

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、統一解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おき、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、しかも統一の方法で non nul case まで行ける。

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じる。ベクトルの分布に迫るためにも、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 ここでは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

$$U = L D_{\lambda} L'$$

なる直交行列存在し、 λ は $|U - \lambda I_p| = 0$ の根で、固有値が異なるとき（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

$$U = T T', \quad V = T D_{\lambda} T'$$

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なるとき、 T は *unique* に定まる。

III. $U (p \times p)$ に対し ($p > g$ と假定)

$$U = L D_{\lambda}^{(pg)} M'$$

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

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

并し $U = SS'$, $V = TT'$, $W = SD_{\lambda}^{(p, \delta)} T'$

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 $WT^{-1}W'$ 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.

[証意] III において ($p > \delta$) 数 δ の $p - \delta$ 個のベクトルは互変を
 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. Hau [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

$$U = AVA' \quad \text{に對し} \quad J(U:V) = |A|^{p+1}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \right] \left(\frac{\partial x_{m+3}}{\partial x_j} \right) = - \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} \right)$$

したがって

$$\left(\frac{\partial x_{m+3}}{\partial x_j} \right) = - \left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \right]^{-1} \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} \right)$$

$$\begin{aligned} J &= \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right| = \left| \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+3}} \right) \left(\frac{\partial x_{m+3}}{\partial x_j} \right) \right| \\ &= \left| \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right) - \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+3}} \right) \left[\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \right]^{-1} \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} \right) \right| \\ &= \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right) & \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_{m+3}} \right) \\ \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} \right) & \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \end{vmatrix} \cdot \left| \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \right|^{-1} \\ &= \begin{vmatrix} I_m & 0 \\ \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_j} \right) \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_{m+3}} \right) \end{vmatrix} \cdot \left| \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} \right| \cdot \left| \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \right|^{-1} \end{aligned}$$

よるに (2) より

$$\left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial x_j} \right) = \left(\frac{\partial \psi_\nu}{\partial y_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial x_{m+3}} \right) \quad \text{Q.E.D.}$$

これを用い (1) を証明するに

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

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

(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) あるいは 2 次の小行列式よりなる行列式 $|A_{(2)}| = |A| \binom{p-1}{2-1} = |A|^{p-1}$ に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。

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

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

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

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

このように定められた $L(\theta_{ij})$ は p 次の任意の正交行列を著す。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 $U = L D_\lambda L'$ 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

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

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

に対し

$$J(U: \lambda, \theta_{ij}, \varphi_{\alpha\beta} (\alpha=1, \dots, p))$$

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

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

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

(7) 上記の下に

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

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

$U = TT'$, $V = T D_{\lambda} T'$ なる変換に對し

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

[注意] この場合 T 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 $\text{rank } V = r < p$ なる限定を設ければ T は一義に定まらず、(8) は成立しない。そこで

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

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

なる変換に對し

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

は

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

に変換される、ただし

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

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

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

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

$$U = SS', \quad V = TT', \quad W = S D_{\lambda}^{(rs)} T'$$

に対し

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

は

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

に変換される, ただし

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

§ 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, …… とよぶたい.

以上の *Jacobian* がえられれば, *degenerating case* をも含めて, 才 1 種から才 2 種分布を導くことは容易に行いうる. 才 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 *null 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, これは單純であり, この際分散は1つのノドに過ぎず, 相当に荒っぽくてよい. この点, 実験計画でも合標である. しかしに主成分分析, 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, ノ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) Tamura, *T. R. U. Math.*, Vol. 1 (1965).
- (5) Sugiyama, *A.M.S.*, 36 (1965), *A.M.S.*, 37 (1966).