除き — 以下省略）Lはuniqueに定まる．

II.　U, V 共に $(p\times p)$，symm.，Uはp.d. とすれば

$$U = TT', \quad V = TD_\lambda T'$$

を同時に満足するnon singularなTが存在し，λは $|V-\lambda U|=0$ の根で，Uの固有根およびVのUに関する固有根がそれぞれ相互に異るとき，Tはuniqueに定まる．

III.　$U\ (p\times q)$に対し　（$p>q$と假定）

$$U = LD_\lambda^{(pq)}M'$$

となる直交行列 $L(p\times p)$，$M(q\times q)$の組が存在し，λは $|U'U-\lambda^2 I_q|=0$ の根であり，LおよびMはそれぞれ UU' および $U'U$ の固有ベクトルよりなる．

IV.　$U(p\times p)$，$V(q\times q)$ 共にsym.，p.d.，$W(p\times q)$に

対し　$U=SS'$, $V=TT'$, $W=SD_{\lambda}^{(pq)}T'$

を同時に満足する non singular な行列 S および T が存在し,

λ は $\begin{vmatrix}\lambda U & W \\ W' & \lambda V\end{vmatrix}=0$ の（0ならざる）根で, S は $WV^{-1}W'$ の U に関する固有ベクトル, T は $W'U^{-1}W$ の V に関する固有ベクトルよりなる.

[注意] III において $(p>q)$ 対ム の $p-q$ 個のベクトルは直交を除いて全く自由に廻転しうる. II の場合でも V が full rank でなければ T は unique とならない. この点が Jacobian を求めるとき問題となり, 形を少し変えて結果を表わす必要がある.

§3. Hsu [1] による次の結果を求めよう.

(1)　$U\ (p\times p)$ sym.,　$A(p\times p)$ non singular

$U=AVA'$ に対し　$J(U:V)=|A|^{p+1}$

(2)　$U\ (p\times p)$ sym.,　$J(U:U^{-1})=|U|^{p+1}$

これらの Jacobian, その他対称行列の変換に便利な lemma として

Lemma 1.　$y_\alpha=f_\alpha(x_1,\cdots,x_{m+n})\quad(\alpha=1,\cdots,m+n)$　(1)

$\varphi_\nu(x_1,\cdots,x_{m+n})\equiv\psi_\nu(y_1,\cdots,y_{m+n})=0\quad(\nu=1,\cdots,n)$　(2)

のとき　$J(y_1,\cdots,y_m:x_1,\cdots,x_m)=\left|\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_\beta}\right|\left|\frac{\partial\psi_\nu}{\partial y_{m+\xi}}\right|\cdot\left|\frac{\partial\varphi_\nu}{\partial x_{m+\xi}}\right|^{-1}$

[証明]　(1)より　$\left(\frac{\partial y_\alpha}{\partial x_j}\right)=\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right)+\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\left(\frac{\partial x_{m+\xi}}{\partial x_j}\right)$　　$\alpha:1\sim m+n$, $i,j:1\sim m$, $\xi:1\sim n$

(2)より　$\left(\frac{\partial\psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial y_\alpha}{\partial x_j}\right)=\left(\frac{\partial\psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left[\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right)+\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\left(\frac{\partial x_{m+\xi}}{\partial x_j}\right)\right]=0$

$$\left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\right]\left(\frac{\partial x_{m+\xi}}{\partial x_j}\right) = -\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right)$$

したがって

$$\left(\frac{\partial x_{m+\xi}}{\partial x_j}\right) = -\left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\right]^{-1}\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right)$$

$$J = \left|\frac{\partial y_i}{\partial x_j}\right| = \left|\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+\xi}}\right)\left(\frac{\partial x_{m+\xi}}{\partial x_j}\right)\right|$$

$$= \left|\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) - \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+\xi}}\right)\left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\right]^{-1}\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right)\right|$$

$$= \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) & \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+\xi}}\right) \\ \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}\right) & \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right) \end{vmatrix} \cdot \left|\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\right|^{-1}$$

$$= \begin{vmatrix} I_m & 0 \\ \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_j}\right) & \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_{m+\xi}}\right) \end{vmatrix} \cdot \left|\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_\beta}\right| \cdot \left|\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right)\right|^{-1}$$

しかるに (2) より

$$\left(\frac{\partial \varphi_\nu}{\partial x_j}\right) = \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha}\right)\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+\xi}}\right) \qquad \text{Q.E.D.}$$

これを用い (1) を証明するには

$$f: \quad u_{ij} = \sum_{s,t} a_{is}\, a_{jt}\, v_{st}$$

$$\psi: \quad u_{ij} - u_{ji} = 0 \qquad \varphi: \quad \sum A\binom{i.j}{s.t} w_{st} = 0$$

(ただし $A\binom{i.j}{s.t}$ は A の i,j 行, s,t 列の2次の小行列式) がいる2次の小行列式よりなる行列式 $|A_{(2)}| = |A|^{\binom{p-1}{2-1}} = |A|^{p-1}$. これより容易にえられよう.

§4. p 次の直交行列の独立な要素は $\frac{1}{2}p(p-1)$ である. これをうまく定めなければ Jacobian の具体的な形はえられない (失敗の記録として [2] 参照). 独立な要素として角を用

いるのは自然であろう．角を用いるにも2通りあるが，ここでは次のように定める．

$$R_\nu(\theta)=\begin{bmatrix} I_{\nu-1} & 0 & & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ & \sin\theta & \cos\theta & \\ 0 & 0 & & I_{p-\nu-1} \end{bmatrix}$$

$$L_\nu(\theta_1,\cdots,\theta_{p-\nu})=R_\nu(\theta_1)R_{\nu+1}(\theta_2)\cdots R_{p-1}(\theta_{p-\nu})$$

$$L(\theta_{ij})=L_1(\theta_{1j})L_2(\theta_{2j})\cdots L_{p-1}(\theta_{p-1,\,p-1})$$

$$(i=1,\cdots,p-1\ ;\ j=i,i+1,\cdots,p-1)$$

このように定められた $L(\theta_{ij})$ は p 次の任意の直交行列を表わす．これを用いて §2 の変換に対応する Jacobian を求めよう．

§5.

(3)　変換 $U=LD_\lambda L'$ に対して

$$J(U:D,\theta)=\prod_{i<j}(\lambda_i-\lambda_j)\prod_{i=1}^{p-2}\prod_{j=i}^{p-2}\sin^{p-j-1}\theta_{ij}.$$

(4)　上記の場合

$$\int J(U:D,\theta_{ij})\prod d\theta_{ij}=\frac{\pi^{\frac{1}{4}p(p+1)}}{\prod_{i=1}^{p}\Gamma\left(\frac{p+1-i}{2}\right)}\prod_{i<j}(\lambda_i-\lambda_j).$$

(5)　変換　$U(p\times q)=L(\theta_{ij})D_\lambda^{(pq)}M'(\varphi_{\alpha\beta})$　($p\leqq q$ と仮定)

に対し

$$J(U:\lambda,\theta_{ij},\varphi_{\alpha\beta}(\alpha=1,\cdots,p))$$
$$=\prod_{i=1}^{p}\lambda_i^{q-p}\prod_{i<j}(\lambda_i^2-\lambda_j^2)\prod_{i=1}^{p-2}\prod_{j=i}^{p-2}\sin^{p-j-1}\theta_{ij}\prod_{\alpha=1}^{p}\prod_{\beta=\alpha}^{q-2}\sin^{q-\beta-1}\varphi_{\alpha\beta}$$

(6) $X(p \overset{\times}{\times} q)$ （$p \leqq q$ と假定…… これは本質的假定である）

$$J(X : XX', \varphi_{\alpha\beta}) = 2^{-p} |XX'|^{\frac{1}{2}(q-p-1)} \prod_{\alpha=1}^{p} \prod_{\beta=\alpha}^{q-1} \sin^{q-\beta-1} \varphi_{\alpha\beta}$$

(7) 上記の下に

$$\int J(X : XX', \varphi_{\alpha\beta}) \Pi d\varphi_{\alpha\beta} = 2^{-p} \frac{\pi^{\frac{1}{2}p[q-\frac{p-1}{2}]}}{\prod_{1}^{p} \Gamma(\frac{q+1-i}{2})} |XX'|^{\frac{q-p-1}{2}}$$

(8) $U(p \times p)$, $V(p \times p)$ 共に sym., U p.d.

$U = TT'$, $V = TD_\lambda T'$ なる変換に対し

$$J(U, V : D_\lambda, T) = 2^p |T|^{p+2} \prod_{i<j} (\lambda_i - \lambda_j)$$

［注意］ この場合 V のランクに限定をしてないことは meas. 0 を除き p なることである．もし $\mathrm{rank}\, V = r < p$ なる限定を設ければ T は一意に定まらず，(8) は成立しない．そこで

(9) $U(p \times p)$, sym., p.d. ; $X(p \times r)$ $(r < p)$

$$U = TT', \quad XX' = T\begin{pmatrix} D_\lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} T'$$

なる変換に対し

$$f(U, XX')\, dU\, dX$$

は

$$f\left(TT', T\begin{pmatrix} D_\lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} T'\right) \Pi \lambda_\alpha^{p-r} \Pi (\lambda_\alpha^2 - \lambda_\beta^2) \Pi d\lambda_\alpha \cdot \frac{K'}{K} |T|^{r+1} dT$$

に変換される，ただし

$$K' = \frac{\pi^{\frac{1}{4}r(r+1)}}{\prod_{1}^{r} \Gamma(\frac{r+1-i}{2})}, \quad K = \frac{\pi^{\frac{1}{4}(p-r)(p-r+1)}}{\prod_{1}^{p-r} \Gamma(\frac{p-r+1-i}{2})}.$$

(10) $U(p\times p)$, $V(q\times q)$, 共に sym., p.d.

$W(p\times q)$ ($p\leq q$ を仮定する……記号の便宜上)

$$U=SS',\quad V=TT',\quad W=SD_\lambda^{(pq)}T'$$

に対し

$$f(U,V,W)\,dU\,dV\,dW$$

は

$$\frac{1}{K} f(SS', TT', SD_\lambda^{(pq)}T') \prod \lambda_i^{q-p} \prod (\lambda_i^2-\lambda_j^2) \prod d\lambda_i \cdot |S|^{q+1} dS \cdot |T|^{p+1} dT$$

に変換される，ただし

$$K = \pi^{\frac{1}{4}(q-p)(q-p+1)} \Big/ \prod_{1}^{q-p} \Gamma\left(\frac{q-p+1-i}{2}\right).$$

§6　多変量分布においても1変量の場合に準じ，generalized Gamma, Beta, F, T^2, Dirichlet, Chi-square が定義される：多変量の場合にはしかし，これら各分布に対して，次の3種類のものが存在する．

(i) 行列型，(ii) 対角型，(iii) 行列式型

(ただし，Dirichlet のみは(ii)は存在しない)．これらを1種，2種，3種の拡張Γ分布，--- とよびたい．

以上の Jacobian がえられれば，degenerating case をも含めて，第1種から第2種分布を導くことは容易に行いうる．第3種については exact な分布を具体的にうることはでき

ず，asymptotic に求めるより仕方ない．

§7. 固有ベクトルの分布については今の所殆んど知られていない．Anderson [3], 津村[4] が nul case すなわち trivial な場合に出し，杉山 [5] が $p=2$ の場合に求めた．何れも実際問題には役立たず，2，3の人が simulation でやむなく見当をつけている程度である．

平均値の場合，推定すべきものが平均値で，これは単純であり，この際分散は1つのメドに過ぎず，相当に荒っぽくてよい．この点，実験計画でも含様である．しかるに主成分分析，判別解析，正準相関分析 において，推定すべきものが分布がえられず，メドをつける程度のものの分布に中心を置いているのは逆であり，今後の問題である．

(1) Deemer & Olkin, Biometrika 38 (1951),
Olkin, Biometrika 40 (1953),

(2) S.N. Roy, Some aspects of multivariate analysis (1957), Wiley.

(3). Anderson, Proc. 2nd Berkeley Symp. (1951),

(4) Tumura, T.R.U. Math., Vol. 1 (1965).

(5) Sugiyama, A.M.S. 36 (1965), A.M.S. 37 (1966).