2次形式の統計的独立

2次形式の統計的独立

今　川　　正

ここにコクランの定理 Cochran's theorem の1つの証明について述べる。この定理もその証明も周知のものであるが，工夫を加えた証明方法およびその適用を記しておく。はじめにつぎのものを定義しておく。

一般単位行列

n 次の単位行列において，対角線上の1のならびのうち r 個を残し，他の $n-r$ 個の1を0とおきかえたものを n 次の一般単位行列 generalized unit matrix とよぶ。$0<r<n$。必要に応じて，r 個の1を上へあるいは下へ整列したものを使用する。

われわれのこれから取りあげる対称ベキ等行列は回転行列[注1)]ではさむことによって一般単位行列に変えることができる。この逆も成立する。これをつぎの補助定理Aにとりあげておく。

補助定理A[注2)]

$Z\sim N(O,I)$ とするとき，つぎの (a), (b), (c) は同値である。

(a) $A'=A,\ A^2=A$

(b) $RAR'=E \qquad R'R=I \qquad detR=1$

(c) $Z'AZ\sim\chi^2(r) \qquad r=trA$

注1)　直交行列は $R'R=1$ の性質をもつものであるが，それに更に $detR=1$ の条件を付加したものを回転行列とよぶ。

注2)　記号 I は単位行列，E は一般単位行列（整列されていないもの，上あるいは下に整列されているもの），R は回転行列，D は対角行列をあらわすために用いる。このほか，A, B, M, V で一般の対称行列をあらわす。また Y, Z, ε でベクトルをあらわす。いずれも n 次のものをあらわすが，n 次以外のものをあらわすときには添字で次数を示すことにする。末尾の定理の適用の節においては係数行列 X, U, K を用いるが，それぞれを成分を用いて定義しておいた。

証明

(a)→(b)

対称行列 A を回転行列 R ではさんで対角化することができる。このときベキ等性は失なわれないのでこの対角行列は一般単位行列である。

(b)→(c)

回転変換 $Y=RZ$ をほどこし，つぎのものをえることができる。

$$Z'AZ=Y'RAR'Y=Y'EY$$

ここで $Z\sim N(O, I)$ のとき $RZ=Y\sim N(O,I)$ および $trE=trA=r$ を考慮すると $Z'AZ\sim\chi^2(r)$ がえられる。

(c)→(b)

$Z'AZ$ のモーメント母関数は A の特性根を $d_1, d_2, \cdots\cdots, d_n$ とするときつぎのようにあらわされる。

$$M(\theta)=\{\Pi(1-2\theta d_i)\}^{-1/2}$$

他方，自由度 r のカイ2乗分布のモーメント母関数は

$$(1-2\theta)^{-r/2}$$

とあらわされる。この2つが同じものであるためには，n 個の特性根のうち r 個が1，残余が0でなければならない。これは A を回転行列ではさんで一般単位行列とすることができることを意味している。

(b)→(a)

$$RAR'=E$$

$$A=R'ER$$

$$A'=R'ER=A$$

$$A^2=R'ERR'ER=R'ER=A$$

補助定理B

$$Z'AZ\sim\chi^2(r)$$

$$Z'BZ\sim\chi^2(s)$$

この2つの2次形式が独立のとき，つぎのものが成立する。

$$Z'AZ+Z'BZ\sim\chi^2(r+s)$$

証明

このカイ 2 乗分布の加法性の定理および，モーメント母関数を用いるその証明は周知であるので証明を省略しておく。

定理 1

$Z \sim N(O, I)$

$Z'Z = Z'AZ + Z'BZ$

$Z'AZ \sim \chi^2(r)$

この仮定のもとでつぎの（1），（2）が成立する。

（1） $Z'BZ \sim \chi^2(n-r)$

（2） $Z'AZ$ と $Z'BZ$ とが統計的に独立。

証明

まず（1）を証明し，それにつづいて（2）を証明する。回転行列 R を用いてつぎのようにあらわしておく。

$$Z'AZ = Z'R'RAR'RZ$$
$$= Z'R' \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & O \end{bmatrix} RZ$$

必要に応じてあらかじめ上に整列しておき，そのあとで回転行列を用いるものとする。

他方で，単位行列をつぎのように分割しておく。

$$I = \begin{bmatrix} Ir & O \\ O & O \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} O & O \\ O & I_{n-r} \end{bmatrix}$$

右辺第 1 項は RAR' と同じである。この式を上で用いた $Z'R'$ ではさんでつぎのものをえる。

$$Z'Z = Z'R' \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & O \end{bmatrix} RZ + Z'R' \begin{bmatrix} O & O \\ O & I_{n-r} \end{bmatrix} RZ$$
$$= Z'AZ + Z'R'ERZ$$

ここに $RZ \sim N(O, I)$ であるから

$$Z'R'ERZ \sim \chi^2(n\text{-}r)$$

をえる。そして定理に述べてある条件 $Z'Z = Z'AZ + Z'BZ$ と比較してつぎの

ものをえることができる。

$$Z'BZ=Z'R'ERZ\sim\chi^2(n-r)$$

つづいて（2）を証明するためにつぎの関係に注目する。

$$Z'R'(RAR')(RAR')RZ$$

$$=ZR'\begin{bmatrix}I_r & O\\ O & O\end{bmatrix}\begin{bmatrix}I_r & O\\ O & O\end{bmatrix}RZ$$

において

$$RAZ=\begin{bmatrix}I_r & O\\ O & O\end{bmatrix}RZ。$$

$$Z'R'(RBR')(RBR')RZ$$

$$=Z'R'\begin{bmatrix}O & O\\ O & I_{n-r}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}O & O\\ O & I_{n-r}\end{bmatrix}RZ$$

において

$$RBZ=\begin{bmatrix}O & O\\ O & I_{n-r}\end{bmatrix}RZ。$$

ここにつくった2つのベクトルの和はつぎの正規分布をもつ。

$$RAZ+RBZ=RZ\sim N(O,I)$$

すなわち，RAZ と RBZ は独立の規準正規変数 n 個を2分割していることがみられる。こうして

$$(RAZ)'RAZ=Z'AZ$$

$$(RBZ)'RBZ=Z'BZ$$

が独立のカイ2乗分布をもっていることがわかる。

以下に述べる3つの定理において，条件式 $Z'Z=Z'AZ+Z'BZ$ の左辺についての制約を順にゆるめてゆき，最後にはこの条件式を取り除いてしまって，$Z'AZ$ と $Z'BZ$ との統計的独立についてみてゆく。そこで使用する補助定理をつぎに述べておく。

補助定理C

つぎの行列 A が対称性，べき等性をもつものとする。

$$A=\begin{bmatrix}a_{11}\cdots a_{1n}\\ \cdots\\ a_{n1}\cdots a_{nn}\end{bmatrix}$$

$A'=A,\ A^2=A.$

このとき A の対角成分に0のものがあり $a_{kk}=0$ とすると，a_{kk} を通る行上のすべての成分，a_{kk} を通る列上のすべての成分は0である。

$$a_{1k}=a_{2k}=\ \cdots\ =a_{nk}=0$$

$$a_{k1}=a_{k2}=\ \cdots\ =a_{kn}=0$$

証明

行列 A の列 k の成分よりなる列べくベクトルを b_k と記す。

$$b'_k=[a_{1k}, a_{2k}, \cdots, a_{nk}] \quad k=1, 2, \cdots, n$$

これを用いると，A はつぎのようにあらわされる。

$$\begin{aligned} A&=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ & \cdots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \\ &=[b_1 \ \cdots \ b_n] \\ A'A&=[b_1 \ \cdots \ b_n]' \ [b_1 \ \cdots \ b_n] \\ &=\begin{bmatrix} b'_1b_1 & \cdots & b'_1b_n \\ & \cdots & \\ b'_nb_1 & \cdots & b'_nb_n \end{bmatrix} \\ &=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ & \cdots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

この最後の等号において $A'=A$, $A^2=A$, したがって $A'A=A$ の性質を用いた。ここに対角成分についてつぎの関係が成立していることがみられる。

$$a_{kk}=b'_kb_k=\sum_j a_{jk}^2$$

それで $a_{kk}=0$ のときに

$$a_{1k}=a_{2k}=\cdots=a_{nk}=0$$

でなければならない。また $A'=A$ より

$$a_{k1}=a_{k2}=\cdots=a_{kn}=0$$

でなければならない。

定理2

$$Z \sim N(O, I)$$

$$E = \begin{bmatrix} I_p & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

$$Z'EZ = Z'AZ + Z'BZ$$

$$Z'EZ \sim \chi^2(p)$$

$$Z'AZ \sim \chi^2(r)$$

この仮定のもとでつぎのものが成立する。

(1) $Z'BZ \sim \chi^2(p-r)$

(2) $Z'AZ$ と $Z'BZ$ とが統計的に独立。

定理1と比較すると，そこでの単位行列がここでは一般単位行列に変っていることがみられる。

証明

$$Z'EZ = Z'(A+B)Z$$

$$E = A+B$$

ここに E, A, B はいずれも正値半定符号の行列である。それでその対角成分は，いずれも，正あるいはゼロである。そして E の対角成分のうち下部の $n-p$ 個がゼロであることに注目すると，A および B のそれに対応する位置にある対角成分もゼロである。

そのうえに，A は対称ベキ等行列であるので，補助定理Cにより，ゼロ対角成分を通る行上の成分，列上の成分はすべてゼロである。これは A, B がつぎの形のものであることを意味している。

$$A = \begin{bmatrix} M_p & O \\ O & O \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} S_p & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

いまベクトル Z の n 個の成分のうち，はじめの p 個よりなるベクトルを U と記すことにする。注)

$$Z' = [Z_1, \cdots Z_p Z_{p+1} \cdots Z_n]$$

注) 定理の適用の節で，U でこれと異なるベクトル，行列をあらわすが，混同のおそれはないであろう。

$$U'=[Z_1\cdots Z_p]$$

これを用いて $Z'EZ=Z'AZ+Z'BZ$ をつぎのように書きあらわしておく。

$$Z'\begin{bmatrix} I_p & O \\ O & O \end{bmatrix}Z=Z'\begin{bmatrix} M_p & O \\ O & O \end{bmatrix}Z+Z'\begin{bmatrix} S_p & O \\ O & O \end{bmatrix}Z$$

$$U'I_pU=U'M_pU+U'S_pU$$

ここにつぎのものが成立している。

$$U\sim N(O,I_p)$$

$$U'M_pU=Z'AZ\sim\chi^2(r)$$

こうして，U に関して定理1の仮定がすべてみたされている。それで

$$U'S_pU=Z'BZ\sim\chi^2(p-r)$$

$U'M_pU$ と $U'S_pU$，したがって $Z'AZ$ と $Z'BZ$ とが統計的に独立である，ということができる。

定理3

$$Z\sim N(O,I)$$

$$Z'VZ=Z'AZ+Z'BZ$$

$$Z'VZ\sim\chi^2(p)$$

$$Z'AZ\sim\chi^2(r)$$

この仮定のもとでつぎのものが成立する。

(1) $Z'BZ\sim\chi^2(p-r)$

(2) $Z'AZ$ と $Z'BZ$ とは統計的に独立。

これを定理2と比較すると，一般単位行列 E が対称ベキ等行列 V に変えられていることがみられる。

証明

$$Z'VZ=Z'AZ+Z'BZ$$

の Z に回転変換 $Z=R'Y$ をほどこして

$$Y'EY=Y'MY+Y'SY$$

をえることができる。ここに一般単位行列 E を上に整列しておけば，定理2との対比に便である。この各項についてつぎのものが成立している。

$$Y'EY = Z'R'ERZ = Z'VZ \sim \chi^2(p)$$

$$Y'MY = Z'R'MRZ = Z'AZ \sim \chi^2(r)$$

$$Y = RZ \sim N(O, I)$$

ここに定理2の仮定がすべてみたされていることがみられる。それで

$$Y'SY = Z'R'SRZ = Z'BZ \sim \chi^2(p-r)$$

$Y'MY$ と $Y'SY$, したがって $Z'AZ$ と $Z'BZ$ とが統計的に独立である，ということができる。

補助定理D

行列 A, B がそれぞれ対称ベキ等行列であるとする。

$$A' = A,\quad A^2 = A$$

$$B' = B,\quad B^2 = B$$

この仮定のもとでつぎの（a),（b）は同値である。

（a）$(A+B)^2 = A+B$

（b）$AB = 0$

証明

$$(A+B)^2 - (A+B) = A^2 + B^2 + AB + BA - (A+B) = 2AB$$

(a)→(b)

左辺＝0より右辺＝0をえる。

(b)→(a)

右辺＝0より左辺＝0をえる。

定理4

$$Z \sim N(O, I)$$

$$Z'AZ \sim \chi^2(r)$$

$$Z'BZ \sim \chi^2(s)$$

この仮定のもとでつぎの（a）と（b）とは同値である。

（a）$AB = 0$

（b）$Z'AZ$ と $Z'BZ$ とは統計的に独立。

証明

(a)→(b)

$AB=0$ であるから，補助定理Dにより $(A+B)^2=A+B$ をえる。また

$$tr(A+B)=trA+trB=r+s$$

が成立する。したがって補助定理Aより

$$Z'(A+B)Z\sim\chi^2(r+s)$$

をえる。ここで

$$Z'(A+B)Z=Z'AZ+Z'BZ$$

についてみると，定理3の条件がすべてみたされており， $Z'AZ$ と $Z'BZ$ の統計的独立をえる。

(b)→(a)

$$Z'AZ+Z'BZ=Z'(A+B)Z$$

において，左辺2つの項が統計的に独立であるので，補助定理Bより，左辺～$\chi^2(r+s)$ したがって` 右辺～$\chi^2(r+s)$ をえる。それでこの2次形式の行列はベキ等性をもつ。

$$(A+B)^2=A+B$$

このとき，補助定理Dより $AB=0$ をえる。

定理の適用

終りに，これらの定理の仮説検定における適用について述べておく。尤度比検定基準による検定統計量の導出にあたっては，つぎの分散分析表がしばしば用いられている。

分散分析表

	SS	DF	MS	TS
D	SS_D	DF_D	$SS_D/DF_D=v^2$	$v^2/s^2=w^2$
E	SS_E	DF_E	$SS_E/DF_E=s^2$	
T	SS_T	DF_T		

ここにつぎの恒等式が成立している。

$$SS_T-SS_E=SS_D$$

$$DF_T-DF_E=DF_D$$

こうして算出される w^2 について棄却域を設けるにあたっては w^2 が F 分布をもつことを基礎にしているが，そのためには w^2 の分母，分子における平方和が統計的に独立でなければならない。

この独立を確認するために，われわれの定理を用いるにあたって，定理1，定理2が定理3と基本的に同じものであること，しかも定理3がもっとも一般的なものであるので，ここでは定理3の適用をとりあげる。また，定理4の適用には行列積を求めることが必要であるので，つづいてそれについて述べる。

定理3を適用するために残差平方和の基本分割

$$\frac{SS_T}{\sigma^2}=\frac{SS_E}{\sigma^2}+\frac{SS_D}{\sigma^2}$$

をつぎのように書き改めておく。

$$Z'VZ=Z'AZ+Z'BZ$$

ここに

$$Z=\varepsilon/\sigma\sim N(O,I)^{注)}$$

$$Z'VZ\sim\chi^2(DF_T)$$

$$Z'AZ\sim\chi^2(DF_E)$$

すなわち，定理3の仮定のすべてが成立している。このことよりただちにつぎの結論がえられる。

$$Z'BZ\sim\chi^2(DF_D)$$

$Z'AZ$ と $Z'BZ$ すなわち SS_E と SS_D の統計的独立。

定理4を適用し $X'AX$ と $X'BX$ との統計的独立をみるためには，定理4の仮定すなわち

$$Z\sim N(O,I)$$

$$Z'AZ\sim\chi^2(DF_E)$$

のほかに，$Z'BZ\sim\chi^2(DF_D)$ および $AB=0$ の成立をみておかねばならない。この前者は定理3の適用のところで成立することが確認されているので，ここでは $AB=0$ の成立についてみればよい。

仮説検定の事例はいろいろあるが，数値計算上はその多くが基本的に一体の

注） $\varepsilon\sim N(O,\ \sigma^2I)$ についてはすぐあとで述べるモデルを参照のこと。

ものであるとみることができるので，[注] ここでは代表として，1元分散分析，共分散分析の2つをとりあげるにとどめておく。

平均　3個処よりのサンプル　1元分散分析

モデル　$Y=X[\mu_1\mu_3\mu_3]'+\varepsilon \quad \varepsilon\sim N(O,\sigma^2 I)$

$$H_0 : \mu_1=\mu_3=\mu_3=\mu$$

$$X=\left(\begin{array}{ccc} 1 & & \\ \vdots & & \\ 1 & & \\ \hline & 1 & \\ & \vdots & \\ & 1 & \\ \hline & & 1 \\ & & \vdots \\ & & 1 \end{array}\right)_{n3\times 3} \qquad U=\left(\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ \hline 1 \\ \vdots \\ 1 \\ \hline 1 \\ \vdots \\ 1 \end{array}\right)_{n3\times 1}$$

$$K=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}_{3\times 1}$$

回帰　3個処よりのサンプル　共分散分析

モデル　$Y=X[\alpha_1\alpha_2\alpha_3\beta_1\beta_2\beta_3]'+\varepsilon \quad \varepsilon\sim N(O,\sigma^2 I)$

平行　$H_0 : \beta_1=\beta_2=\beta_3=\beta$

$$X=\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & x_{11} & & \\ \vdots & & & \vdots & & \\ 1 & & & x_{n1} & & \\ \hline & 1 & & & x_{12} & \\ & \vdots & & & \vdots & \\ & 1 & & & x_{n3} & \\ \hline & & 1 & & & x_{13} \\ & & \vdots & & & \vdots \\ & & 1 & & & x_{n3} \end{array}\right)_{n3\times 6} \qquad U=\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & x_{11} & & \\ \vdots & & & \vdots & & \\ 1 & & & x_{n1} & & \\ \hline & 1 & & & x_{12} & \\ & \vdots & & & \vdots & \\ & 1 & & & x_{n2} & \\ \hline & & 1 & & & x_{13} \\ & & \vdots & & & \vdots \\ & & 1 & & & x_{n3} \end{array}\right)_{n3\times 6}$$

$$K=\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ \hline & & & 1 \\ & & & 1 \\ & & & 1 \end{array}\right)_{6\times 4}$$

注）　種々の統計々算の基本的一体性については拙稿「統計解析の1つの数値計算法」『情報』1960年3月を参照のこと。

モデル　$Y=X[\alpha_1\alpha_3\alpha_3\beta]'+\varepsilon \quad \varepsilon\sim N(O,\ \sigma^2 I)$

合同　$H_0:\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\alpha$

X として平行のときの U を用いることができる。

$$U=\begin{pmatrix} 1 & x_{11} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} \\ 1 & x_{12} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n2} \\ 1 & x_{13} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n3} \end{pmatrix}_{n3\times 2}$$

$$K=\begin{bmatrix} 1 & \\ 1 & \\ 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}_{4\times 2}$$

これらいずれの場合にも $XK=U$ が成立している。ここに X, U, K の成分中0は記載を省略しておいた。また $Z=Y/\sigma$ と記す。

この記号を用いるときには，いずれの場合にも，残差平方和をつぎのようにあらわすことができる。

$$SS_T/\sigma^2=Z'VZ$$

$$V=I-U(U'U)^{-1}U'$$

$$SS_E/\sigma^2=Z'AZ$$

$$A=I-X(X'X)^{-1}X'$$

そして

$$SS_D/\sigma^2=SS_T/\sigma^2-SS_E/\sigma^2$$

$$=Z'BZ \qquad B=V-A$$

とおくとき $AB=0$ の成立することを確認することが，ここでの課題である。

ここで，はじめに $AV=A$ の成立することをみておく。

$$AV=[I-X(X'X)^{-1}X'][I-U(U'U)^{-1}U']$$

$$=I-X(X'X)^{-1}X'-U(U'U)^{-1}U'$$

$$+X'(X'X)^{-1}X'U(U'U)^{-1}U'$$

この最後の項は $XK=U$ を用いると，つぎのようになる。

$$
\begin{aligned}
&X(X'X)^{-1}X'U(U'U)^{-1}U' \\
&=X(X'X)^{-1}X'XK(U'U)^{-1}U' \\
&=XK(U'U)^{-1}U' \\
&=U(U'U)^{-1}U'
\end{aligned}
$$

これを用いると AV はつぎのようにあらわされる。

$$AV=I-X(X'X)^{-1}X'=A$$

定理 4 の適用にあたっては，この結果を用いて $AB=0$ を示せばよい。

$$
\begin{aligned}
AB&=A(V-A) \\
&=AV-A^2 \\
&=A-A \\
&=0
\end{aligned}
$$