デモ: $X_i$ 平均 0, 共分散行列 $\Sigma$ の $m$ 次元ガウス分布に従う random vector (縦ベクトル). $X = (X_1, \ldots, X_n)$ とおいて, $m \times m$ random 行列 $W = XX'$ を考える.[1] $W$ の最大固有値が $x$ 以下である確率は?

```
rpwishart<-function(lambda=3,sigma=diag(c(1/2,1/4,1/6)),
n=5,try=100) #シミュレーション
{count<-0;r<-rWishart(try,df=n,Sigma=sigma);
 for (k in seq(1,try)) {
   ell1 <- max(eigen(r[,,k])$values);
   if (ell1 < lambda) count<-count+1; }
 return(count/try) }
```

```
hgm.pwishart(m=3,n=5,beta=c(1,2,3),q=3)
```

# matrix HG の数値計算. `library("hgm");`

[1] Wishart 分布. なお $X'$ は $X$ の転置

Constantine 1963. 自由度 $n$, $m \times m$ 共分散行列 $\Sigma$ できまる Wishart 分布に従う $m \times m$ 行列の最大固有値 $\ell_1$ が $x$ より小さい確率は

$$P[\ell_1 < x] = C \exp\left(-\frac{x}{2}\mathrm{tr}\,\Sigma^{-1}\right) x^{\frac{1}{2}nm} {}_1F_1\left(\frac{m+1}{2}; \frac{n+m+1}{2}; \frac{x}{2}\Sigma^{-1}\right) \tag{1}$$

${}_1F_1$ は行列引数の超幾何関数.

$$C = \frac{\Gamma_m\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2^{\frac{1}{2}nm}(\det\Sigma)^{\frac{1}{2}n}\Gamma_m\left(\frac{n+m+1}{2}\right)}, \quad \Gamma_m(t) = \pi^{m(m-1)/4}\prod_{i=1}^{m}\Gamma(t-(i-1)/2)$$

前半: (1) の証明のスケッチ.
後半: (1) の効率的計算手法. ソフトウエア. 展開.

Jack symmetric polynomial の漸化式.

$$J_k^{(\alpha)}(x_1) = x_1^k (1+\alpha)_k$$

$$J_\kappa^{(\alpha)}(x_1, \ldots, x_m) = \sum_\mu J_\mu^{(\alpha)}(x_1, \ldots, x_{m-1}) x_m^{|\kappa/\mu|} \beta_{\kappa\mu} \qquad (2)$$

$\kappa_1 \geq \mu_1 \geq \kappa_2 \geq \mu_2 \geq \cdots$.

C-normalization. $C_\kappa(x) = C_\kappa^{(2)}(x) = c_\kappa J_\kappa^{(2)}(x)$.

Matrix ${}_1F_1(a, c; Y)$ の級数表示.[2]

$$\sum_{k=0}^\infty \sum_{\kappa, |\kappa|=k} \frac{(a)_\kappa}{(c)_\kappa} \frac{C_\kappa(Y)}{k!}, \qquad (a)_\kappa = \frac{\Gamma_m(a,\kappa)}{\Gamma_m(a)}$$

Muirhead (1970) の微分方程式.

$$g_i = y_i \partial_i^2 + (c - y_i)\partial_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1, j\neq i}^m \frac{y_j}{y_i - y_j}(\partial_i - \partial_j) - a \qquad (3)$$

<u>Kummer relation. $Y$ と $-Y$ の変換.</u> Herz (1955) pp487–488.

[2] $\Gamma_m(t, \kappa)$: $\kappa$ つきは $t - (i-1)/2$ を $t + k_i - (i-1)/2$ に

$\boxed{\text{ノート}}$ $\beta_{\kappa\mu}$ は, $\kappa, \mu$ で決まる数.

$$\beta_{\kappa\mu} = \frac{\prod_{(i,j)\in\kappa} B^{\kappa}_{\kappa\mu}(i,j)}{\prod_{(i,j)\in\mu} B^{\mu}_{\kappa\mu}(i,j)}$$

$$B^{\nu}_{\kappa\mu} = \kappa'_j - i + \alpha(\kappa_i - j + 1) \quad \kappa'_j = \mu'_j$$

$$B^{\nu}_{\kappa\mu} = \kappa'_j - i + 1 + \alpha(\kappa_i - j) \quad \text{otherwise}$$

$\kappa'$ は $\kappa$ の conjugate partition (Young 図を転置したもの).
C normalization は Jack に

$$\frac{\alpha^{|\kappa|}(|\kappa|)!}{j_\kappa}, \quad j_\kappa = \prod_{(i,j)\in\kappa} (\kappa'_j - i + \alpha(\kappa_i - j + 1))(\kappa'_j - i + 1 + \alpha(\kappa_i - j))$$

を掛けたもの.

$S$ は $m \times m$ 対称行列. $Z_\kappa(S) = J_\kappa^{(2)}(S)$ とおく.

$$Z_\kappa(H'SH) = Z_\kappa(S), \quad H \in O(m) \quad \color{red}{O(m)\ \text{不変性}}$$

$$\begin{aligned}
Z_{(2,0)} &= 3x_1^2 + 2x_1x_2 + 3x_2^2 \\
Z_{(1,1)} &= 2x_1x_2 \\
Z_{(3,0)} &= 15x_1^3 + 9x_1^2x_2 + 9x_1x_2^2 + 15x_2^3 \\
Z_{(2,1)} &= 4x_1^2x_2 + 4x_1x_2^2
\end{aligned}$$

$x_i$ は対称行列 $S$ の固有値. 固有値の対称式なので, $S$ の元の多項式として書ける.

```
import("tk_jack.rr")$
tk_jack.zonal([2,1],2); // [2,1] は partition. 2 変数.
```

二つの基本公式:

$$(\mathrm{tr}(S))^k = \sum_{\kappa,|\kappa|=k} C_\kappa(S)$$

James 1960(doubling principle). $C_\kappa(ST) := C_\kappa(T^{1/2}ST^{1/2})$.

$$\int_{O(m)} C_\kappa(H'SHT)d(H) = C_\kappa(S)C_\kappa(T)/C_\kappa(I)$$

以下 Constantine 1963. Laplace 変換に対してよい振る舞い. [3]

$$\int_{S>0} \exp(-\mathrm{tr}(RS))|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(ST)dS = \Gamma_m(t,\kappa)|R|^{-t} C_\kappa(TR^{-1}) \tag{4}$$

Proof sketch. 左辺を $f(T)$ とおいて, $T \to H'TH$ と変数変換し, $O(m)$ の上で積分. $f(T) = [f(I)/C_\kappa(I)]C_\kappa(T)$ となる. あとは定数項をがんばって決める. //

[3] $\int_{s>0} \exp(-rs)s^{t-1}ds = \Gamma(t)s^{-t}$,
$\Gamma_m(t,\kappa) = \pi^{m(m-1)/4}\prod_{i=1}^m \Gamma(t+k_i-(i-1)/2)$

$\boxed{\text{ノート}}$ $R = I$(単位行列) の時.

$$\begin{aligned} f(H'TH) &= \int_{S>0} \exp(-\mathrm{tr}(S))|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(SH'TH)dS \\ \text{不変性, 別紙} &= \int_{S>0} \exp(-\mathrm{tr}(S))|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(HSH'THH')dS \\ &= \int_{S>0} \exp(-\mathrm{tr}(S))|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(HSH'T)dS \end{aligned}$$

右辺を $H'$ で (順序交換して) 積分すると, James 1960 の公式より, $\int_{S>0} \exp(-\mathrm{tr}(S)|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(S) dS C_\kappa(T)/C_\kappa(I)$. 積分で $HSH'$ を新しい変数 $S$ と変数変換すると, $\mathrm{tr}(HSH') = \mathrm{tr}(SH'H) = \mathrm{tr}(S)$ かつ $dS$ が変化しないので $f(H'TH) = f(T)$.

$\boxed{\text{ノート}}$ $C(S(H'TH))$ は $C((H'TH)^{1/2}S(H'TH)^{1/2})$ の省略記法なのでもうすこし慎重に計算が必要. まず, $(H'TH)^{1/2} = H'T^{1/2}H$.

> $T^{1/2}$ は *pos sym* な $T$ に対して (対角化する行列によらず) 一意的に定まる. $L'(H'TH)L = T_\lambda$ と対角化すると, $(H'TH)^{1/2}$ は定義より, $LT_\lambda^{1/2}L'$, $L \in O(m)$ — (a), $T_\lambda$ は $T$ の固有値を並べたもの ($H'TH$ の固有値とも一致).
> $(HL)'T(HL) = T_\lambda$ なので
> $T^{1/2} = (HL)T_\lambda^{1/2}(HL)' = H(LT_\lambda^{1/2}L')H'$. $H', H$ を左右から掛けると $H'T^{1/2}H = LT_\lambda^{1/2}L'$. これは (a) より $(H'TH)^{1/2}$ に等しい.

$C((H'TH)^{1/2}S(H'TH)^{1/2}) =_{\text{上で証明したこと}}$
$C((H'T^{1/2}HSH'T^{1/2}H)$. $O(m)$ 不変性よりこれは次に等しい.

$$C(H(H'T^{1/2}HSH'T^{1/2}H)H') = C(T^{1/2}HSH'T^{1/2}) = C(HSH'T).$$

(matrix) Laplace 変換. $Z$ を complex symmetric matrix として,

$$L[f](Z) = \int_{S>0} \mathrm{etr}(-SZ) f(S) dS^4$$

$$\int_0^I |S|^{t-(m+1)/2} |I-S|^{u-(m+1)/2} C_\kappa(RS) dS = \frac{\Gamma_m(t,\kappa)\Gamma_m(u)}{\Gamma_m(t+u,\kappa)} C_\kappa(R) \tag{5}$$

ここで, $\Gamma_m(u) = \pi^{m(m-1)/4} \prod_{i=1}^m \Gamma(u-(i-1)/2)$

Proof sketch. (4) と同様な論法で $C_\kappa(R)$ をくくりだせる.

$S = R^{-1/2} T R^{-1/2}$ と変数変換. Laplace 変換は積と convolution を交換する. 積分を $C_\kappa(T)|T|^{t-(m+1)/2}$ と $|T|^{u-(m+1)/2}$ の convolution とみなす. これの Laplace 変換はこの二つの関数を Laplace 変換してからかけたものに同じ. (4) を複数回適用して結果を得る. //

[4] $\mathrm{etr}(X) = \exp(\mathrm{Tr}(X))$

$\boxed{\text{ノート}}$ (4) と同じ論法の部分.

$f(R) = \int_0^I |S|^{t-(m+1)/2}|I-S|^{u-(m+1)/2}C_\kappa(RS)dS$ とおく. $R$ を $H'RH$, $H \in O(m)$ と置き換えると, 積分の中の $C_\kappa$ は $C_\kappa(H'RHS)$ となる. James1960 の公式を使えば, $O(m)$ での積分で, これは $C_\kappa(R)C_\kappa(S)/C_\kappa(I)$ に等しい. よって $R$ が変数分離されて,

$$\int_{O(m)} f(H'RH)d(H) = \frac{f(I)}{C_\kappa(I)}C_\kappa(R)$$

と書ける. 一方,

$C_\kappa(H'RHS) =_{\text{不変性}} C_\kappa(HH'RHSH') = C_\kappa(RHSH')$. $S$ を $HSH'$ と変数変換すると, $dS$ は変わらず, $I - HSH' = H(I-S)H'$ なので, $f(H'RH) = f(R)$ である.

ノート あとは $R$ に依存しない定数部分をきめれば良い.

公式 (Muirhead p.58, @s) $X = AYB$ の時,

$$(dX) = |A|^m |B|^n (dY)$$

ここで, $A$ は $m \times m$ 行列, $B$ は $n \times n$ 行列.
$(dX) = \prod_{ij} dX_{ij}$.

$S = R^{-1/2} T R^{-1/2}$ と変数変換する. 上の公式から $dS = |R|^{-m} dT$ となる ($(dS)$ は $dS$ と括弧を省略. 対称行列の場合は $(dX) = \prod_{i \le j} dX_{ij}$ としてるので, $dS = |R|^{(m+1)/2} dT$. また,

$$|I - S|^\alpha = |R^{-1/2}(R - T)R^{-1/2}|^\alpha = |R|^{-\alpha} |R - T|^\alpha$$

$S > 0, I - S > 0$ の条件は, $R^{-1/2} T R^{-1/2}$, $R^{-1/2}(R - T)R^{-1/2} > 0$ の条件に. つまり $T > 0$, $R - T > 0$. あとは proof sketch の方針に従い, 次を用いる.

$$L\left[\int_0^R f(T) g(R - T) dT\right] = L[f] L[g]$$

$\boxed{\text{ノート}}$

$$
\begin{aligned}
& L\left[\int_0^R f(T)g(R-T)dT\right] \\
= \ & \int_{R>0}\int_0^R \mathrm{etr}(-ZR)f(T)g(R-T)dTdR \\
& x = T,\ y = R - T \text{ とおくと積分領域は } x, y > 0 \\
= \ & \int_{x>0} \mathrm{etr}(-Zx)f(x)dx \cdot \int_{y>0} \mathrm{etr}(-Zy)g(y)dy
\end{aligned}
$$

Constantine 1963 Th 7. $\mathrm{etr}(A) = \exp(\mathrm{tr}(A))$ とおく．このとき

$$\int_0^{\Omega} \mathrm{etr}(-\Lambda S)|S|^{t-(m+1)/2} dS = c|\Omega|^t {}_1F_1(t; t+(m+1)/2; -\Omega^{1/2}\Lambda\Omega^{1/2}) \tag{6}$$

$c = \frac{\Gamma_m(t)\Gamma_m((m+1)/2)}{\Gamma_m(t+(m+1)/2)}$.

Proof sketch. $S = \Omega^{1/2} T \Omega^{1/2}$ と変数変換．積分領域は $0 < T < I$.

$$\mathrm{etr}(-\Lambda S) = \mathrm{etr}(-\Omega^{1/2}\Lambda\Omega^{1/2} T) = \sum_k \sum_\kappa \frac{C_\kappa(-\Omega^{1/2}\Lambda\Omega^{1/2} T)}{k!}$$

$T$ をまた $S$ と書く．(5) を用いて

$$|S|^{t-(m+1)/2} C_\kappa(RS), \quad R = -\Omega^{1/2}\Lambda\Omega^{1/2}$$

を項別積分．すると, ($\Omega$ 定数) $\frac{\Gamma_m(t,\kappa)\Gamma_m((m+1)/2)}{\Gamma_m(t+(m+1)/2)} C_\kappa(R)$ を得る．

//

$m$ 次元の normal distribution (平均 0, 共分散行列 $\Sigma_{ij} = E[x_i x_j]$) に従う 独立な random variable (たてベクトル) を $n$ 個 もってくる. ならべたものを $X$ と書く. $S = XX'$ の従う分布が Wishart 分布で,

$$|S|^{(n-m-1)/2}\mathrm{etr}\left(-\frac{1}{2}\Sigma^{-1}S\right)$$

の定数倍.

Proof sketch. cf. Muirhead p.85 Th 3.2.1. $X' = H_1 T$, $T$ は $m \times m$ 上三角行列, $H_1$ は $m$ 個の $n$ 次元縦ベクトルで伸ばすと $O(n)$ になるものを持ってくる. $dX \sim dSH_1' dH_1$ となってる. $H_1$ について積分 (Stiefel manifold での積分) すれば $S$ についての確率密度が出る. //

(6) の被積分関数 $\mathrm{etr}(-\Lambda S)|S|^{t-(m+1)/2}dS$ は Wishart 分布 (normalize してない).

以上で, (1) の証明の概要終了.

(1) の効率的計算手法. ソフトウエア. 展開.

**Theorem**

*graded reverse lexicographic order* $\succ$ に関して *Muirhead* の方程式系 *(3)* $\{g_1, \ldots, g_m\}$ は有理関数係数の微分作用素環でグレブナー基底となる. *Initial term* は $\langle \partial_1^2, \ldots, \partial_m^2 \rangle$. *Standard monomials* は

$$\{\partial_{i_1}\partial_{i_2}\ldots\partial_{i_k} \mid 1 \leq i_1 < \cdots < i_k \leq m, \; k \leq m\},$$

の $2^m$ 個.

Proof sketch. S-pair 判定法を適用. //

$F$ を standard monomials を縦に並べたベクトルを ${}_1F_1$ に作用したものとする. この定理から Pfaffian $dF = (\sum P_i dy_i)F$ が構成できる. さらに $g_i$ が都合のいい形をしてるので, $P_i$ が効率よく計算できる。

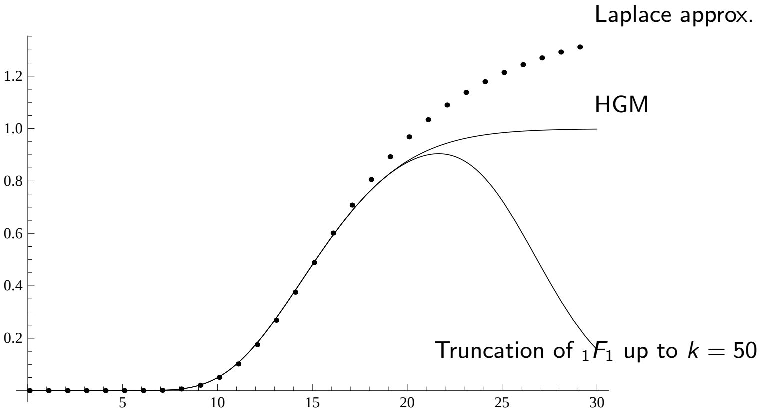
$\Sigma^{-1} = \mathrm{diag}(\beta_1, \ldots, \beta_m)$ とする．$G = \exp(x/2\mathrm{tr}\Sigma^{-1})x^{-mn/2}$. $P_\beta = \sum P_i|_{y=x\beta_i/2} - G^{-1}G'E$ (Pfaffian の line への制限を Gauge 変換したもの) とおく．初期値は Koev-Edelman 2006. ODE $dF/dx = P_\beta F$ を Runge-Kutta 法で解く.

**Theorem (安定性)**

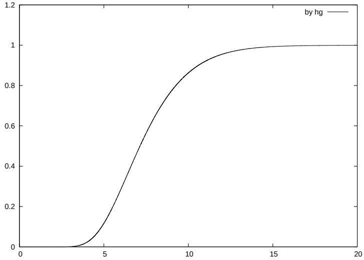
$x \to \infty$ の時

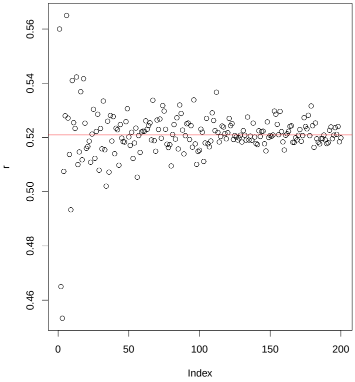
$$P_\beta = A_0 + O(1/x),$$

ここで $A_0$ の $2^m$ 個の固有値は, $-e_1\beta_1 - \cdots - e_m\beta_m$, $(e_1, \ldots, e_m) \in \{0, 1\}^m$.




$m = 2, n = 30, \Sigma = \mathrm{diag}(1/2, 1/4)$.

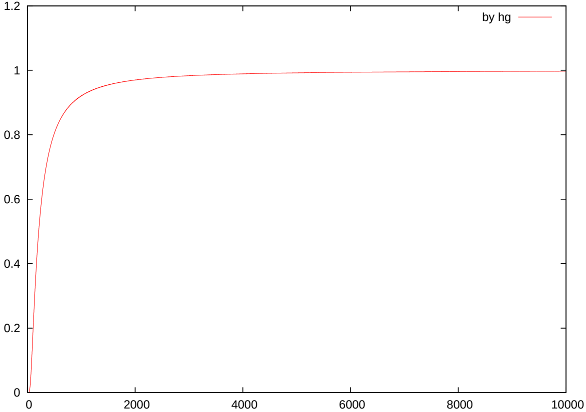



$m = 10, n = 12, \beta = (1, 2, \ldots, 10)$.

$P(\lambda_1(W) < 3)$ (最大固有値が 3 以下である頻度/総試行回数) の値. 試行 20,000 回までのシミュレーション値.

$P(\ell_1(W_1 W_2^{-1}) \leq x)$ by ${}_2F_1$.




$\Pr(\ell_1 < x)$, $m = 10$, $n_1 = 11$, $n_2 = 12$,

$$\Sigma_2^{-1}\Sigma_1 = \mathrm{diag}(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10)$$

13 min 15 sec (Intel Xeon CPU (2.70GHz), 256 G memory).

主な展開.

1. F.H.Danufane, K.Ohara, N.Takayama, (C.Siriteanu). Holonomic Gradient Method for the Distribution Function of the Largest Root of Complex Non-central Wishart Matrices, arxiv:1707.02564. 複素 Wishart.
2. https://cran.r-project.org/web/packages/hgm/index.html ソフトウエア
3. H.Hashiguchi, N.Takayama, A.Takemura. Distribution of Ratio of two Wishart Matrices and Evaluation of Cumulative Probability by Holonomic Gradient Method, arxiv:1610.09187. ${}_2F_1$
4. M.Noro. System of Partial Differential Equations for the Hypergeometric Function 1F1 of a Matrix Argument on Diagonal Regions. ISSAC 2016. 特異点に制限
5. H.Hashiguchi, Y.Numata, N.Takayama, A.Takemura. Holonomic gradient method for the distribution function of the largest root of a Wishart matrix, Journal of Multivariate Analysis, 117, (2013) 296-312. 本日