

固有値分布論の動向 - 最小固有値の分布の精密計算と χ^2 近似 -

橋口 博樹* 宮崎 英子** 杉山 高一**

本稿では、固有値分布論の最近の展開の一つとして、ゾーナル多項式からジャック多項式の拡張を議論する。ジャック多項式の計算アルゴリズムを、基本対称式で展開する方法で実装し、その計算量を与える。これにより、実ウィシャート行列の最小固有値分布のみならず、複素ウィシャートの最小固有値分布も数値計算できることを報告する。さらに、実ウィシャート行列の最小固有値分布を χ^2 分布で近似する。近似精度を精密分布計算とモンテカルロシミュレーションを通して調べ、母集団最小固有値が他と離れ、自由度が大きい場合に精度が良いことを報告する。

Key words and phrases: ゴーナル多項式, ジャック多項式, Laplace-Beltrami オペレータ, ウィシャート分布

1. はじめに

ゾーナル多項式は、多変量正規母集団下で共分散行列の分布、特に固有値分布を記述する重要な多項式である。この多項式は、James[11] によって、一般線型群と直交群に関する表現論を利用して導出された。James[11] 以降、共分散行列の固有値に関する多くの統計量が、ゾーナル多項式を使って求められている (James[12], Constantine[1], 早川 [7, 8]). Sugiyama [26] は、最大固有値分布をゾーナル多項式の無限級数として求め、Khatri [14] は、分布がゾーナル多項式の有限級数になる場合の統計量の考察を行った。しかしゾーナル多項式の数値計算の困難性や、収束の遅さ故から、漸近論の重要性が強調されるようになった (早川 [8]). 固有値分布の漸近展開は Sugiura[24], Fujikoshi[2] で行われている。

1960, 1970 年代での高次ゾーナル多項式の計算実現は、Sugiyama[27] の 2 変量で 200 次の場合に限られる。この Sugiyama[27] の計算方法を利用して、Sugiura[25] では、2 変量の場合に最大固有値、最小固有値の分布を数値計算し、基本統計量など分布の様相を調べている。なお、低次の場合では、12 変量、12 次までは、McLaren[18] でもプログラムが実装されている。3 変量以上のゾーナル多項式の数値計算は、Hashiguchi and Niki [3], Hashiguchi, Nakagawa and Niki[4] で実装され、これを利用した最大、最小固有値の分布の数値計算が Hashiguchi and Niki[5] で行われている。

一方、Jack[9, 10] は、James[11] のゾーナル多項式を拡張して、後にジャック多項式と呼ばれるパラメータ α 付きの対称式を導入した。 $\alpha = 2$ のとき、ジャック多項式はゾーナル多項式となり、さらに $\alpha = 1$ のときシュア-多項式 (複素ゾーナル多項式)、 $\alpha = -1$ のとき、Kendall and Stuart[15] で扱われている拡張対称式となる。Jack[10] では、拡張対称式からベキ和多項式への相互変換方法が述べられており、これは、中川、仁木 [20] の多変量拡張対称式、多変量ベキ和多項式の相互変換アルゴリズムの一変量版に相当する。ジャック多項式の組合せ論的な性質は Stanley[23] で解明され、Koef and Edelman[17] は

* 埼玉大学 〒 223-8501 さいたま市桜区下大久保 2 5 5

** 中央大学 〒 112-8551 文京区春日 1 - 1 3 - 2 7

Stanley[23] の結果を利用して、ジャック多項式の計算方法の提案と固有値分布の計算を行っている。その際、ゾーナル多項式の無限級数である超幾何関数の類似として、ジャック多項式の無限級数版の超幾何関数も定義されている。

また、固有値分布論の最近の展開として、永尾 [21] では、物理や数学の理論分野に限らず、生態系のダイナミクスのモデルや、複雑ネットワークのモデル、通信の分野に応用されるなど、数理統計学の枠を超えた広がりを紹介している。

本稿では、(実) ゾーナル多項式と複素ゾーナル多項式を統一的に扱うため、ジャック多項式を導入し、基本対称式展開での計算方法を提案し、その計算量を見積もる。実と複素の場合のウィシャート行列の最小固有値分布の数値計算を行う。さらに、実の場合において、最小固有値分布の χ^2 近似を行い、精密計算との比較を行う。特に、母集団の最小固有値が、他の固有値と離れる場合において、 χ^2 近似の精度が良いことを報告する。2. 節ではゾーナル多項式とジャック多項式の定義を述べ、3. 節で基本対称式で展開するためのアルゴリズムを述べる。4. 節では提案アルゴリズムの計算量を求める。5. 節で最小固有値分布の数値計算、6. 節が χ^2 近似の議論である。

2. ゾーナル多項式とジャック多項式

次数 $k > 0$ 、長さ $m > 0$ 以下の分割全体の集合を

$$P_m^k = \left\{ \kappa = (\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_m) \mid \sum_{i=1}^m \kappa_i = k, \kappa_1 \geq \kappa_2 \geq \dots \geq \kappa_m \geq 0 \right\}$$

で表し、 \succ を P_m^k 上の辞書式逆順序とする。行列 \mathbf{Y} を $m \times m$ の対称行列 (またはエルミート行列) として、その固有値を y_1, \dots, y_m とする。変数 \mathbf{Y} 、分割 $\kappa \in P_m^k$ の基本対称式 $\mathcal{E}_\kappa(\mathbf{Y})$ を

$$\mathcal{E}_\kappa(\mathbf{Y}) = e_1^{\kappa_1 - \kappa_2} e_2^{\kappa_2 - \kappa_3} \dots e_{m-1}^{\kappa_{m-1} - \kappa_m} e_m^{\kappa_m}$$

で定義する。ただし e_1, e_2, \dots, e_m は通常の基本対称式:

$$e_1 = y_1 + y_2 + \dots + y_m, e_2 = y_1 y_2 + \dots + y_{m-1} y_m, \dots, e_m = y_1 y_2 \dots y_m$$

を表す。このとき、基本対称式 $\mathcal{E}_\kappa(\mathbf{Y})$ の次数は $\sum_{i=1}^{m-1} i(\kappa_i - \kappa_{i+1}) + m \kappa_m = k$ であり、分割の次数に等しい。

ゾーナル多項式の定義は、表現論に基づく定義、あるいは存在定理を基になされる。Muirhead [19] は、単項対称式展開でのゾーナル多項式存在の一意性を用いて、ゾーナル多項式の定義としている。Muirhead[19] の定義における単項対称式を基本対称式で置き換えたものが、次の命題 1 である。

命題 1 (ゾーナル多項式存在定理) 以下の 3 条件を満たす \mathbf{Y} の k 次同次対称多項式の集合 $\{C_\kappa(\mathbf{Y}) \mid \kappa \in P_m^k\}$ が一意に決まる。

(i) 上三角性

$$C_\kappa(\mathbf{Y}) = \sum_{\kappa \succeq \mu} q[\kappa, \mu] \mathcal{E}_\mu(\mathbf{Y}) \quad (2.1)$$

ただし、 $q[\kappa, \mu] > 0$.

(ii) Laplace-Beltrami オペレータ D_m の固有関数.

$$D_m \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{Y}) = d(\kappa) \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{Y}) \quad (2.2)$$

ただし,

$$D_m = \sum_{i=1}^m y_i^2 \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \sum_{1 \leq i \neq j \leq m} \frac{y_i^2}{y_i - y_j} \frac{\partial}{\partial y_i}$$

$$d(\kappa) = \sum_{i=1}^m \kappa_i (\kappa_i + m - i - 1)$$

(iii) $(\text{tr } \mathbf{Y})^k$ を係数 1 で展開する.

$$(\text{tr } \mathbf{Y})^k = e_1^k = (y_1 + \cdots + y_m)^k = \sum_{\kappa \in P_m^k} \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{Y}). \quad (2.3)$$

定義 1 (ゾーナル多項式) 上の $\mathcal{C}_\kappa(\mathbf{Y})$ を分割 κ に対するゾーナル多項式と呼ぶ.

ゾーナル多項式 $\mathcal{C}_\kappa(\mathbf{Y})$ を生成するには, 上の 1, 3 の条件下で 2 の偏微分方程式を解けばよい.

一方 Jack[9] は, James[11] を拡張して, (2.4) 式でジャック多項式を定義している.

定義 2 (ジャック多項式の定義 1) 分割 $\kappa = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_m) \in P_m^k$ に対して, ジャック多項式 $X_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha)$ を

$$X_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha) = \alpha^m \frac{\partial^m}{\partial t_1 \partial t_2 \cdots \partial t_m} |\mathbf{I} - t_1 \mathbf{Y}^{\kappa_1} - t_2 \mathbf{Y}^{\kappa_2} - \cdots - t_m \mathbf{Y}^{\kappa_m}|^{-1/\alpha} \quad (2.4)$$

と定義する. ただし, 上の微分は $t_1 = t_2 = \cdots = t_m = 0$ で評価し, \mathbf{I} は m 次単位行列である.

さらに, Stanley[23] は, より構成のしやすい形式で次のようにジャック多項式を定義している.

定義 3 (ジャック多項式の定義 2) 任意の分割 $\kappa \in P_m^k$ に対して, 以下の 3 つを満たす対称式 (ジャック多項式) $J_\kappa = J_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha)$ が唯一存在する.

(P1) (直交性) $\kappa \neq \mu$ ならば, $\langle J_\kappa, J_\mu \rangle = 0$ である.

(P2) (上三角性) $J_\kappa = \sum_{\mu} v_{\kappa\mu} \mathcal{M}_\mu(\mathbf{Y})$ と書いたとき, $\mu \leq \kappa$ でないならば, $v_{\kappa\mu} = 0$ である.

(P3) (正規性) $|\kappa| = m$, J_κ における $y_1 y_2 \cdots y_m$ の係数 $v_{\kappa(1^m)}$ は $m!$ に等しい

ただし, $\mathcal{M}_\mu(\mathbf{Y})$ は y_1, \dots, y_m の単項対称式 (monomial symmetric function) を表す.

命題 2 (ジャック多項式とゾーナル多項式の関係) (a) $J_\kappa(\mathbf{Y}; 1) = H_\kappa s_\kappa(y_1, \dots, y_m)$. こ

こで $s_\kappa(y_1, \dots, y_m)$ は, シュアー多項式 (複素ゾーナル多項式) であって, $H_\kappa =$

$\prod_{(i,j) \in \kappa} h(i,j)$, $h(i,j)$ は hook-length である. また, $(i,j) \in \kappa$ は, κ を台とするヤング図形の (i,j) セルを意味する.

(b) $J_\kappa(\mathbf{Y}, 2) = Z_\kappa(\mathbf{Y})$ ただし, $Z_\kappa(\mathbf{Y})$ は James により定義されたゾーナル多項式である.

ゾーナル多項式は, $(GL_n(\mathbf{R}), O_n(\mathbf{R}))$ 上の球関数であって, Laplace-Beltrami operator と呼ばれる偏微分作用素の固有関数である. Laplace-Beltrami operator を拡張して, 偏微分作用素 $D_m(\alpha)$ を

$$D_m(\alpha) = \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^m y_i^2 \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \sum_{1 \leq i \neq j \leq m} \frac{y_i^2}{y_i - y_j} \frac{\partial}{\partial y_i}$$

のように定義すると, Jack 多項式が固有関数となる. つまり, (2.5) 式が成り立つ (Stanley[23]).

$$D_m(\alpha) J_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha) = d(\kappa; \alpha) J_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha) \quad (2.5)$$

ただし, κ に対する固有値は

$$d(\kappa; \alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \kappa_i (\alpha \kappa_i - \alpha + 2k - 2i)$$

である. さらに, $C_\kappa^{(\alpha)}(\mathbf{Y})$ を

$$(\text{tr } \mathbf{Y})^k = \sum_{\kappa \in P_m^k} C_\kappa^{(\alpha)}(\mathbf{Y})$$

を満たすように定義すると, $J_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha)$ と $C_\kappa^{(\alpha)}(\mathbf{Y})$ には

$$C_\kappa^{(\alpha)}(\mathbf{Y}) = \frac{\alpha^k k!}{j_\kappa} J_\kappa(\mathbf{Y}; \alpha)$$

の関係がある. ただし, $\kappa \in P_m^k$,

$$j_\kappa = \prod_{(i,j) \in \kappa} h_\kappa^*(i,j) h_\kappa^\kappa(i,j),$$

$h_\kappa^*(i,j) = \kappa'_j - i + \alpha(k_i - j + 1)$, $h_\kappa^\kappa(i,j) = \kappa'_j - i + 1 + \alpha(k_i - j)$ であり, それぞれ, the upper and lower hook length と呼ばれる.

3. ジャック多項式の構成法

偏微分方程式 (2.5) 式を $\mathcal{E}_\mu(\mathbf{Y})$ に関する係数比較で解くために, $D_m(\alpha)$ を基本対称式で変数変換する. この変換は単に,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial e_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial e_j}$$

を $D_m(\alpha)$ に代入すればよい.

定理 1 (Laplace-Beltrami オペレータの基本対称式表現) Laplace-Beltrami オペレータ $D_m(\alpha)$ を基本対称式で変換したとき, その表現形 Δ_m は以下で与えられる:

$$\begin{aligned} \Delta_m &= \sum_{i=1}^m \left(m i - \frac{i(i+1)}{2} \right) e_i \frac{\partial}{\partial e_i} \\ &+ \frac{\alpha}{2} \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^m \left(\sum_{k=0}^{s-1} \sum_{j=0}^{t-1} (-1)^{s+t-k-j} e_k e_j p_{s+t-k-j} \right) \frac{\partial^2}{\partial e_s \partial e_t} \end{aligned}$$

ただし $p_l = \sum_{i=1}^m x_i^l$ であり, (3.1) 式によって基本対称式の積和に変換できる.

$$p_l = \det \begin{bmatrix} e_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 2e_2 & e_1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ le_l & e_{l-1} & e_{l-2} & \cdots & e_1 \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

また, (3.1) 式において $l > m$ ならば $e_l = 0$ とする.

この Δ_m から, ゾーナル多項式の係数 $q[\kappa, \mu]$ の漸化式が以下のように求められる.

定理 2 (ジャック多項式の係数の漸化式) ゾーナル多項式の基本対称式展開

$$C_{\kappa}^{(\alpha)}(\mathbf{Y}) = \sum_{\mu \leq \kappa} q[\kappa, \mu] \mathcal{E}_{\mu}(\mathbf{Y})$$

において, 漸化式

$$\{d(\kappa; \alpha) - d(\mu; \alpha)\} q[\kappa, \mu] = \sum_{\kappa \succ \nu \succ \mu} b[\nu, \mu] q[\kappa, \nu] \quad (3.2)$$

が成り立つ. ただし, $b[\nu, \mu]$ は,

$$\Delta_m \mathcal{E}_{\nu}(\mathbf{Y}) = \sum_{\mu \leq \nu} b[\nu, \mu] \mathcal{E}_{\mu}(\mathbf{Y}) \quad (3.3)$$

で決定される. なお, 係数 $q[\kappa, \mu]$ は α に依存するが, 記号の煩雑さを省くために α を省略する.

具体的に m が正の整数値で与えられると数式処理システムで標準装備されているグレブナ基底を利用して, 基本対称式への生成元変換により, Δ_m を求めることができる. 例えば, $m = 2$ のとき,

$$\Delta_2 = \frac{\alpha}{2} \left\{ (e_1^2 - 2e_2) \left(\frac{\partial}{\partial e_1} \right)^2 + 2e_1 e_2 \frac{\partial^2}{\partial e_1 \partial e_2} + 2e_2^2 \left(\frac{\partial}{\partial e_2} \right)^2 \right\} + e_1 \frac{\partial}{\partial e_1} + e_2 \frac{\partial}{\partial e_2} \quad (3.4)$$

さらに対応する漸化式は, $\kappa \succ \mu$ に対して,

$$\{d(\mu; \alpha) - d(\kappa; \alpha)\} q[\kappa, \mu] = \alpha(\nu_1 + 2)(\nu_1 + 1) q[\kappa, (\mu_1 + 1, \mu_2 - 1)] \quad (3.5)$$

となる. ただし, $\kappa = (\kappa_1, \kappa_2)$, $\mu = (\mu_1, \mu_2)$, $\nu_1 = \mu_1 - \mu_2$, $\nu_2 = \mu_2$ である.

通常のゾーナル多項式 ($\alpha = 2$), $m = 3$ の場合は Kowata and Wada [16] で漸化式が求められると同時に解かれ, ゾーナル多項式の基本対称式展開が明示的に与えられている. Hashiguchi and Niki [3] は, $m = 3$ において計算機の利用を前提とした漸化式の計算方法を提案し, Hashiguchi et al. [4] で $m \geq 4$ へ拡張している. Hashiguchi et al. [4] の方法をジャック多項式の場合に当てはめると, 一度漸化式が出来てしまえば, 以下の命題 3 によって, $C_{\kappa}^{(\alpha)}(\mathbf{Y})$ の基本対称式 $\mathcal{E}_{\mu}(\mathbf{Y})$ の係数 $q[\kappa, \mu]$ が辞書式逆順序での高い順に決定

できるというものである。この決定過程をまとめたものが以下のアルゴリズム 1 であり、これはグラムシュミットの直交化法と同等である。Beltrami オペレータを使って単項対称式による展開での同様のアプローチが James[13] にある。

命題 3 (係数の満たす漸化式) ジャック多項式 $C_{\kappa}^{(\alpha)}(\mathbf{Y})$ の基本対称式展開 (2.1) に現れる係数 $\{q[\kappa, \mu] \mid \mu \preceq \kappa \in P_m^k\}$ は、以下の 3 条件を満たす。

1. (Stanley [23]) $\kappa = \mu \in P_m^k$ のとき、

$$q[\kappa, \kappa] = \frac{\alpha^k k!}{j_{\kappa}} \prod_{(i,j) \in \kappa} h_{*}^{\kappa}(i, j) = \frac{\alpha^k k!}{\prod_{(i,j) \in \kappa} h_{\kappa}^{*}(i, j)}.$$

2. (Stanley [23]) もし $\kappa \succ \mu$ かつ $d(\kappa; \alpha) = d(\mu; \alpha)$ ならば、 $q[\kappa, \mu] = 0$
 3. もし $\kappa \succ \mu$ かつ $d(\kappa; \alpha) \neq d(\mu; \alpha)$ ならば、

$$q[\kappa, \mu] = \frac{1}{d(\kappa; \alpha) - d(\mu; \alpha)} \sum_{\kappa \succeq \nu \succ \mu} b[\nu, \mu] q[\kappa, \nu]$$

である。ただし、 $b[\nu, \mu]$ は、(3.3) 式で与えられる。

アルゴリズム 1 (ジャック多項式の構成アルゴリズム)

入力: $\kappa \in P_m^k$

出力: $C_{\kappa}^{(\alpha)}(\mathbf{Y}) = \sum_{\kappa \succeq \mu} q[\kappa, \mu] \mathcal{E}_{\mu}(\mathbf{Y})$

- (i) 辞書式逆順序で κ 以下の分割 $\mu^i \in P_m^k$ を全て生成する

$$\kappa = \mu^1 \succ \mu^2 \succ \cdots \succ \mu^s.$$

- (ii) 命題 3 の 1. より、 $q[\kappa, \mu^1] := q[\kappa, \kappa]$ を計算し、 $i := 1$ とする。
 (iii) $i := i + 1$
 (iv) もし $d(\mu^i; \alpha) = d(\kappa; \alpha)$ ならば $q[\kappa, \mu^i] := 0$, そうでなければ、

$$q[\kappa, \mu^i] := \frac{1}{d(\mu^i; \alpha) - d(\kappa; \alpha)} \sum_{j=1}^{i-1} b[\mu^j, \mu^i] q[\kappa, \mu^j]$$

- (v) もし $i < s$ ならば Step (iii) に戻り、そうでなければ以下を出力し終了する:

$$q[\kappa, \mu^1] \mathcal{E}_{\mu^1}(\mathbf{Y}) + \cdots + q[\kappa, \mu^s] \mathcal{E}_{\mu^s}(\mathbf{Y}).$$

例えば $m = 3$ のとき、 $\kappa, \mu = (\mu_1, \mu_2, \mu_3) \in P_3^k$ に対して、 $\mu_1 > \mu_2 > \mu_3 \geq 1$ ならば、順位の高い順に $\mu^1 = (\mu_1 + 1, \mu_2, \mu_3 - 1)$, $\mu^2 = (\mu_1 + 1, \mu_2 - 1, \mu_3)$, $\mu^3 = (\mu_1, \mu_2 + 1, \mu_3 - 1)$ とおき、漸化式は、

$$\begin{aligned} \{d(\kappa; \alpha) - d(\mu; \alpha)\} q[\kappa, \mu] &= 3\alpha(\nu_1 + 1)(\nu_2 + 1) q[\kappa, \mu^1] \\ &\quad + \alpha(\nu_1 + 2)(\nu_1 + 1) q[\kappa, \mu^2] + \alpha(\nu_2 + 2)(\nu_2 + 1) q[\kappa, \mu^3] \end{aligned} \quad (3.6)$$

である。ただし、 $\nu_1 = \mu_1 - \mu_2$, $\nu_2 = \mu_2 - \mu_3$ である。また、 $\kappa \not\succeq \mu^i$ ($i = 1, 2, 3$) ならば $q[\kappa, \mu^i] = 0$ とおくことにより、任意の $\mu \in P_3^k$ について、形式的に (3.6) 式が成立する

と考えることができる。したがって、十分大きい k に対しても、高々4項間の漸化式で $q[\kappa, \mu]$ が決定できることになる。 $m = 4$ の時は8項間、 $m = 5$ の時は14項間、 $m = 6$ の時は23項間の漸化式である。

4. 計算量の評価

アルゴリズム1の計算量を評価するために、一般の場合に漸化式の項数を見積もる。漸化式の項数について、次の定理が成立する。

定理3 (漸化式の項数) ジャック多項式の基本対称式展開の係数が満たす漸化式 (3.2) において、その項数は高々 $T_{\mathcal{E}}$ である。

$$T_{\mathcal{E}} = \begin{cases} 1 + \frac{t(t+1)(4t-1)}{6} & \text{if } m = 2t \\ 1 + \frac{t(t+1)(4t+5)}{6} & \text{if } m = 2t + 1 \end{cases} \\ \sim O(m^3)$$

Koef and Edelman[17] は Stanley[23] の漸化式

$$J_{\kappa}(y_1, \dots, y_m; \alpha) = \sum_{\mu \leq \kappa} J_{\mu}(y_1, \dots, y_{m-1}; \alpha) y_m^{|\kappa/\mu|} \beta_{\kappa\mu}, \quad (4.1)$$

を用いて、ジャック多項式の計算方法を提案している。ただし、 $J_{\kappa}(y_1, \dots, y_m; \alpha)$ は $J_{\kappa}(\mathbf{Y}; \alpha)$ を意味し、その他の記号の定義はここでは省略する。 m 変数で k 次のジャック多項式を求めるためには、1から $m-1$ 変数、1から $k-1$ 次までのジャック多項式を用いることになる。Koef and Edelman[17] では、 m 変数のジャック多項式をすべて生成するアルゴリズムのコストを

$$O\left(m \exp(2\pi\sqrt{2k/3})\right) \quad (4.2)$$

としている。他方、基本対称式展開のコストは、定理3から次のように求められる。

定理4 (計算量) アルゴリズム1を使って、 k 次の分割全体 P_m^k に対するすべてのジャック多項式を生成する計算量は (4.3) 式で与えられる。

$$O\left(\frac{m^3}{k} \exp(\pi\sqrt{2k/3})\right) \quad (4.3)$$

したがって、もし $m^2 < k$ ならば、ジャック多項式を基本対称式で展開して計算する方が、(4.1) 式の漸化式を用いるより効率的である。

5. ウィンシャート行列の最小固有値分布の計算

確率行列 \mathbf{X} は $m \times n$ のサイズで、 n 個の各列ベクトルは独立に同一の多変量正規分布 $N_m(\mathbf{0}, \Sigma)$ に従うとする。ただし、 Σ は母集団の共分散行列である。 $m \times m$ 行列 $\mathbf{W} = \mathbf{X}\mathbf{X}^{\top}$ の確率密度は、

$$\frac{1}{2^{\frac{1}{2}mn} \Gamma_m(\frac{1}{2}n) |\Sigma|^{\frac{1}{2}n}} \exp\left[\frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1}\mathbf{W})\right] |\mathbf{W}|^{\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}(m+1)} \quad (5.1)$$

である. ここで, $\Gamma_m(a)$ は多変量ガンマ関数

$$\begin{aligned}\Gamma_m(a) &= \int_{S>0} e^{-\text{tr} S} |S|^{a-\frac{1}{2}(m+1)} (dS) \\ &= \pi^{\frac{1}{2}m(m-1)} \prod_{i=1}^m \Gamma\left(a - \frac{1}{2}(i-1)\right)\end{aligned}$$

であって, 積分に現れる $S > 0$ は, 対称行列 S が正定値であることを意味する. この確率行列 \mathbf{W} が従う分布をウィシャート分布, n を自由度といい, ウィシャート分布を $W_m(n, \Sigma)$ と書く. ウィシャート行列 \mathbf{W} は, \mathbf{W}/n とすると標本の共分散行列に対応するので, その固有値は主成分分析などの解析で重要である. 最大固有値の分布は Sugiyama[26] によってゾーナル多項式の無限級数として求められ, 3 変量の場合に Sugiyama, Fukuda and Takeda[28] で数値計算されている. 他方, 最小固有値の分布は, Khatri [14] によってゾーナル多項式の有限級数として (5.2) 式で与えられている. さらに複素ウィシャート行列の最大, 最小固有値の分布は, Ratnarajah, Vaillancourt and Alvo[22] によって, 複素ゾーナル多項式 (シュアー多項式) の級数として求められている.

ウィシャート行列 \mathbf{W} の固有値を ℓ_1, \dots, ℓ_m ($\ell_1 > \dots > \ell_m$) とする.

命題 4 (Khatri[14]) もし $j = (n - m - 1)/2$ が非負整数なら, ウィシャート行列 \mathbf{W} の最小固有値 ℓ_m の分布関数は,

$$P[\ell_m < x] = 1 - \exp\left(-\frac{x}{2} \text{tr} \Sigma^{-1}\right) \sum_{k=0}^{jm} \frac{x^k}{2^k k!} \sum_{\kappa}^* C_{\kappa}(\Sigma^{-1}) \quad (5.2)$$

で与えられる. ただし, 和の記号 \sum_{κ}^* は,

$$\{\kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_m) \in P_m^k \mid \kappa_1 \leq j\}$$

の条件 ($\kappa_1 \leq j$) を満たす分割にわたって和を取ることを意味する.

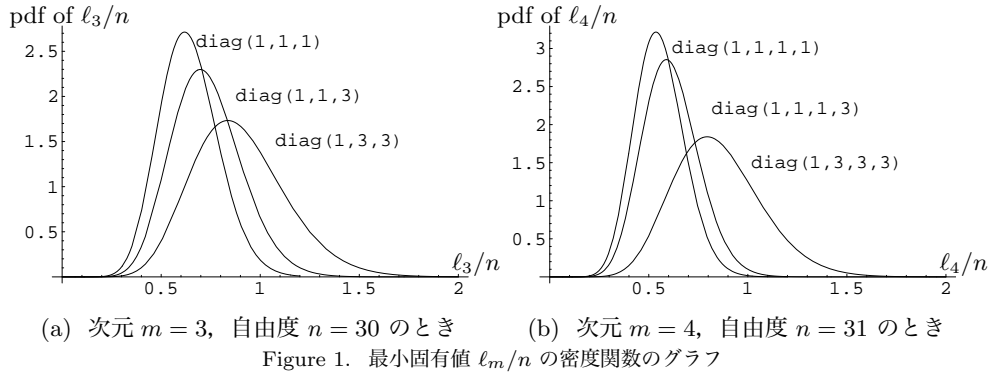
最小固有値 ℓ_m の分布を求めるプログラムを Mathematica で作成した. 特に, $\Sigma = \text{diag}(1, 1, 1)$ の場合, 最小固有値の分布は, (5.2) 式のゾーナル多項式を用いず, 計算可能な形で求められる. $\Sigma = \lambda \mathbf{I}_m$ の場合 (\mathbf{I}_m は m 次単位行列), \mathbf{W} の固有値 ℓ_1, \dots, ℓ_m ($\ell_1 > \dots > \ell_m > 0$) の同時密度関数 f は,

$$f(\ell_1, \dots, \ell_m) = \frac{(2\lambda)^{-mn/2} \pi^{m^2/2}}{\Gamma_m(\frac{1}{2}m) \Gamma_m(\frac{1}{2}n)} \prod_{i<j}^m (\ell_i - \ell_j) \prod_{i=1}^m \ell_i^{(n-m-1)/2} \exp\left(-\frac{1}{2\lambda} \sum_{i=1}^m \ell_i\right)$$

であるので, 具体的に m, n, λ を数値で与えれば, Mathematica を使って, 最小固有値の密度を求めるための重積分を計算することができる. さらに, ゾーナル多項式を経由した密度関数と重積分での計算が一致することを確認することで検証ができる. 例えば, $n = 10$, $\Sigma = \text{diag}(1, 1, 1)$ の場合, 最小固有値 ℓ_3 の密度関数は, (5.2) 式の基づいて分布関数を計算し, さらに微分することで

$$e^{-\frac{3}{2}x} \left(\frac{3x^3}{32} + \frac{9x^4}{128} + \frac{19x^5}{768} + \frac{x^6}{192} + \frac{x^7}{1536} + \frac{x^8}{21504} + \frac{x^9}{645120} \right)$$

と求められる. 一方, Mathematica を利用した重積分では,



(* 多変量ガンマ関数*)

```
gm [m_, a_] := Pi^(1/4 m (m - 1))
```

```
Product[Gamma [a - (i - 1)/ 2], {i, 1, m}];
```

(* 固有値の同時分布 *)

```
f [m_, c_, n_] := Pi^(1/2 m^2)/(2^(1/2 m n) gm [m, m/2] gm [m, n/2]) *
  Exp [-1/2 Apply [Plus, c]]
  Product [c[[i]]^((n - m - 1)/2), {i, 1,
    m}] * Product [c[[i]] - c[[j]], {j, 2, m}, {i, 1, j - 1}];
```

```
f3n = f [3, {c1, c2, c3}, 10];
```

```
f3n1 = Integrate [f3n, {c1, 0, Infinity}];
```

```
f3n2 = Integrate [f3n1, {c2, 0, Infinity}];
```

```
f3 = f3n2 /. c3 <- x
```

と計算することにより両者の一致が確認できる。

図 1 は, $m = 3, 4$ において, Σ を変化させたときの 最小固有値 l_m/n の密度関数を示している. 母集団の最小固有値はいずれの場合も 1 であるので, l_m/n は, この 1 の周りで分布することが期待される. 母集団の他の固有値が 1 から離れるにつれて, 期待通りになっているようなことが見て取れる.

次に, 複素ウィシャート分布に従う確率行列を \widetilde{W} , 複素ウィシャート分布を $CW(n, \Sigma)$ とし, \widetilde{W} の固有値を $\tilde{l}_1 > \dots > \tilde{l}_m$ とする. なお, Σ はエルミート行列である.

命題 5 (Ratnarajah et al. (2005)) 確率行列 \widetilde{W} が複素ウィシャート分布 $CW_m(n, \Sigma)$ ($n \geq m$) に従うとする. このとき, \widetilde{W} の最小固有値 \tilde{l}_m の分布関数は, 次式で与えられる.

$$P[l_m < x] = 1 - \exp(-x \operatorname{tr} \Sigma^{-1}) \sum_{k=0}^{m(n-m)} \frac{x^k}{k!} \sum_{\kappa}^* \tilde{C}_{\kappa}(\Sigma^{-1}),$$

ただし, $\tilde{C}_{\kappa}(Y) = C_{\kappa}^{(1)}(Y)$ であって, \sum_{κ}^* は

$$\{\kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_m) \in P_m^k \mid \kappa_1 \leq n - m\}.$$

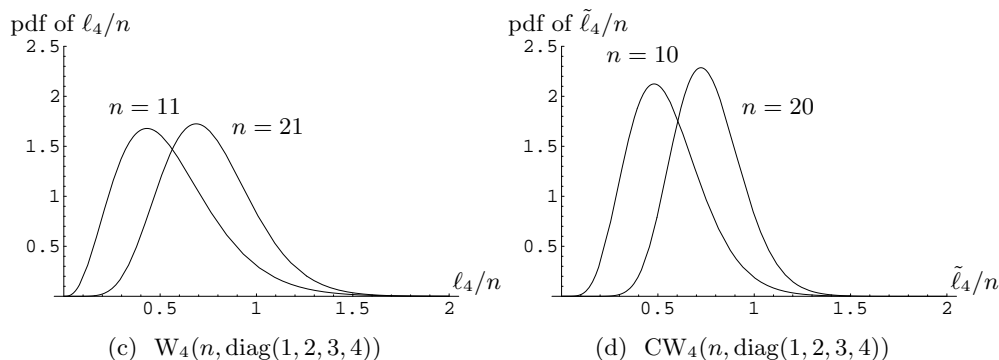


Figure 2. 最小固有値 \tilde{l}_m/n の密度関数のグラフ

の条件下で和をとることを意味する.

複素ウィシャート行列の最小固有値 \tilde{l}/n の密度関数のグラフを 図 2-(d) に示す.

6. 最小固有値分布の χ^2 近似

本節では、ウィシャート行列 \mathbf{W} の最小固有値の分布について、 χ^2 近似とその精度について議論する. 母集団の共分散行列 Σ の固有値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m$ とする.

定理 5 (最小固有値分布の χ^2 近似) 確率行列 \mathbf{W} が $W_m(n, \Sigma)$ 従うとき、 \mathbf{W} の最小固有値 l_m の分布は、 n が十分大きいとき、次の χ^2 分布で近似できる.

- (i) $\lambda = \frac{1}{2}(\lambda_1^{-1} + \lambda_2^{-1} + \dots + \lambda_p^{-1})$ とおく. このとき l_m の密度関数は、(6.1) 式で近似できる.

$$f(l_m) = \frac{\lambda^{\frac{1}{2}(n-m+1)}}{\Gamma(\frac{1}{2}(n-m+1))} l_m^{\frac{1}{2}(n-m+1)-1} e^{-\lambda l_m}. \tag{6.1}$$

- (ii) l_m/λ_m の分布は、 λ_m が他の固有値と離れ n が十分大きい場合、自由度 $n-m+1$ の χ^2 分布に従う.

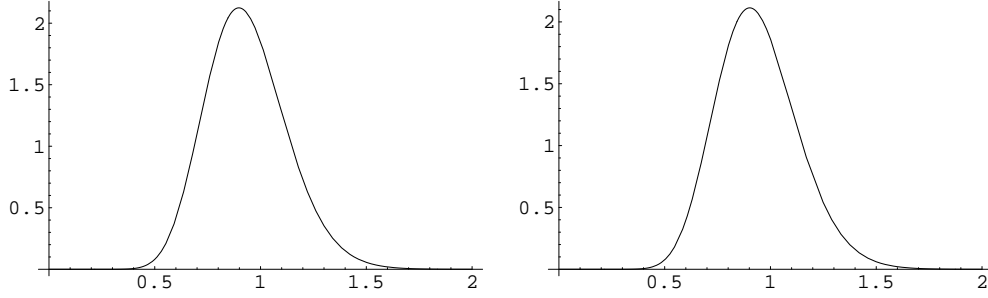
$$f(l_m) = \frac{1}{(2\lambda_m)^{\frac{1}{2}(n-m+1)}} l_m^{\frac{1}{2}(n-m+1)-1} \exp\left[-\frac{l_m}{2\lambda_m}\right]. \tag{6.2}$$

数値比較を行った結果、 λ_m が他の固有値と離れ n が十分大きい場合、(ii) による χ^2 近似が、(i) の χ^2 近似よりも精度が良いことを確認したので、以降、(ii) の近似について精密分布との比較などを行う.

図 3 に $m = 4$, $\Sigma = \text{diag}(5^2, 4^2, 3^2, 1^2)$, $n = 51$ のときの精密分布と自由度 48 の χ^2 分布を示す. 精密分布には $k = 92$ までの次数のゾーナル多項式が必要であり、1 次から 92 次までの分割の総数 $\sum_{j=1}^{92} \#P_4^j$ は約 1.67×10^6 である. 分布間距離としてコルモゴルフ-スミルノフ距離を

$$\epsilon = \max_{0 \leq x < \infty} \left| F_{l_m/n}(x) - F_{\chi_{n-m+1}^2}(x) \right|$$

とすると、図3の分布では、 $[0, 2]$ の範囲で $\epsilon = 6.93 \times 10^{-16}$ である。ここで、 $F_{\ell_m/n}(x)$ は ℓ_m/n の分布関数、 $F_{\chi_{n-m+1}^2}(x)$ は自由度 $n-m+1$ の χ^2 分布の分布関数を表す。また、表1には 100α パーセント点を示している。表1から、 χ^2 近似は 99%, 95%, 5%, 1% パーセント点で3桁の精度があることが分かる。



(a) ゾーナル多項式計算による精密分布 (b) 自由度 48 の χ^2 分布

Figure 3. $\mathbf{W} \sim W_4(51, \text{diag}(5^2, 4^2, 3^2, 1^2))$ における最小固有値 $\ell_4/51$ の分布

Table 1. パーセント点

$\mathbf{W} \sim W_4(51, \text{diag}(5^2, 4^2, 3^2, 1))$ の最小固有値 $\ell_4/51$

α	パーセント点		累積確率
	精密分布 (x_α)	χ_{48}^2	$F_{\chi_{48}^2}(x_\alpha)$
0.99	1.437	1.444	0.989
0.95	1.271	1.277	0.947
0.05	0.645	0.648	0.04784
0.01	0.549	0.552	0.00947

次に自由度 n が大きい場合の例として、 $n = 100$ において 10^6 回での正規乱数に基づくモンテカルロシミュレーションを行う。次元が低い場合として $m = 4$ 、 $\Sigma = \text{diag}(4^2, 3^2, 1.5^2, 1)$, $\text{diag}(4^2, 3^2, 2^2, 1)$, $\text{diag}(5^2, 4^2, 3^2, 1)$ の3通りとした。表2にシミュレーション結果を示す。シミュレーションでの 100α パーセント点を 10^6 個の最小固有値の並び替えで求めた。それを x_α^* で表す。さらに、このシミュレーションでのパーセント点 x_α^* における χ_{n-m+1}^2 での累積確率 $F_{\chi_{n-m+1}^2}(x_\alpha^*)$ を求めた。シミュレーション回数が 10^6 であるので、その精度は3桁程度である。 χ_{97}^2 とシミュレーション結果が2, 3桁合っていることが分かる。

さらに、次元を $m = 10$ として同様のシミュレーションを行った。母集団の共分散行列 Σ の固有値は、上から6個を $\lambda_1 = 10^2$, $\lambda_2 = 9^2$, $\lambda_3 = 8^2$, $\lambda_4 = 7^2$, $\lambda_5 = 6^2$, $\lambda_6 = 5^2$ に固定する。残りの固有値は $(\lambda_7, \lambda_8, \lambda_9, \lambda_{10}) = (4.5^2, 4^2, 3^2, 1)$, $(4^2, 3^2, 2^2, 1)$, $(4^2, 3^2, 1.5^2, 1)$ に変化した。表3から、 λ_9 が $\lambda_{10} = 1$ に離れると精度の向上が見られる。

Table 2. 10^6 回のシミュレーションでのパーセント点 (x_α^*) と χ_{97}^2 との比較 (1) $\mathbf{W} \sim W_4(100, \Sigma)$ での \mathbf{W} の最小固有値 ℓ_4 のパーセント点

Σ	diag($4^2, 3^2, 1.5^2, 1$)		diag($4^2, 3^2, 2^2, 1$)		diag($5^2, 4^2, 3^2, 1$)	
	x_α^*	$F_{\chi_{97}^2}(x_\alpha^*/n)$	x_α^*	$F_{\chi_{97}^2}(x_\alpha^*/n)$	x_α^*	$F_{\chi_{97}^2}(x_\alpha^*/n)$
0.99	132.182	0.9898	131.772	0.9891	130.922	0.9876
0.975	125.962	0.9743	125.569	0.9729	124.803	0.9698
0.95	120.794	0.9487	120.419	0.9462	119.719	0.9413
0.90	115.019	0.8976	114.667	0.8936	114.032	0.8859
0.50	96.130	0.4941	95.846	0.4859	95.359	0.4719
0.10	79.460	0.0975	79.213	0.0940	78.863	0.0893
0.05	75.129	0.0486	74.876	0.0465	74.563	0.0439
0.02	71.518	0.0243	71.283	0.0232	70.971	0.0217
0.01	67.427	0.0096	67.208	0.0091	66.943	0.0085

 x_α^* : 10^6 回のシミュレーションでのパーセント点Table 3. 10^6 回のシミュレーションでのパーセント点 (x_α^*) と χ_{91}^2 との比較 (2) $\mathbf{W} \sim W_{10}(100, \Sigma)$ での \mathbf{W} の最小固有値 ℓ_{10} のパーセント点

$\lambda_1 = 10^2, \lambda_2 = 9^2, \lambda_3 = 8^2, \lambda_4 = 7^2, \lambda_5 = 6^2, \lambda_6 = 5^2$						
	diag($\lambda_1, \dots, \lambda_6, 4.5^2, 4^2, 3^2, 1$)		diag($\lambda_1, \dots, \lambda_6, 4^2, 3^2, 2^2, 1$)		diag($\lambda_1, \dots, \lambda_6, 4^2, 3^2, 1.5^2, 1$)	
100α	x_α^*	$F_{\chi_{91}^2}(x_\alpha^*/n)$	x_α^*	$F_{\chi_{91}^2}(x_\alpha^*/n)$	x_α^*	$F_{\chi_{91}^2}(x_\alpha^*/n)$
0.99	125.007	0.9895	124.486	0.9886	123.644	0.9870
0.975	118.962	0.9738	118.505	0.9720	117.755	0.9689
0.95	113.921	0.9476	113.505	0.9447	112.825	0.9397
0.90	108.318	0.8959	107.924	0.8912	107.289	0.8831
0.50	90.017	0.4905	89.699	0.4811	89.222	0.4668
0.10	73.909	0.0957	73.675	0.0924	73.318	0.0874
0.05	69.731	0.0475	69.507	0.0456	69.185	0.0429
0.02	66.225	0.0235	66.014	0.0225	65.739	0.0211
0.01	62.322	0.0093	62.098	0.0088	61.901	0.0083

 x_α^* : 10^6 回のシミュレーションでのパーセント点

参考文献

- [1] Constantine, A. G. (1963). Some noncentral distribution problems in multivariate analysis, *Ann. Math. Statist.*, **34**, 1270-1285.
- [2] Fujikoshi, Y. (1977). Asymptotic expansions for the distribution of the latent roots of the Wishart matrix with multiple population roots. *Ann. Inst. Statist. Math.*, **29**, Part A, 379-387.
- [3] Hashiguchi, H. and Niki, N. (1997). Algebraic algorithm for calculating coefficients of zonal polynomials of order three, *J. Japan. Soc. Comput. Statist.*, **10**, 41-46.
- [4] Hashiguchi, H., Nakagawa, S. and Niki, N. (2000). Simplification of the Laplace-Beltrami operator. *Mathematics and Computers in Simulation* **51**, 489-496.
- [5] Hashiguchi, H. and Niki, N. (2006). Numerical computation on distributions of the largest and the smallest latent roots of the Wishart Matrix, *J. Japan. Soc. Comput. Statist.*, **19**, 45-56.
- [6] 橋口 博樹 (2009). ゾーナル多項式生成の計算量について, 日本計算機統計学会第 23 回シンポジウム講演論文集, 221-224.
- [7] 早川 毅 (1971). 正值対称行列上の確率分布およびそれに関連する分布, 数学 **23**, 1-16.
- [8] 早川 毅 (1983). 正值対称行列上の確率分布およびそれに関連する分布 II, 一橋大学研究年報, 自然科学研究 22. 117-202
- [9] Jack, H. (1970). A class of symmetric polynomials with a parameter, *Proc. Roy. Soc. Edinb. (A)*, **69**, 1-18.
- [10] Jack, H. (1972). A surface integral and symmetric functions, *Proc. Roy. Soc. Edinb. (A)*, **69**, 347-363.
- [11] James, A. T. (1960). The distribution of the latent roots of the covariance matrix, *Ann. Math. Statist.*, **31**, 151-158.
- [12] James, A. T. (1964). Distribution of matrix variates and latent roots derived from normal samples, *Ann. Math. Statist.*, **35**, 475-497.
- [13] James, A. T. (1968). Calculation of zonal polynomial coefficients by use of the Laplace-Beltrami operator, *Ann. Math. Statist.*, **39**, 1711-1718.
- [14] Khatri, C. G. (1972). On the exact finite series distribution of the smallest or the largest root of matrices in three situations, *J. Multivariate Anal.*, **2**, 201-207.
- [15] Kendall, M. G. and Stuart, A. (1977). *Advanced Theory of Statistics*, **1**, 4th ed., Charles Griffin.
- [16] Kowata, A. and Wada, R. (1992). Zonal polynomials on the space of 3×3 positive definite symmetric matrices, *Hiroshima Math. J.*, **22**, 433-443.
- [17] Koef, P. and Edelman, A. (2006). The efficient evaluation of the hypergeometric function of a matrix argument, *Mathematics of Computation*, **75**, no. 254, 833-846.
- [18] McLaren, M. L. (1976). Algorithm AS 94: Coefficients of the Zonal Polynomials, *J. Roy. Statist. Soc. C*, **25**(1), 82-87.
- [19] Muirhead, R. J. (1982). *Aspects of multivariate statistical theory*. John Wiley, New York.

- [20] 中川重和, 仁木直人 (1991). 対称式の変換アルゴリズムとその多変量統計量分布論への応用, 計算機統計学, 第4巻, 第1号, 35-43.
- [21] 永尾 太郎 (2007). ランダム行列百科撩乱, 数理科学, 特集/ランダム行列の広がり, 2007年2月号, 5-11.
- [22] Ratnarajah, T., Vaillancourt, R. and Alvo, M. (2005). Eigenvalues and condition numbers of complex random matrices, *SIAM J. MATRIX ANAL. APPL.* **26**, no. 2, 441-456.
- [23] Stanley, R. P. (1989). Some combinatorial properties of Jack symmetric functions, *Adv. Math.*, **77**, 76-115.
- [24] Sugiura, N. (1973). Derivatives of the characteristic root of a symmetric or a Hermitian matrix with two applications in multivariate analysis. *Communications in Statistics*, **1**. 393-417.
- [25] Sugiura, N. (1990). Graphs of the distributions of bivariate Wishart roots and their cumulants. *Journal of the Japan Statistical Society* **20**, 117-136.
- [26] Sugiyama, T. (1967). On the distribution of the largest latent roots of the covariance matrix, *Ann. Math. Statist.*, **38**, 1148-1151.
- [27] Sugiyama, T. (1979). Coefficients of zonal polynomials of order two. *Computer Science Monographs*, **No 12**.
- [28] Sugiyama, T., Fukuda, M. and Takeda, Y. (1999). Recurrence relations of coefficients of the generalized hypergeometric function in multivariate analysis. *Communication in Statistics, Theory and Methods* **28**, 825-837.