

情報科学講座 A・5・3

A. 共通基礎理論

A・5 統計理論

北川敏男編



多変量解析論

塩谷実 共著
浅野長一郎

編集委員

大泉充郎
勝木保次
北川敏男
喜安善市
栗原俊彦
桑原万寿太郎
坂井利之
高田昇平
次田皓
南雲仁一
中村幸雄
和田弘

共立出版株式会社

“情報科学講座”の序

情報科学は機械・生体および人間社会における情報の生成・伝達・改造・蓄積・利用についての一般原理を攻究する基幹科学である。情報理論の建設、情報現象の解明、情報方式の開発の三つの領域にわたり、相互間の緊密な協力によってその発展をはかることは、現代科学技術の進歩にとって、必須の要請となっている。

21世紀の人類のビジョンは、情報革命のもとに築かれなければならない。20世紀前半における物理科学の進展は、やがて生物科学、人文科学、社会科学に大きな影響を及ぼし、これらの科学分野の飛躍的發展が期待されている。この時代において、それらの相互間の連結は、情報科学を通じて行なわれるべきものであり、情報科学の進歩は、これらの諸分野の発展に強力な推進力となるものと期待される。科学・技術の研究が、人類社会に占める役割は年とともに加重しているが、科学・技術の研究のために共通の基盤を提供するものは、計算機といい、ドキュメンテーションといい、情報科学の負担すべき任務に属する。

情報科学の組織的研究体制を整備するとともに、情報科学について系統的な学習を行ない、広範な教養を培い、わが国における情報科学の水準を世界のそれにおくれないようにすることは、今日の急務である。

このような趣旨から、情報科学講座 全 73 巻を刊行しようというのである。講座の意図するところは、情報科学の体系的集成であるから、理論・素子・組織・生体情報・装置の全分野にわたり、基礎的な解説から、第一線の研究の紹介にまで及ぶように努めた次第である。

わが国の情報科学の水準が世界をリードし卓越する日の来ることを待望しつつ、この目的のために、情報科学講座がいささかなりとも寄与できることを、心から念願するものである。

1966年9月

編集委員一同

序

数種類の計測特性による統計解析というと、現代では回帰分析とか相関分析というようなものから、因子分析、主成分分析、判別関数等々に及ぶ広範な分野を含み、統計学の基礎的な分野の一つになっている。この分野を総称して統計的多変量解析というのであるが、略して多変量解析ということが多い。多変量解析の発展は、ここ 30 数年以来、数多くの統計学者のたゆまぬ努力によって築き上げられ、地味ながら着々として理論体系を整えて今日の大をなすに至ったものである。現在ではより早く整備された一変量の統計解析に対応する推測理論の大筋もほぼ完成しているといえる。

理論の整備の背後には、自然科学、人文、社会科学の広い分野にわたって応用面からの強い要請があったわけである。そして多変量解析の応用を普及させた要因として電子計算機の発達を見のがすわけにゆかない。これによって従来計算量に圧倒され実施があきらめられていた多変量解析の適用が可能になったからである。このようにして今日では、多変量解析は、多くの研究者にとって、利用できる身近な統計解析となってきた。欧米では統計学の正規コースで必須の課程となっているし、標準的な教科書も幾とおりか刊行されている。

わが国は、戦後になってからであるが、統計学が急速に普及し、現在では統計学の理論的な研究においても、実際問題への応用においても、世界の水準に到達している。多変量解析の研究および応用でも、幾多のすぐれた業績がある。それにもかかわらず、多変量解析については、系統的な解説を与えた邦書が絶無に近い状況であった。1 日も早く、この欠陥を補うことが要望されながら、それが実現されず、今日に至ったのである。

本書は、一つにはこの要望にこたえる任務をになうものである。構成は二つの編から成り立っている。第 1 編 理論編では、推測論構成の正統なコースの通り、基本的分布の導出に始まり、推定・検定の方法を解説し、これをもと

に正規回帰論，分類分析に及んでいる。多変量解析の理論がいかに構成されるかが，ここに系統的に解説されている。その説明は，定義・定理・証明・系という演繹論理の構成を厳密に追究する方針で一貫し，証明の省略された箇所については，一々参照文献を明示して，読者に学習の便を提供するとともに，いささかも不安の念を残さないよう，留意が払われている。近年わが国においても行列の知識は広く普及し，またそれに関する初歩的な解説書も多いのにかんがみ，行列そのものの解説に頁数をさくことをやめて行列に関するある程度の予備知識を予想されているが，特に肝要な知識については編末に簡潔な解説を付録として付け加えるなど親切なる用意がなされている。

第2編は応用編である。多変量解析の諸々の方法が，どんな場面において，どんな条件のもとで適用されているか，また適用するにあたって必要な計算手法としてはどういうものがあるか，これらについて詳細にわたって解説されている。読者はこの編において，因子分析，判別関数法，相関論，回帰論，多変量母集団に関する推測論などについて，最近の成果を学ぶことができる。電子計算機の利用が普及した現在であるから，応用を担当するこの編では，電子計算機利用の多変量解析用のプログラム作成に及ばなければならない。この点を考慮し，豊富なプログラム資料が提供されているのが，この第2編の著しい一つの特色である。

本書の執筆は，2人の著者の協力によるものである。第1編を分担された日本大学教授塩谷実博士は，多変量解析論を専攻して，統計数理研究所ならびにStanford 大学において研究を積まれ，その業績は広く世界に知られ，この方面ではわが国を代表される学者である。第2編を分担された著者，浅野長一郎博士は，塩野義製薬株式会社解析センター長として，統計解析の実地応用面において，研鑽を重ねられ，とくに多変量解析の応用については，医学・薬学・心理学などの分野において，実地の仕事に関係が深い体験をもたれているわが国屈指のエキスパートである。近年，多変量解析のため優秀なプログラムを精力的に開発し，これを広く利用してこられた方である。この御兩人が互いに緊密な連絡をとり，しかも各自十分の独自性を発揮して各編をそれぞれ分担執筆

されたのが本書である。多変量解析の第一線にある両氏の協力による特色あるこの著述を世に送ることができるのは、編者として喜びにたえない。

多変量解析がわが国において研究方法として定着するために、本書が標準的な教科書として、あるいは研究サークルのテキストとして、あるいは自習書とし、広く活用されることを期待してやまない。

多変量解析の方法が、わが国において広く理解され活用され、学界の共有財として定着することは、情報科学の発展のために、欠くことができない前提である。いったい情報科学の理論には、諸々の局面があり、したがって諸々の接近法がある。たとえば論理学的接近、統計学的接近、計画論的接近、組織論的接近等々をあげることができる。このうち、統計学的接近については、その方面の解説のため幾巻かがこの講座で用意されている。統計学のうちどういうトピックを解説するかといえば、すでに数多くの既刊の邦書によって解説されたものはしばらくおき、どうしても必要な基礎的な知識に関するもので、しかも現在容易に他の邦書でそれを求め得られない分野に限定することになる。この限定された範囲についてであるが、この講座のなかに系統的な解説を用意し、情報科学を構築するための礎石を堅固にすることが、編集方針になっている。情報科学の広範な諸分野にわたって、多変量解析がいかに基礎的な役割を果たすかという具体的な点については、他の諸巻の解説のなかにおいてこれについての数多くの実例があるからこれらを通じて、この講座の読者は、認識を深められることができると信ずる。ここにただ一つの例をあげれば、パターン認識の学習過程がそれである。パターンの構造特性は、いかなる計測変量をもって表現できるであろうか。パターン認識を確立する推測過程において、どんな因子を選び、どんな因子を捨ててゆくべきであろうか。パターン認識を次第に形成してゆく学習過程を解析するのは、まさに多変量解析の課題である。多変量解析の系統的な解説書が、この講座の一巻として刊行されることは、多変量解析の将来の発展を方向づけるという観点からも、意義深いことと思われる。

1966年12月

編集者 北川 敏男

目 次

第1編 理 論

(塩谷 実)

ま え が き	1
---------------	---

第1章 記号, 多変量分布, 正規分布

1・1 記 号	3
1・2 多変量分布	4
1・3 多変量正規分布	8

第2章 回帰および相関

2・1 回帰曲面, 平方平均回帰曲面	13
2・2 重相関係数	15
2・3 偏相関係数	17
2・4 正準相関係数	18
2・5 正準相関論と回帰論との関係	21

第3章 基本的分布

3・1 正規観測行列	23
3・2 標本平均の分布	23
3・3 標本積和行列の分布	24
3・4 バートレットの分解, 一般化分散	28
3・5 標本残差共分散行列の分布	30
3・6 非心 χ^2 -分布, 非心 F -分布	31
3・7 ホテリングの T^2 -分布	32

3.8	多次元ベータ分布	33
3.9	二次形式の独立性, コ克兰の定理	36

第4章 推定の問題

4.1	最大尤度推定ベクトル	40
4.2	推定量の充足性と有効性	41
4.3	$N(\mu, A)$ における μ, A の推定	43
4.4	単相関係数の推定と分布	44
4.5	単相関係数に関する漸近分布	47
4.6	偏相関係数の推定とその分布	50
4.7	重相関係数の推定および分布	50
4.8	正準相関係数の推定	54

第5章 検定の問題

5.1	尤度比検定	55
5.2	平均ベクトルに関する T^2 -検定	56
5.3	成分変数の組の独立性の検定	57
5.4	尤度比検定規準およびウィッシャート行列の関数の漸近分布	60
5.5	独立性の検定規準の漸近分布	63
5.6	等共分散行列の仮説検定	64
5.7	共分散行列の構造に関する仮説検定	67

第6章 ユニオン・インターセクション法

6.1	拡張された第一種検定法	72
6.2	等共分散行列の仮説に対する拡張された第一種検定	72
6.3	等平均ベクトルの仮説に対する拡張された第一種検定	74
6.4	独立性の仮説に対する拡張された第一種検定	74
6.5	同時信頼区間	75

6.6 平均ベクトルの成分の一次結合に関する同時信頼区間	76
6.7 共分散行列に関する信頼区間	77
6.8 m 個の平均ベクトルの対比較に関する同時信頼区間	78

第7章 標本特有根の分布

7.1 二つのウィッシュャート行列の場合	80
7.2 一般化ベータ分布の利用	83
7.3 一つのウィッシュャート行列の場合	84
7.4 異常ウィッシュャート行列がある場合	85
7.5 標本正準相関係数の2乗の分布	88
7.6 最大根の分布に関する数表	89

第8章 正規回帰論——共分散行列分析——

8.1 回帰係数行列の推定	90
8.2 \hat{B} と \hat{A} の標本分布	91
8.3 回帰係数行列に関する仮説検定	93
8.4 特別な場合における w の分布	99
8.5 回帰係数行列に関する尤度比検定規準の漸近分布	100
8.6 平均ベクトルに関する一様性の検定	101
8.7 他の検定規準	103
8.8 共分散行列分析	104

付 録

A.1 行列式, 行列に関するいくつかの公式	109
A.2 行列の因子分解	110
A.3 行列の微分	114
A.4 二次形式に関する結果	114
A.5 行列変換のヤコビヤン	116

参考文献	117
------	-----

第2編 応 用

(浅野長一郎)

第1章 概 論

1.1 多変量解析の認識	123
1.2 多変量解析法の型	127
参考文献	130

第2章 因子分析法

2.1 概 要	132
2.2 主成分分析と成因分析	133
2.3 因子分析	139
2.4 因子の解釈と因子軸回転	143
2.5 因子軸の斜交回転	147
2.6 計算プログラミング	152
2.7 応 用 例	169
参考文献	174

第3章 判別関数法

3.1 概 要	179
3.2 2個の母集団のいずれかに判別する場合	180
3.3 $k (> 2)$ 個の正規母集団のいずれかに判別する場合	182
3.4 計算プログラミング	182
3.5 応 用 例	186
参考文献	188

第4章 相 関 論

4.1 概 要	191
4.2 重相関分析	196
4.3 偏 相 関	198
4.4 計算プログラミング	200
4.5 応 用 例	207
参考文献	209

第5章 回 帰 論

5.1 概 要	211
5.2 正規線型回帰論	212
5.3 計算プログラミング	215
5.4 応 用 例	218
参考文献	219

第6章 推定・検定論

6.1 Σ 既知のときの等平均の仮説検定	221
6.2 Σ 未知のときの等平均の仮説検定	222
6.3 等分散共分散行列の仮説検定	224
6.4 計算プログラミング	226
6.5 応 用 例	234
参考文献	235
索 引	1~3

第1編 理 論

まえがき

統計学とは、統計的現象についての観測データの中に含まれている有効な情報を、効果的に引き出し、それをもとに、普遍的な結果、法則を推論せんとする一つの科学である。歴史的には、前世紀も終りのころ、W. S. Gosset (1876～1936), R. A. Fisher (1890～1962) により、標本と母集団の概念が確立され、従来の記述統計の段階から大きく飛躍し、面目を一新するとともに、その後、理論応用両面にわたって、質的にも量的にも長足の進歩をとげ、一つの大きな体系を整えている。

統計的多変量解析は、この近代統計学の重要なブランチの一つである。この理論的發展としては、その出発点を、J. Wishart が、いわゆるウィッシュャート分布の一般的形の導出に成功した 1928 年 [62] においていいであろう。それ以前にも、Fisher, K. Pearson らによる、単相関、偏相関、重相関、racial likeness など、多変量解析に関する仕事があり、Wishart の仕事も、これらを背景にもつことはもちろんである。しかし、彼の仕事を契機として、多変量解析の理論が、力強く研究の軌道の上をすべり出したことも事実である。

一変量の場合の統計的方法を多変量の場合へ直接的に拡張すること、各種の相関概念、それに対する統計的推論の研究が相次いで進展をみせ、さらに、統計的分類、主成分分析、因子分析などに、多変量解析としての特色をもってくる。これらに密接に関係している、確率行列の特有根、特有ベクトルに関する標本分布、推論の研究は、多変量解析論の重要な項目である。

確率ベクトルの次元、すなわち、各個体について、調べんとする標識の個数

が増せば、それだけ詳しい情報が得られるが、一方、基礎モデルの確率分布、あるいは、母集団分布が含むパラメターの個数も当然ふえて、理論的取扱い、数値解析を複雑にし、やっかいなものにする。しかし、近來の自動電子計算機の急速な進歩は、この不利な面を著しく削減してくれ、現象の多変量的取り扱いを容易にし、自然、社会科学、各種産業へと、その適用範囲を広げている。

しかし、いまなお一つの弱点をもっている。観測データの記述的段階をすぎて標本分布に関係する段階になると、基礎分布として、正規分布を仮定しうる場合を除けば、系統だった解析を進めることが困難である。中心極限定理があてはまり、正規分布が実用の場に現われることが多いのは事実であるが、適用範囲が制限されるなど、満足すべき状態とはいえない。母集団の型に依存しない、いわゆる、ノン・パラメトリックな取り扱いも当然必要であり、現にこの種の仕事もなされているが、まだ個別的段階の程度で今後の研究を待たねばならない。

執筆にあたり、紙数の関係上、割愛しなければならない点がいいろいろあり、読者に不便をかけることを、断っておかねばならない。近代統計学の基礎的概念、ベクトル、行列の演算法などの予備知識を既知とした。また、理論の展開において、定理の証明、結果の導出などで、省略した箇所もかなり多い。ただ、そこでは、関連のある文献を示すように心がけたつもりである。

最後に、この執筆の機会を与えられた九州大学 北川敏男教授、いろいろ有益な御教示をいただいた日本大学 小川潤次郎教授に厚く感謝の意を表します。原稿、校正を通読し、不備な点を指摘していただいた、統計数理研究所の早川毅氏、原稿の清書、校正、文献の整理に多大の援助を与えられた、同研究所の篠原祐子嬢、また、出版についてお世話になった共立出版の佐藤邦久氏に、あらためてお礼申し上げます。

【付記】 系統的な入門書

T. W. Anderson: *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (1958), [1].
M. G. Kendall: *A Course in Multivariate Analysis* (1957), [26].

また、最近における多変量解析論に関する研究を総合的にみるには、筆者の論文：多変量解析論の最近 10 年間における歩み、統計数理研究所彙報 (1961) を参照されるとよい。

第1章 記号, 多変量分布, 正規分布

1.1 記号

原則として, 母集団パラメータを表わすのにギリシャ文字を用い, 与えられた量はイタリック文字の前半で, 標本量, 確率量は, その後半で表わす。行列は肉太の大文字で, ベクトルは肉太の小文字で表わす。転置, 逆行列, 行列式, 行列の跡の記号には, 普通のものを使う。ベクトルとして行ベクトルを採用する: $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ 。ゆえに, 列ベクトルはその転置したもの, \mathbf{x}' で表わされる。三角行列は, 主対角線の下側の要素が全部 0 であるものとし, \tilde{T} のごとく表わす。 a_1, \dots, a_n を対角要素とする対角行列を D_a , あるいは, $\text{diag}\{a_1, \dots, a_n\}$ と書く。正方行列 X の特有根 r_1, \dots, r_k の集合を $\text{ch}(X)$ と書き, また, 最大根のことを $C_{\max}(X)$, r_{\max} , 最小根のことを $C_{\min}(X)$, r_{\min} などと書く。行列の行と列の数, ベクトルの成分の数を明記する必要があるときには, たとえば, n 行 m 列の行列 A のことを, $A(n \times m)$, n 個の成分をもつベクトル ξ のことを, $\xi(1 \times n)$ と示す。これらをまた, $\underset{n \times m}{A}, \underset{1 \times n}{\xi}$ と表わすこともある。特に, $n \times n$ の単位行列は I_n とする。

対称行列 V が正値定符号であること, 非負であることをそれぞれ $V > 0$, $V \geq 0$ と書き, さらに, $V > W$, $V \geq W$ と書くとき, $V - W$ が, それぞれ, 正値定符号, 非負であることを意味する。変換 $X \rightarrow Y$ のヤコービアンを $J(X: Y)$ で表わす。 $\text{Pr}\{ \}, \text{Pr}(\)$ は, $\{ \}, (\)$ の中の関係が成立する確率を表わす。体積要素 $dx_1 dx_2 \dots dx_n$ とか $dx_{11} dx_{12} \dots dx_{nm}$ を簡単に $d\mathbf{x}$ とか $d\mathbf{X}$ と書く。

平均をとる線型作用素の記号として, “ \mathcal{E} ” を用いる。特に, 分散, 共分散に対して

$$\text{Var}(x) = \mathcal{E}(x - \mathcal{E}x)^2, \text{Cov}(x, y) = \mathcal{E}(x - \mathcal{E}x)(y - \mathcal{E}y) \quad (1.1)$$

のように書く。

1.2 多変量分布

k 変量分布は、 k 次元標本空間 R_k における k 個の確率変数の組 (x_1, \dots, x_k) の同時分布、あるいは、確率ベクトル $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ の分布である。

A. 分布関数, 密度関数

一変量のとときと同様、確率ベクトル $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_k)$ の分布は、その(累積)分布関数

$$F(\mathbf{x}) \equiv F(x_1, \dots, x_k) = \Pr \{z_1 \leq x_1, \dots, z_k \leq x_k\} \quad (1.2)$$

により一意的に決定される。ここで x_1, \dots, x_k は止めて考えられる。 $F(\mathbf{x})$ は次の性質をもつ。

$$(1) \quad 0 \leq F(\mathbf{x}) \leq 1$$

$$(2) \quad k \text{ 次の階差は非負である ; } \Delta_k F(\mathbf{x}) \geq 0$$

$$(3) \quad F(-\infty, x_2, \dots, x_k) = \dots = F(x_1, \dots, x_{k-1}, -\infty) = 0, \\ F(+\infty, \dots, +\infty) = 1$$

$$(4) \quad F(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + 0, x_{i+1}, \dots, x_k) = F(x_1, \dots, x_k), \quad i = 1, \dots, k$$

もし、分布が連続型のときには、密度関数

$$f(\mathbf{x}) \equiv f(x_1, \dots, x_k) = \frac{\partial^k F(x_1, \dots, x_k)}{\partial x_1 \cdots \partial x_k} \quad (1.3)$$

が存在する。この場合、 k 次元ユークリッド空間の任意の可測集合 E に対して

$$\Pr \{\mathbf{x} \in E\} = \int_E \dots \int f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.4)$$

B. 周辺分布, 統計的独立

確率ベクトル $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_k)$ の分布関数を $F(\mathbf{x})$ とするとき、 z_1, \dots, z_k の部分、たとえば、 $z_1, \dots, z_j (j < k)$ の分布関数は

$$F_{1 \dots j}(x_1, \dots, x_j) = \Pr \{z_1 \leq x_1, \dots, z_j \leq x_j\} \\ = F(x_1, \dots, x_j, \infty, \dots, \infty) \quad (1.5)$$

で、これにより一意的に定まる分布を、 z_1, \dots, z_j の周辺分布という。これは、 k 次元空間における確率分布を、 z_1, \dots, z_j の j 次元部分空間に投影したものである。

確率変数 z_1, \dots, z_k が

$$F(x_1, \dots, x_k) = F_1(x_1) F_2(x_2) \cdots F_k(x_k) \quad (1.6)$$

を満たすとき, 統計的に, 互いに独立であるといわれる。 $F_i(x_i)$ は z_i の周辺分布関数である。特に分布が連続型であれば, 式 (1.6) の条件は

$$f(x_1, \dots, x_k) = f_1(x_1) f_2(x_2) \cdots f_k(x_k) \quad (1.7)$$

と同等である。ここに, $f_i(x_i)$ は, z_i の周辺密度関数である。また, 二つの確率ベクトル $\mathbf{z}_1 = (z_{11}, \dots, z_{1r})$, $\mathbf{z}_2 = (z_{21}, \dots, z_{2s})$ の同時分布関数 $F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ が

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= F_1(\mathbf{x}_1) F_2(\mathbf{x}_2) \\ &= F(x_{11}, \dots, x_{1r}, \infty, \dots, \infty) F(\infty, \dots, \infty, x_{21}, \dots, x_{2s}) \end{aligned} \quad (1.8)$$

と, それぞれの周辺分布関数の積に書けるとき, \mathbf{z}_1 と \mathbf{z}_2 は統計的に独立であるという。

C. 条件つき分布

$\mathbf{z}_1 = (z_{11}, \dots, z_{1r})$, $\mathbf{z}_2 = (z_{21}, \dots, z_{2s})$ を確率ベクトル, E_1 , E_2 をそれぞれの空間における可測集合とする。 $\Pr\{\mathbf{z}_2 \in E_2\} > 0$ のとき, 事象 $\mathbf{z}_2 \in E_2$ の下での事象 $\mathbf{z}_1 \in E_1$ の条件つき確率は

$$\Pr\{\mathbf{z}_1 \in E_1 | \mathbf{z}_2 \in E_2\} = \frac{\Pr\{\mathbf{z}_1 \in E_1, \mathbf{z}_2 \in E_2\}}{\Pr\{\mathbf{z}_2 \in E_2\}} \quad (1.9)$$

と定義される。対称性により, $\Pr\{\mathbf{z}_2 \in E_2 | \mathbf{z}_1 \in E_1\}$ も同様に定義される。特に, $E_1 = \{\mathbf{z}_1 : z_{11} \leq x_{11}, \dots, z_{1r} \leq x_{1r}\}$, $E_2 = \{\mathbf{z}_2 : z_{21} \leq x_{21}, \dots, z_{2s} \leq x_{2s}\}$ とすれば, 式 (1.9) の右辺は, \mathbf{z}_1 と \mathbf{z}_2 の同時分布関数 $F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \equiv F(x_{11}, \dots, x_{1r}, x_{21}, \dots, x_{2s})$ と \mathbf{z}_2 の分布関数 $F_2(\mathbf{x}_2) \equiv F_2(x_{21}, \dots, x_{2s})$ の比で表わされる。このときの左辺を $F(\mathbf{x}_1 | E_2) \equiv F(x_{11}, \dots, x_{1r} | E_2)$ と書き, $\mathbf{z}_2 \in E_2$ の下における \mathbf{z}_1 の条件つき分布関数 という。 $F(\mathbf{x}_1 | E_2)$ が A. 節の分布関数としての性質をもっていることは容易に確かめられる。

分布が連続型の場合には, $\mathbf{z}_2 = \mathbf{x}_2$ のときの密度関数 $f_2(\mathbf{x}_2)$ が > 0 のとき,

$$f(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2) = \frac{f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{f_2(\mathbf{x}_2)} \quad (f_2(\mathbf{x}_2) > 0) \quad (1.10)$$

でもって, $\mathbf{z}_2 = \mathbf{x}_2$ と与えられたときの \mathbf{z}_1 の条件つき密度関数が定義される。

確率ベクトル $\mathbf{z}=(z_1, \dots, z_k)$ の同時密度関数 $f(\mathbf{x}) \equiv f(x_1, \dots, x_k)$ は、条件つき密度関数により、いろいろの形に分解できる。たとえば、

$$f(\mathbf{x}) = f_1(x_1)f_2(x_2|x_1)\cdots f_i(x_i|x_1, \dots, x_{i-1})\cdots f_k(x_k|x_1, \dots, x_{k-1}) \quad (1.11)$$

D. 平均, 積率

説明を簡単にするために、連続型分布の場合を取り扱う*。 $\mathbf{z}=(z_1, \dots, z_k)$ の密度関数を $f(\mathbf{x})$ とし、 $g(\mathbf{x})$ を積分可能な関数とすれば、 $g(\mathbf{z})$ の平均は、

$$\mathcal{E}\{g(\mathbf{z})\} = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} g(\mathbf{x})f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (1.12)$$

で定義される。もし、 $y=g(\mathbf{z})$ の密度関数を $h(y)$ とすれば、

$$\mathcal{E}\{g(\mathbf{z})\} = \mathcal{E}\{y\} = \int_{-\infty}^{\infty} yh(y)dy \quad (1.13)$$

として、同じ平均を求めることができる。 $g(\mathbf{z})=z_1^{i_1}z_2^{i_2}\cdots z_k^{i_k}$ とおけば、原点まわりの同時積率が得られる。 $\mathcal{E}(z_i)=\mu_i$ とおけば、平均値まわりの同時積率は、 $g(\mathbf{z})=(z_1-\mu_1)^{i_1}\cdots(z_k-\mu_k)^{i_k}$ とおくことにより求まる。

〔定義〕 $\mathbf{Z}=(z_{ij})$ を m 行 n 列の確率行列、 $\mathbf{z}=(z_1, \dots, z_n)$ とするとき、それらの平均値は

$$\mathcal{E}(\mathbf{Z})=(\mathcal{E}z_{ij}), \quad \mathcal{E}(\mathbf{z})=(\mathcal{E}z_1, \dots, \mathcal{E}z_n) \quad (1.14)$$

この定義から容易に次の演算公式が得られる。

〔定理 1.1〕 $\mathbf{Z}(m \times n)$ を確率行列、 $\mathbf{A}(l \times m)$, $\mathbf{B}(n \times p)$, $\mathbf{C}(l \times p)$ を与えられた行列とすれば、

$$\mathcal{E}(\mathbf{AZB}+\mathbf{C})=\mathbf{A}(\mathcal{E}\mathbf{Z})\mathbf{B}+\mathbf{C} \quad (1.15)$$

確率ベクトル $\mathbf{z}=(z_1, \dots, z_k)$ の平均を $\mathcal{E}(\mathbf{z})=(\mathcal{E}z_1, \dots, \mathcal{E}z_k)=(\mu_1, \dots, \mu_k)=\boldsymbol{\mu}$ とすれば、成分変量に関する分散、共分散は、

$$\mathcal{E}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu})'(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu})=(\mathcal{E}(z_i-\mu_i)(z_j-\mu_j))=(\lambda_{ij})=\mathbf{A} \quad (1.16)$$

により同時に求められる。 \mathbf{A} は $k \times k$ の非負対称行列で、 k 変量分布の散らば

* 理論的には、離散型分布の場合も含めて、スチルチェス積分を用いて、統一的に取り扱うことができる。詳しくは、たとえば、S. S. Wilks [61], H. Cramér [8], 小川潤次郎 [33] の著書を参照のこと。

りの度合を表わし, 共分散行列とよばれる。 z_i と z_j の間の相関係数は

$$\rho_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{\sqrt{\lambda_{ii}\lambda_{jj}}} \quad (1.17)$$

で定義される。 $\rho_{ii}=1$, $\rho_{ij}=\rho_{ji}$, $|\rho_{ij}|\leq 1$ である。 ρ_{ij} を要素とする非負対称行列 $\mathbf{P}=(\rho_{ij})$ を相関行列という。 $\mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}}=\text{diag}\{\sqrt{\lambda_{11}}, \dots, \sqrt{\lambda_{kk}}\}$ とすれば,

$$\mathbf{A} = \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}} \mathbf{P} \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}} \quad (1.18)$$

なる表現が成立する。

E. 特性関数

確率ベクトル $\mathbf{z}=(z_1, \dots, z_k)$ の従う k 変量分布の特性関数は, すべての実ベクトル $\mathbf{t}=(t_1, \dots, t_k)$ に対して,

$$\phi(\mathbf{t}) = \mathcal{E}(e^{i\mathbf{t}\mathbf{z}'}) = \mathcal{E}\{e^{i(t_1 z_1 + \dots + t_k z_k)}\} \quad (1.19)$$

で定義される。 i は虚数単位 $\sqrt{-1}$ である。確率行列 $\mathbf{Z}=(z_{ij})(m \times n)$ の特性関数も同様に定義されて, 実行列 $\mathbf{T}=(t_{\alpha\beta})(m \times n)$ に対して

$$\phi(\mathbf{T}) = \mathcal{E}\{e^{i \text{tr}(\mathbf{T}\mathbf{Z}')}\} = \mathcal{E}\{e^{i \sum_{\alpha,\beta} t_{\alpha\beta} z_{\alpha\beta}}\} \quad (1.20)$$

と表わされる。 \mathbf{Z} が $k \times k$ の対称行列の場合には, 変数の個数は $k(k+1)/2$ であるけれども, $z_{11}, \dots, z_{kk}, 2z_{12}, \dots, 2z_{(k-1)k}$ の特性関数と考えれば, 式(1.20)と同じ形に書くことができる。

多変量分布の特性関数の基本的性質を, 証明ぬきで, 三つだけ述べておく。いずれも一変数のときと平行した定理である。

[定理 1.2] 確率ベクトル \mathbf{z}_1 と \mathbf{z}_2 が互いに独立であるための必要かつ十分条件は

$$\phi(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) = \phi(\mathbf{t}_1, \mathbf{0})\phi(\mathbf{0}, \mathbf{t}_2) = \phi_1(\mathbf{t}_1)\phi_2(\mathbf{t}_2) \quad (1.21)$$

である。

[定理 1.3] (一意性の定理) すべての分布は, その特性関数により一意に決定される。——これは Lévy の反転公式の内容を述べたもので, [8], [32], [33] を参照のこと。

[定理 1.4] (連続定理) k 変量分布関数の無限系列 $\{F_n(\mathbf{x})\}$ に対応する特性関数列を $\{\phi_n(\mathbf{t})\}$ とする。このとき, $\{F_n(\mathbf{x})\}$ が一つの分布関数 $F(\mathbf{x})$

に法則収斂するための必要かつ十分条件は、すべての t に対して、 $\{\phi_n(t)\}$ が一つの極限関数 $\phi(t)$ に収斂し、かつ、この収斂が $t=0$ の近傍で一様であることである。このとき、 $\phi(t)$ は $F(x)$ の特性関数である。

これは、分布関数 $F(x)$ とその特性関数の 1 対 1 対応が連続的であることを主張しているものである。[8], [32], [33], [61] を参照のこと。

1.3 多変量正規分布

A. 定 義

$u=(u_1, \dots, u_k)$ を k 次元確率ベクトルで、その成分変量は互いに独立で、 $u_i \sim N(0, 1) \quad i=1, \dots, k$ とする。このとき、 u の密度関数

$$f(u) = (2\pi)^{-k/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}uu'\right\}$$

は周知のとおりである*。ここで正則一次変換： $x=uC+\mu$, $|C| \neq 0$ を施せば、 $J(u:x)=1/\text{mod}|C|$ ($\text{mod}|C|$ は行列式 $|C|$ の絶対値の意) であるから

$$\begin{aligned} f(x) &= (2\pi)^{-k/2} (\text{mod}|C|)^{-1} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)(C'C)^{-1}(x-\mu)'\right\} \\ &= (2\pi)^{-k/2} |A|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)A^{-1}(x-\mu)'\right\} \end{aligned}$$

となる。ただし、 $A=C'C$ とおいた。この式で

$$\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(u)C + \mu = \mu$$

$$\mathcal{E}(x-\mu)'(x-\mu) = C'(\mathcal{E}u'u)C = C'IC = A$$

となっている。一般の定義は次のとおりである。

[定義] 密度関数が

$$f(x) = (2\pi)^{-k/2} |A|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)A^{-1}(x-\mu)'\right\} \quad (1.22)$$

$$A > 0; \quad -\infty < \mu_i < \infty, \quad i=1, \dots, k$$

* 前節までは、確率ベクトルと、止めて考える変量ベクトルを区別して議論していたが、記号上の都合で、以後特にこの区別をしない。

である k 変量分布を, k 変量 正則正規分布 といい, $N(\mu, A)$ で表わす。また x の分布が $N(\mu, A)$ であることを $x \sim N(\mu, A)$ と書く。

[定理 1・5] (1) $(x - \mu) \sim N(0, A)$ (2) $(x - \mu)A^{-1/2} \sim N(0, I)$

[$A^{-1/2}$ の意味については (A.23) を見よ]

[定理 1・6] $x(1 \times k) \sim N(\mu, A)$ のとき, 確率変数

$$\chi^2 = (x - \mu)A^{-1}(x - \mu)' \quad (1.23)$$

は自由度 k の χ^2 -分布に従う。

これより

$$\Pr \{ (x - \mu)A^{-1}(x - \mu)' \leq \chi_k^2(\alpha) \} = 1 - \alpha \quad (1.24)$$

を満たす $\chi_k^2(\alpha)$ を χ^2 -表より求めることができる。したがって, k 次元空間における楕円の内部 $\{x: (x - \mu)A^{-1}(x - \mu)' \leq \chi_k^2(\alpha)\}$ は, 母集団の $(1 - \alpha)$ 100% を含むものと解釈され, 確率楕円体といわれる。

B. 周辺分布

$x(1 \times k) \sim N(\mu, A)$ とする。 $k = k_1 + k_2$ で, $(x_1(1 \times k_1), x_2(1 \times k_2))$ なる分割において, たとえば, x_1 の周辺分布を求めよう。 x の分割に対応する μ, A の分割を

$$\mu = (\mu_1, \mu_2), \quad A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

とし, 次の変換を施す。

$$y = (y_1, y_2) = (x_1, x_2) \begin{bmatrix} I & -A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I \end{bmatrix} \quad (1.25)$$

変換のヤコビアンは 1 で, y の密度関数は

$$\begin{aligned} f(y) &= \left[(2\pi)^{-k_1/2} |A_{11}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (y_1 - \mu_1) A_{11}^{-1} (y_1 - \mu_1)' \right\} \right] \cdot \\ &\quad \left[(2\pi)^{-k_2/2} |A_{22.1}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (y_2 - \mu_2) A_{22.1}^{-1} (y_2 - \mu_2)' \right\} \right] \\ &= f_1(y_1) f_2(y_2 | y_1) \end{aligned} \quad (1.26)$$

となる。ただし,

$$\nu_1 = \mu_1, \quad \nu_2 = \mu_2 - \mu_1 A_{11}^{-1} A_{12}, \quad A_{22.1} = A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12} \quad (1.27)$$

である。したがって、 y_2 を積分で消去すれば、 $y_1 = x_1$ の周辺分布 $N(\mu_1, A_{11})$ を得る。

C. 線型結合の分布

[定理 1.7] $x \sim N(\mu, A)$ とする。 $A(k \times l)$, $(l \leq k)$, を階数 l の行列とすれば、 $y = xA + b$ の分布は、 l 変量正規分布* $N(\mu A + b, A'AA)$ である。

[証明] まず

$$\mathcal{E}(y) = \mu A + b, \quad \mathcal{E}(y - \mathcal{E}(y))'(y - \mathcal{E}(y)) = A'AA \quad (1.28)$$

は明らかである。(i) $k = l$ の場合には、 A は正則で、 $J(x: y) = 1/\text{mod}|A|$ が存在するから、

$$f(y) = (2\pi)^{-k/2} |A'AA|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (y - \mu A - b)(A'AA)^{-1} (y - \mu A - b)' \right\}$$

すなわち、 $N(\mu A + b, A'AA)$ の密度関数である。

(ii) $k > l$ の場合には、 (A, B) を正則とする $k \times (k-l)$ 行列 B , (y, z) を k 変量ベクトルとする z が存在して、

$$(y, z) = x(A, B) + (b, c)$$

なる正則変換を考えることができる。 (y, z) は (i) の場合で k 変量正規分布をもち、B. 節により、 y は、その周辺分布として、式 (1.28) の平均、共分散行列をもつ l 変量正規分布をもつ。

[系] $x \sim N(\mu, A)$ のとき、 $ax' \sim N(a\mu', a'AA)$ である。

D. 条件つき分布

B. 節と同じ記号の下で、 $f(x_2|x_1)$ を求めよう。すでに、式 (1.26) において

$$y_1 = x_1, \quad y_2 = x_2 - x_1 A_{11}^{-1} A_{12} \quad (1.29)$$

なる (y_1, y_2) の同時密度関数が与えられているから、式 (1.29) により (x_1, x_2) の同時分布にもどれば、これは単に式 (1.26) に (1.29) を代入したもので、したがって、

* 特に断らない限り、“正則”を省略して、正則正規分布を意味する。

$$f(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = \frac{f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{f_1(\mathbf{x}_1)} = (2\pi)^{-k_2/2} |\mathbf{A}_{22,1}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) - (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}] \mathbf{A}_{22,1}^{-1} [(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) - (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}]' \right\} \quad (1.30)$$

となる。

[定理 1・8] $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sim N \left\{ (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2), \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \right\}$ のとき, \mathbf{x}_1 が与えられたときの \mathbf{x}_2 の条件つき分布は, 平均, 共分散行列がそれぞれ

$$\mathcal{E}(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = \boldsymbol{\mu}_2 + (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}, \quad \mathbf{A}_{22,1} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \quad (1.31)$$

である k_2 変量正規分布である。

E. 特性関数

$\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ の特性関数を求めよう。

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{t}) &= \mathcal{E} \{ \exp(i\mathbf{t}\mathbf{x}') \} = e^{i\mathbf{t}\boldsymbol{\mu}'} \mathcal{E} \{ \exp[i\mathbf{t}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'] \} \\ &= e^{i\mathbf{t}\boldsymbol{\mu}'} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi)^{-k/2} |\mathbf{A}|^{-1/2} e^{-(1/2)\mathbf{Q}(\mathbf{y})} d\mathbf{y} \end{aligned}$$

ここに, $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}$ で

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(\mathbf{y}) &= \mathbf{y} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y}' - 2i\mathbf{t}\mathbf{y}' \\ &= (\mathbf{y} \mathbf{A}^{-1/2} - i\mathbf{t} \mathbf{A}^{1/2}) (\mathbf{y} \mathbf{A}^{-1/2} - i\mathbf{t} \mathbf{A}^{1/2})' + \mathbf{t} \mathbf{A} \mathbf{t}' \end{aligned}$$

であるから,

$$(2\pi)^{-k/2} |\mathbf{A}|^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{y} \mathbf{A}^{-1/2} - i\mathbf{t} \mathbf{A}^{1/2}) (\mathbf{y} \mathbf{A}^{-1/2} - i\mathbf{t} \mathbf{A}^{1/2})' \right\} d\mathbf{y} = 1$$

に注意すれば,

$$\phi(\mathbf{t}) = \exp \left\{ i\mathbf{t}\boldsymbol{\mu}' - \frac{1}{2} \mathbf{t} \mathbf{A} \mathbf{t}' \right\} \quad (1.32)$$

となる。

[定理 1・9] \mathbf{y} を確率ベクトルで, 平均 $\boldsymbol{\mu}$, 共分散行列 \mathbf{A} をもつものとする。もし, $\mathbf{a}\mathbf{y}'$ がすべての $\mathbf{0}$ でない \mathbf{a} に対して正規分布に従うならば, \mathbf{y} は多変量正規分布に従う。

[証明] $\mathbf{a}\mathbf{y}' \sim N(\mathbf{a}\boldsymbol{\mu}', \mathbf{a}\mathbf{A}\mathbf{a}')$ であるから, その特性関数は,

$$\mathcal{E}\{\exp(itay')\} = \exp\left\{ita\mu' - \frac{1}{2}t^2 a\Lambda a'\right\}$$

である。 $t=1$ とおけば、右辺は $N(\mu, \Lambda)$ の特性関数 $\phi(a)$ となり、一意性の [定理 1.3] により証明は終わる。

この定理で、すべての a ということが重要な点である。たとえば、 y_1, y_2 がそれぞれ周辺分布として正規分布をもっている、これだけでは、 (y_1, y_2) が二変量の分布として正規であることの保証を与えない。

最後に積率を二、三求めておく。 $x \sim N(\mu, \Lambda)$ とすると、 $\mathcal{E}(x_j) = \mu_j$, $\text{Var}(x_j) = \lambda_{jj}$, $\text{Cov}(x_i, x_j) = \lambda_{ij}$ は明らかである。また、 μ に関する分布の対称性から、平均まわりの奇数次の積率はいずれも 0 である。四次の平均まわりの積率に対しては

$$\mathcal{E}(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)(x_l - \mu_l)(x_m - \mu_m) = \lambda_{ij} \lambda_{lm} + \lambda_{il} \lambda_{jm} + \lambda_{im} \lambda_{jl} \quad (1.33)$$

なる結果がある。これは特性関数から積率を求める公式

$$\mathcal{E}(x_1 - \mu_1)^{j_1} \cdots (x_k - \mu_k)^{j_k} = \frac{1}{(i)^{j_1 + \cdots + j_k}} \frac{\partial^{j_1 + \cdots + j_k} \phi(t)}{\partial t_1^{j_1} \cdots \partial t_k^{j_k}} \Big|_{t=\mu} \quad (1.34)$$

によって計算される。

第2章 回帰および相関

2.1 回帰曲面，平方平均回帰曲面

$f(x, y)$ を2変量分布の密度関数とすれば， $f(y|x)$ における平均は

$$\mu_2(x) \equiv \mathcal{E}(y|x) = \int_{-\infty}^{\infty} y f(y|x) dy \quad (2.1)$$

である。 x の関数として， y の平均的な様子を表わすもので，曲線 $y^* = \mu_2(x)$ を， y の x に対する回帰曲線という。同様に，曲線 $x^* = \mu_1(y) \equiv \mathcal{E}(x|y)$ を x の y に対する回帰曲線という。

一般に， $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ のもつ密度関数を $f(x_1, \dots, x_k)$ とすれば， x_1, \dots, x_{k-1} を止めたときの x_k の条件つき分布における平均

$$\mu_k(x_1, \dots, x_{k-1}) = \int_{-\infty}^{\infty} x_k f(x_k|x_1, \dots, x_{k-1}) dx_k \quad (2.2)$$

により， x_k の (x_1, \dots, x_{k-1}) に対する回帰曲面 $x_k^* = \mu_k(x_1, \dots, x_{k-1})$ が定義される。

さらに，二つの確率ベクトル $\mathbf{x}_1(1 \times k_1)$ ， $\mathbf{x}_2(1 \times k_2)$ を考え，その同時確率密度関数を $f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ とするとき，

$$\mathbf{x}_2^* = \mu_2(\mathbf{x}_1) \equiv \mathcal{E}(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) \quad (2.3)$$

のことを， \mathbf{x}_1 に対する \mathbf{x}_2 の回帰関数ベクトルという。回帰関数のまわりの共分散行列

$$\Sigma_{22.1} = \mathcal{E}\{(\mathbf{x}_2 - \mu_2(\mathbf{x}_1))'(\mathbf{x}_2 - \mu_2(\mathbf{x}_1))|\mathbf{x}_1\} \quad (2.4)$$

は， \mathbf{x}_1 が与えられたとき， $\mu_2(\mathbf{x}_1)$ により \mathbf{x}_2 を推定するときの残差共分散行列である。対称性により， $\mu_1(\mathbf{x}_2)$ についても同様の定義が得られる。

$(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ の分布が [定理 1.8] の正規分布ならば，

$$\mu_2(\mathbf{x}_1) = \mu_2 + (\mathbf{x}_1 - \mu_1) \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \quad (2.5)$$

すなわち，回帰関数は線型であり，その残差共分散行列は式 (1.31) の $\mathbf{A}_{22.1}$ である。

[定理 2.1] $(x_1, \dots, x_k, y) \equiv (x, y)$ のとき, すべての x の関数 $g(x)$ のうちで, $\mathcal{E}\{y-g(x)\}^2$ を最小にするものは, 回帰関数 $g(x)=\mu(x)$ である。

$$\begin{aligned} [\text{証明}] \quad \mathcal{E}\{y-g(x)\}^2 &= \mathcal{E}_x[\mathcal{E}_y\{(y-\mu(x)+\mu(x)-g(x))^2|x\}] \\ &= \mathcal{E}_x[\mathcal{E}_y\{(y-\mu(x))^2|x\} + (\mu(x)-g(x))^2] \end{aligned}$$

より明らかである。

一般の場合には, x_1 の関数を成分とするベクトル $g(x_1)=(g_1(x_1), \dots, g_{k_2}(x_1))$ に対して, $\Sigma_{22.1}^* = \mathcal{E}\{(x_2-g(x_1))'(x_2-g(x_1))|x_1\}$ と表わせれば, 式 (2.4) と比べて常に, $\Sigma_{22.1}^* \geq \Sigma_{22.1}$ (1.1 節の意味) で, 等号は $g(x_1)=\mu_2(x_1)$ のとき成立する。これはすべての $\alpha(1 \times k_2)$ に対して $\alpha \Sigma_{22.1}^* \alpha' \geq \alpha \Sigma_{22.1} \alpha'$ というのと同等である。

[定義] すべての α, A に対して $\alpha A \alpha' \geq \alpha A_0 \alpha'$ なる対称行列のクラスの要素 A_0 が存在するとき, A_0 自体クラス $\{A\}$ において最小であるという。

さて, 上の $g(x), g(x_1)$ のクラスとして,

$$g(x) = \alpha + x\beta', \quad (\beta: 1 \times k); \quad g(x_1) = \alpha + x_1 B, \quad (\alpha: 1 \times k_2, \quad B: k_1 \times k_2)$$

と線型のクラスに限り, その中で, 残差 (共) 分散 (行列) を最小にするものを考える。

$$\mathcal{E}(y) = \nu, \quad \mathcal{E}(x) = \mu, \quad \text{Var}(y) = \lambda_{00},$$

$$\mathcal{E}(x-\mu)'(x-\mu) = A, \quad \mathcal{E}(y-\nu)(x-\mu) = (\lambda_{01}, \dots, \lambda_{0k}) \equiv \lambda_0$$

なる記号を用いる。

[定理 2.2] $\mathcal{E}(y-\alpha-x\beta')^2$ を最小ならしめる α, β は, $\hat{\alpha} = \nu - \mu \hat{\beta}'$, $\hat{\beta} = \lambda_0 A^{-1}$ で, 最小残差分散は $\lambda_{00(1 \dots k)} = \lambda_{00} - \lambda_0 A^{-1} \lambda_0'$ である。

$$\begin{aligned} [\text{証明}] \quad \mathcal{E}(y-\alpha-x\beta')^2 &= \mathcal{E}\{(y-\nu) - (x-\mu)\beta' - (\alpha-\nu+\mu\beta')\}^2 \\ &= (\alpha-\nu+\mu\beta')^2 + \lambda_{00} + \beta A \beta' - 2\lambda_0 \beta' \\ &= (\alpha-\nu+\mu\beta')^2 + (\beta - \lambda_0 A^{-1}) A (\beta - \lambda_0 A^{-1})' \\ &\quad + (\lambda_{00} - \lambda_0 A^{-1} \lambda_0') \end{aligned}$$

各項とも非負であるから, これを最小にする α, β は定理のもので, そのとき上の第3項が最小値を与える。

$\hat{\beta}$ は \mathbf{x} に対する y の回帰係数のベクトルで、

$$y^* = \hat{\alpha} + \mathbf{x}\hat{\beta}' = \nu + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\lambda}_0 \quad (2.6)$$

は平均平方回帰平面といわれる。 $\text{Var}(y^*) = \boldsymbol{\lambda}_0\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\lambda}_0'$ であるから、 $\text{Var}(y) = \text{Var}(y^*) + \lambda_{00(1 \cdots k)}$ と y の全分散は、回帰による y の最良線型推定の分散と、残差分散に分解される。したがって、

$$e = \frac{\lambda_{00(1 \cdots k)}}{\text{Var}(y)} = 1 - \frac{\boldsymbol{\lambda}_0\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\lambda}_0'}{\lambda_{00}} \quad (2.7)$$

は回帰平面の当てはめの良さを測るものである。特に $k=1$ の場合には、

$$y^* = \nu + \rho \frac{\sigma_0}{\sigma_1} (x_1 - \mu_1), \quad \lambda_{00(1)} = \sigma_0^2(1 - \rho^2) \quad (2.8)$$

となる。ここに、 $\sigma_0^2 = \lambda_{00}$, $\sigma_1^2 = \lambda_{11}$, $\rho = \lambda_{01} / \sqrt{\lambda_{00}\lambda_{11}}$

一般の場合には、 $\mathcal{E}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2)$, 共分散行列を $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} > 0$ として次のように述べられる。

[定理 2.3] $\mathcal{E}\{(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}_1\mathbf{B})'(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}_1\mathbf{B})\}$ を最小にする $\boldsymbol{\alpha}$, \mathbf{B} は、 $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1\hat{\mathbf{B}}$, $\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$ で与えられ、このときの残差共分散行列は、 $\mathbf{A}_{22.1} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$ である。

[証明] 前定理と同様に

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}_1\mathbf{B})'(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}_1\mathbf{B})\} &= (\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}) \\ &\quad + (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1\mathbf{B})'(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1\mathbf{B}) + (\mathbf{B} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12})'\mathbf{A}_{11}(\mathbf{B} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}) \end{aligned}$$

と書けるから、任意の $\boldsymbol{\alpha}$ に対して二次形式を考えれば、定理の結果は得られる。

$\hat{\mathbf{B}}$ は \mathbf{x}_1 に対する \mathbf{x}_2 の回帰係数行列、 $\mathbf{x}_2^* = \boldsymbol{\mu}_2 + (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$ は平均平方線型回帰関数のベクトルといわれる。

2.2 重相関係数

式 (2.6) の y^* は残差分散最小の意味で、 y の \mathbf{x} に基づく最良線型推定を与えている。この y^* と y の間の相関係数を、 y と \mathbf{x} の間の重相関係数と

いい, $\bar{\rho}_{0(1\cdots k)}$ で表わす。

$$\bar{\rho}_{0(1\cdots k)} = \frac{\mathcal{E}(y - \mathcal{E}(y))(y^* - \mathcal{E}(y^*))}{\sqrt{\text{Var}(y)\text{Var}(y^*)}} = \sqrt{\lambda_0 \mathbf{A}^{-1} \lambda_0' / \lambda_{00}} \quad (2.9)$$

と計算され, これを用いて

$$\lambda_{00(1\cdots k)} = \lambda_{00}(1 - \bar{\rho}_{0(1\cdots k)}^2) \quad (2.10)$$

と表わせる。 $0 \leq \bar{\rho}_{0(1\cdots k)} \leq 1$ である。また (A.1.1) により

$$1 - \bar{\rho}_{0(1\cdots k)}^2 = \frac{\lambda_{00} - \lambda_0 \mathbf{A}^{-1} \lambda_0'}{\lambda_{00}} = \frac{\begin{vmatrix} \lambda_{00} & \lambda_0 \\ \lambda_0' & \mathbf{A} \end{vmatrix}}{\lambda_{00} |\mathbf{A}|} \quad (2.11)$$

と書くことができる。

[定理 2.4] [定理 2.2] と同じ記号で, y と最大の相関係数をもつ x の線型関数は式 (2.6) の y^* であり, そのときの最大相関係数が $\bar{\rho}_{0(1\cdots k)}$ である。

[証明] $\hat{\beta} = \lambda_0 \mathbf{A}^{-1}$ とおけば, [定理 2.2] により, 任意の c と $\alpha(1 \times k)$ に対して

$$\mathcal{E}\{y - \nu - (x - \mu)\hat{\beta}'\}^2 \leq \mathcal{E}\{y - \nu - c(x - \mu)\alpha'\}^2$$

両辺を展開して $\sqrt{\lambda_{00}\hat{\beta}\mathbf{A}\hat{\beta}'}$ で割れば,

$$2\bar{\rho}_{0(1\cdots k)} - \sqrt{\frac{\hat{\beta}\mathbf{A}\hat{\beta}'}{\lambda_{00}}} \geq 2c \frac{\mathcal{E}(y - \nu)(x - \mu)\alpha'}{\sqrt{\lambda_{00}\hat{\beta}\mathbf{A}\hat{\beta}'}} - c^2 \frac{\alpha\mathbf{A}\alpha'}{\sqrt{\lambda_{00}\hat{\beta}\mathbf{A}\hat{\beta}'}}$$

となるが, ここで $c^2 = \hat{\beta}\mathbf{A}\hat{\beta}'/\alpha\mathbf{A}\alpha'$ とおけば,

$$\bar{\rho}_{0(1\cdots k)} \geq \frac{\mathcal{E}(y - \nu)(x - \mu)\alpha'}{\sqrt{\lambda_{00}\alpha\mathbf{A}\alpha'}} = \frac{\mathcal{E}(y - \nu)\{\gamma + (x - \mu)\alpha'\}}{\sqrt{\lambda_{00}\alpha\mathbf{A}\alpha'}}$$

となり, 定理の結論を得る。

いま $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ の共分散行列 $\mathbf{A} = (\lambda_{ij})$ において, (x_1, \dots, x_k) に対応する \mathbf{A} の左上の $i \times i$ 小行列を \mathbf{A}_i とすれば, 式 (2.11) と同様に, $\lambda_{ii}(1 - \bar{\rho}_{i(1\cdots i-1)}^2) = |\mathbf{A}_i|/|\mathbf{A}_{i-1}|$ である。そこで相関行列を \mathbf{P} とすれば,

$$|\mathbf{P}| = \frac{|\mathbf{A}|}{\lambda_{11} \cdots \lambda_{kk}} = \prod_{i=1}^k \frac{|\mathbf{A}_i|}{\lambda_{ii} |\mathbf{A}_{i-1}|} = \prod_{i=1}^k (1 - \bar{\rho}_{i(1\cdots i-1)}^2) \quad (2.12)$$

が容易に得られる。 $\bar{\rho}_{i(1\cdots i-1)}$ を第 i 番目のステップ・ダウン重相関係数とよぶことがある。

2.3 偏相関係数

x_1 と x_2 の間の相関係数 ρ_{12} は、両者の間の関連の度合を測るものと考えられるが、他の変量に関与している場合には事情は単純ではない。 ρ_{12} が表わす内容の中には、 x_1 と x_2 の直接的な相関のほかに、他の変量を媒介にした間接的なものも混入している。偏相関というのは、他の変量の影響を除いて x_1 と x_2 の間の関係をみようとする概念である。

$(\mathbf{x}, y, z) = (x_1, \dots, x_k, y, z)$ を考え、その平均を (μ, η, ζ) 、共分散行列を

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \sigma' & \tau' \\ \sigma & \phi & \tau \end{bmatrix}$$

とする。 y, z の \mathbf{x} に基づく最良線型推定値 y^*, z^* はそれぞれ

$$y^* = \eta + (\mathbf{x} - \mu)\mathbf{A}^{-1}\sigma', \quad z^* = \zeta + (\mathbf{x} - \mu)\mathbf{A}^{-1}\tau'$$

である。このとき、 $y - y^*, z - z^*$ は \mathbf{x} の線型の影響を除いた残差と考えられる。両者の間の相関係数を、 y と z の間の、 \mathbf{x} の影響を除いた後の偏相関係数とよび、 $\rho_{yz \cdot 1 \dots k}$ と表わす。 $\mathcal{E}(y - y^*) = \mathcal{E}(z - z^*) = 0$ であるから

$$\begin{aligned} \rho_{yz \cdot 1 \dots k} &= \frac{\mathcal{E}(y - y^*)(z - z^*)}{\sqrt{\text{Var}(y - y^*)\text{Var}(z - z^*)}} \\ &= \frac{\phi_{12} - \sigma\mathbf{A}^{-1}\tau'}{\sqrt{(\phi_{11} - \sigma\mathbf{A}^{-1}\sigma')(\phi_{22} - \tau\mathbf{A}^{-1}\tau')}} \end{aligned} \quad (2.13)$$

である。もちろん $-1 \leq \rho_{yz \cdot 1 \dots k} \leq 1$ である。ところで、式 (2.13) の各量は残差共分散行列、 (2×2) 、 $\phi - \begin{pmatrix} \sigma \\ \tau \end{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} (\sigma' \tau')$ の要素である。このことに注意すれば、偏相関係数の定義を次のようにすることもできる。[定理 2.3] における残差共分散行列 $\mathbf{A}_{22 \cdot 1} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$ の i, j 要素を $\lambda_{ij \cdot 1 \dots k_1}$ と表わせれば

$$\rho_{ij \cdot 1 \dots k_1} = \frac{\lambda_{ij \cdot 1 \dots k_1}}{\sqrt{\lambda_{ii \cdot 1 \dots k_1} \lambda_{jj \cdot 1 \dots k_1}}} \quad (2.14)$$

が、 $\mathbf{x}_1 = (x_{11}, \dots, x_{1k_1})$ の影響を除いたときの x_{2i} と x_{2j} の間の偏相関係数である。

$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ において、 x_1 から (x_2, \dots, x_j) 、 $(j \leq k)$ の影響を除いたと

きの残差分散を $\lambda_{11(2\cdots j)}$ と表わす。

$$[\text{定理 2.5}] \quad \lambda_{11(2\cdots k)} = \lambda_{11(2\cdots k-1)}(1 - \rho_{1k, 2\cdots k-1}^2) \quad (2.15)$$

[証明] A から第 i 行, 第 j 列を除いた行列を $A_{(i,j)}$, 第 i, i' 行, 第 j, j' 列を除いたものを $A_{(ii', jj')}$ とすれば,

$$\lambda_{11(2\cdots k)} = |A|/|A_{(1,1)}|, \quad \lambda_{11(2\cdots k-1)} = |A_{(k,k)}|/|A_{(1k, 1k)}|$$

と書けるから,

$$\frac{\lambda_{11(2\cdots k)}}{\lambda_{11(2\cdots k-1)}} = \frac{|A|/|A_{(1k, 1k)}|}{|A_{(1,1)}|/|A_{(k,k)}|} \quad (2.16)$$

ヤコービの公式 (A.1.4) により, $|A|/|A_{(1k, 1k)}| = |A_{(1,1)}|/|A_{(k,k)}| - |A_{(1,k)}|^2$ であるから, 式 (2.16) の右辺は, $1 - |A_{(1,k)}|^2/|A_{(1,1)}||A_{(k,k)}|$ となる。ここで, $|A_{(1,k)}|/|A_{(1k, 1k)}| = \lambda_{1k, 2\cdots k-1}$, $|A_{(j,j)}|/|A_{(1k, 1k)}| = \lambda_{jj, 2\cdots k-1}$, $j=1, k$ に注意すれば, 結局, 式 (2.16) の右辺は $1 - \rho_{1k, 2\cdots k-1}^2$ となり定理を得る。

$$[\text{系}] \quad 1 - \rho_{1(2\cdots k)}^2 = (1 - \rho_{12}^2)(1 - \rho_{13, 2}^2)(1 - \rho_{14, 23}^2)\cdots(1 - \rho_{1k, 2\cdots k-1}^2) \quad (2.17)$$

[証明] $\lambda_{11(2\cdots j)} = \lambda_{11}(1 - \rho_{1(2\cdots j)}^2)$ であるから, [定理 2.5] により, $(1 - \rho_{1(2\cdots k)}^2) = (1 - \rho_{1(2\cdots k-1)}^2)(1 - \rho_{1k, 2\cdots k-1}^2)$ が得られる。この漸化式から, 式 (2.17) は明らかである。

2.4 正準相関係数

線型の意味で相関を考える最も一般的なものとしてベクトルとベクトルの間の相関を考える。 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1(1 \times k_1), \mathbf{x}_2(1 \times k_2))$ が共分散行列

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \end{matrix} \quad (2.18)$$

をもつものとする。平均ベクトルは一般性を失うことなく $\mathbf{0}$ としてよい。 $k_1 \leq k_2$ として議論を進める。

一次式 $u = \mathbf{a}\mathbf{x}_1'$, $v = \mathbf{b}\mathbf{x}_2'$ を考え, u と v の間の相関係数を最大にする \mathbf{a} , \mathbf{b} を求める。 u, v を常数倍してもその間の相関係数は変わらないから

$$1 = \text{Var}(u) = \mathbf{a}\mathbf{A}_{11}\mathbf{a}'; \quad 1 = \text{Var}(v) = \mathbf{b}\mathbf{A}_{22}\mathbf{b}' \quad (2.19)$$

と規準化する。ゆえに u と v の間の相関係数は,

$$\mathcal{E}(uv) = \mathcal{E}(\mathbf{a}\mathbf{x}_1' \mathbf{x}_2\mathbf{b}') = \mathbf{a}\mathbf{A}_{12}\mathbf{b}' \quad (2.20)$$

となる。これを式 (2.19) の条件の下で最大にするのであるが、ラグランジュの方法により

$$\psi = \mathbf{a}\mathbf{A}_{12}\mathbf{b}' - \frac{1}{2}\theta(\mathbf{a}\mathbf{A}_{11}\mathbf{a}' - 1) - \frac{1}{2}\omega(\mathbf{b}\mathbf{A}_{22}\mathbf{b}' - 1) \quad (2.21)$$

を最大にすればよい。(A. 3. 6) の演算法により

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{a}'} = \mathbf{A}_{12}\mathbf{b}' - \theta\mathbf{A}_{11}\mathbf{a}' = \mathbf{0}; \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{b}'} = \mathbf{A}_{21}\mathbf{a}' - \omega\mathbf{A}_{22}\mathbf{b}' = \mathbf{0} \quad (2.22)$$

\mathbf{a} , \mathbf{b} をそれぞれ上の式の左からかければ, 式 (2.19) の条件より, $\theta = \omega = \mathbf{a}\mathbf{A}_{12}\mathbf{b}'$ となり相関係数の意味をもつ。したがって式 (2.22) は

$$\begin{bmatrix} -\theta\mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & -\theta\mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.23)$$

と書け, これが恒等的に 0 でない解をもつためには θ が

$$\begin{vmatrix} -\theta\mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & -\theta\mathbf{A}_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.24)$$

の根でなければならない。この根が実数であることは容易に確かめられ, また (A. 1. 1) を式 (2.24) に適用すれば,

$$(-\theta)^{k_2-k_1} |\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} - \theta^2\mathbf{A}_{11}| = 0 \quad (2.25)$$

であるから, $k_1 + k_2$ 個の根のうち, $k_2 - k_1$ 個は常に 0 で, 残りは $\pm\theta_1, \pm\theta_2, \dots, \pm\theta_{k_1}$ の形である。ただし, $1 \geq \theta_i \geq 0, i=1, \dots, k_1$ である。いま

$$1 \geq \theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_{k_1} \geq 0 \quad (2.26)$$

とし, $(\phi_1, \dots, \phi_{k_1+k_2}) \equiv (\theta_1, \dots, \theta_{k_1}, 0, \dots, 0, -\theta_{k_1}, \dots, -\theta_1)$ とよび直す。 ϕ_j に対応する式 (2.23) の解を $\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j$ とし, $u_j = \mathbf{a}_j\mathbf{x}_1', v_j = \mathbf{b}_j\mathbf{x}_2'$ を考えれば

$$\mathcal{E}(u_j) = \mathcal{E}(v_j) = 0, \quad \text{Var}(u_j) = \text{Var}(v_j) = 1, \quad \mathcal{E}(u_j v_j) = \phi_j \quad (2.27)$$

であり, また, $i \neq j$ に対して, 式 (2.23) により

$$\phi_i \mathcal{E}(u_i u_j) = \phi_j \mathcal{E}(v_i v_j), \quad \phi_j \mathcal{E}(u_i u_j) = \phi_i \mathcal{E}(v_i v_j)$$

が得られ、これより

$$(\phi_i^2 - \phi_j^2)\mathcal{E}(u_i u_j) = 0, \quad (\phi_i^2 - \phi_j^2)\mathcal{E}(v_i v_j) = 0$$

となる。ゆえに、 $\phi_i^2 \neq \phi_j^2$ ならば、

$$\mathcal{E}(u_i u_j) = 0, \quad \mathcal{E}(v_i v_j) = 0 \quad (2.28)$$

であり、また

$$\mathcal{E}(u_i v_j) = 0, \quad \mathcal{E}(u_j v_i) = 0 \quad (2.29)$$

もわかる。

$(\theta_j, \mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j)$ が解であれば、 $(-\theta_j, -\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j)$, $(-\theta_j, \mathbf{a}_j, -\mathbf{b}_j)$ などともまた解であるが、われわれには大きいほうの相関係数が問題であることを合わせ考えて、次の $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ の内部一次変換が得られる。

$$\mathbf{A}' = (\mathbf{a}_1', \dots, \mathbf{a}_{k_1}'), \quad (k_1 \times k_1); \quad \mathbf{B}' = (\mathbf{b}_1', \dots, \mathbf{b}_{k_2}'), \quad (k_2 \times k_2)$$

$$\mathbf{D}_\phi = \text{diag}(\phi_1, \dots, \phi_{k_1})$$

とすれば、式 (2.27)~(2.29) の条件は、

$$\mathbf{A}\mathbf{A}_{11}\mathbf{A}' = \mathbf{I}_{k_1}, \quad \mathbf{B}\mathbf{A}_{22}\mathbf{B}' = \mathbf{I}_{k_2}, \quad \mathbf{A}\mathbf{A}_{12}\mathbf{B}' = [\mathbf{D}_\phi \mathbf{O}]$$

と表わされ、さらに

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}' & \mathbf{O} \\ \mathbf{O}' & \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{k_1} & \mathbf{D}_\phi \mathbf{O} \\ \mathbf{D}_\phi & \mathbf{I}_{k_2} \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

とまとめられる。ゆえに、 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{k_1})$, $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_{k_2})$ とすれば、 $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ の内部一次変換

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \begin{bmatrix} \mathbf{A}' & \mathbf{O}' \\ \mathbf{O}' & \mathbf{B}' \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

が存在して、 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) の共分散行列を式 (2.30) とすることができる。 \mathbf{u}, \mathbf{v} は正準変数のベクトル、 $\phi_1, \dots, \phi_{k_1}$ は正準相関係数とよばれ、H. Hotelling [18] により始められたものである。

$\theta = \phi$ とした式 (2.25) より

$$|\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} - \phi^2\mathbf{A}_{11}| = (-1)^{k_1} |\mathbf{A}_{11}| (\phi^2 - \phi_1^2) \cdots (\phi^2 - \phi_{k_1}^2) \quad (2.32)$$

が得られるが、ここで $\phi = 0$ とすれば

$$\begin{aligned}\phi_1^2 \phi_2^2 \cdots \phi_{k_1}^2 &= |\mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}| / |\mathbf{A}_{11}| \\ &= (-1)^{k_1} \begin{vmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{vmatrix} / |\mathbf{A}_{11}| |\mathbf{A}_{22}| \end{aligned} \quad (2.33)$$

が得られる。これらの平方根が、ベクトル相関係数と名づけられた量である。また、式 (2.32) で $\phi=1$ とおけば、

$$(1-\phi_1^2)(1-\phi_2^2)\cdots(1-\phi_{k_1}^2) = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{vmatrix} / |\mathbf{A}_{11}| |\mathbf{A}_{22}| \quad (2.34)$$

2.5 正準相関論と回帰論との関係

前節と同じ分割をもつ $\mathbf{x}=(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ を考える。[定理 2.3] の意味で、 \mathbf{x}_1 の \mathbf{x}_2 に対する線型回帰の係数行列を \mathbf{B}_{21} とすれば

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21} + (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21}) \quad (2.35)$$

と書くことができる。ここで、 $\mathbf{B}_{21} = \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}$ で、かつ、

$\mathcal{E}(\mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21})'(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21}) = \mathbf{O}$ である。そして、

$$\mathbf{x}_1 \mathbf{a}' = \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21} \mathbf{a}' + (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21}) \mathbf{a}'$$

を考え、 \mathbf{a} を残差分散を最小するように決めよう。すなわち、

$$\frac{\mathbf{a} \{ \mathcal{E}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21})'(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{B}_{21}) \} \mathbf{a}'}{\mathbf{a} \{ \mathcal{E}(\mathbf{x}_1' \mathbf{x}_1) \} \mathbf{a}'} = 1 - \frac{\mathbf{a} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{a}'}{\mathbf{a} \mathbf{A}_{11} \mathbf{a}'}$$

を最小にする \mathbf{a} を求める。これは、 $\mathbf{a} \mathbf{A}_{11} \mathbf{a}' = 1$ の下で $\mathbf{a} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{a}'$ を最大にすることで、したがって、 γ をラグランジュの未定係数として

$$\Psi = \mathbf{a} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{a}' - \frac{1}{2} \gamma (\mathbf{a} \mathbf{A}_{11} \mathbf{a}' - 1) \quad (2.36)$$

を最大にすればよく、 $\partial \Psi / \partial \mathbf{a}' = \mathbf{O}$ より

$$(\mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} - \gamma \mathbf{A}_{11}) \mathbf{a}' = \mathbf{O} \quad (2.37)$$

ゆえに、 $\mathbf{a} \neq \mathbf{O}$ なる解が存在するためには、 γ が

$$|\mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} - \gamma \mathbf{A}_{11}| = 0 \quad (2.38)$$

を満たさなければならない。これは正準相関係数の2乗に対する式 (2.25) と全く同等である。式 (2.37) の左から \mathbf{a} をかければ $\gamma = \mathbf{a} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{a}'$ であるから、われわれの γ は、式 (2.38) の根のうち最大のもの r_1 でなければ

ならない。 γ_1 に対応する解ベクトルを \mathbf{a}_1 とすれば、

〔定理 2・6〕 γ_1 は $y = \mathbf{x}_1 \mathbf{a}_1'$ と \mathbf{x}_2 の間の重相関係数の 2 乗である。

しかし、 $\mathbf{x}_1 \mathbf{a}_1'$ と \mathbf{x}_2 の間の相関だけで、 \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 の関係を全部説明し尽くすことは一般にできない。そこで、 $\mathbf{a} \mathbf{A}_{11} \mathbf{a}_1' = 0$, $\mathbf{a} \mathbf{A}_{11} \mathbf{a}' = 1$ の下で $\mathbf{a} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{a}'$ を最大にすることを考えれば、式 (2・38) の 2 番目に大きな根、 γ_2 が得られ、それに対応する一次式 $\mathbf{x}_1 \mathbf{a}_2'$ が得られる。 γ_2 は $\mathbf{x}_1 \mathbf{a}_2'$ と \mathbf{x}_2 の間の重相関係数の 2 乗の意味をもち、また \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 の間の正準相関係数の第 2 番目に大きなものの 2 乗と一致する。このようにして、正準相関係数の場合と全く同等な結果に達する。

さて \mathbf{x}_1 の \mathbf{x}_2 に対する回帰係数行列を $\mathbf{B}_{21} = \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}$, \mathbf{x}_2 の \mathbf{x}_1 に対する回帰係数行列を $\mathbf{B}_{12} = \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}$ とすれば、式 (2・38) より

$$|\mathbf{B}_{21}' \mathbf{A}_{22} \mathbf{B}_{21} - \gamma \mathbf{A}_{11}| = 0; \quad |\mathbf{B}_{12} \mathbf{B}_{21} - \gamma \mathbf{I}| = 0 \quad (2 \cdot 39)$$

が得られ、式 (2・33), (2・34) はそれぞれ

$$|\mathbf{B}_{12} \mathbf{B}_{21}| = \gamma_1 \gamma_2 \cdots \gamma_{k_1} \quad (2 \cdot 40)$$

$$|\mathbf{I} - \mathbf{B}_{12} \mathbf{B}_{21}| = (1 - \gamma_1)(1 - \gamma_2) \cdots (1 - \gamma_{k_1}) \quad (2 \cdot 41)$$

と書くことができる。

第3章 基本的分布

3.1 正規観測行列

k 変量正規分布 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{A})$ をもつ母集団からの大きさ n の任意標本を $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$ とする。いま

$$\boldsymbol{X} \equiv \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

$$\boldsymbol{M} \equiv \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_k \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_k \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

と表わせば, $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$ の同時密度関数が

$$(2\pi)^{-kn/2} |\boldsymbol{A}|^{-n/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} \boldsymbol{A}^{-1} (\boldsymbol{X} - \boldsymbol{M})' (\boldsymbol{X} - \boldsymbol{M}) \right\} \quad (3.3)$$

と書けることは容易にチェックされる。 \boldsymbol{X} のことを正規観測行列という。つまり, 各行が互いに独立で, k 変量正規分布 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{A})$ に従う $n \times k$ 行列である。 \boldsymbol{X} の同時密度が式 (3.3) であることを $\boldsymbol{X} \sim N_n(\boldsymbol{M}; \boldsymbol{A})$ で表わす。

3.2 標本平均の分布

任意の直交行列 $\boldsymbol{L}(n \times n)$ による変換 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{X}$ を施すとき, $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{L}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z}$, および $J(\boldsymbol{X} : \boldsymbol{Z}) = 1$ であるから, $\boldsymbol{Z} \sim N_n(\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}; \boldsymbol{A})$ であることは直ちにわかる。いま \boldsymbol{L} として, 第 n 行が $(1/\sqrt{n}, \dots, 1/\sqrt{n})$ であるものを用いれば,

$$\boldsymbol{Z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Y} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \boldsymbol{x} \end{bmatrix}_1^{n-1}, \quad \boldsymbol{L}\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix}_1^{n-1}$$

となる。ここに $\bar{\boldsymbol{x}} = \sum_{a=1}^n \boldsymbol{x}_a / n$, 標本平均ベクトルである。ゆえに

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y} + n\bar{\boldsymbol{x}}'\bar{\boldsymbol{x}} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned}(X-M)'(X-M) &= (Z-LM)'(Z-LM) \\ &= Y'Y + n(\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)\end{aligned}\quad (3.5)$$

となり、 Y と \bar{x} の同時分布は

$$(2\pi)^{-k(n-1)/2} |A|^{-(n-1)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} A^{-1} Y'Y\right\}, \quad (dY) \quad (3.6)$$

$$n^{k/2} (2\pi)^{-k/2} |A|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{n}{2} \text{tr} A^{-1} (\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)\right\}, \quad d(\bar{x}) \quad (3.7)$$

の積に書かれる。これより、 Y と \bar{x} は統計的に独立である。式 (3.4) より

$$Y'Y = X'X - n\bar{x}\bar{x}' = \sum_{\alpha=1}^n (x_{\alpha} - \bar{x})'(x_{\alpha} - \bar{x}) = V \quad (3.8)$$

であり、 $V/n = S^*$ は標本共分散行列、 $V/(n-1) = S$ は不偏共分散行列として知られているもので、 $n > k$ の場合、確率 1 で正値定符号である。

【定理 3.1】 正規母集団 $N(\mu, A)$ からの大きさ n の標本をとるとき、標本平均 $\bar{x} \sim N(\mu, A/n)$ で、かつ、積和行列 V とは独立である。また、 $V = Y'Y$, $Y \sim N_{n-1}(O; A)$ である。

さて、 $e(1 \times n) = (1, \dots, 1)$ を使えば、 $\bar{x} = (1/n)eX$, $Y'Y = X'(I_n - e'e/n)X$ と表わせるから、式 (3.4) は

$$X'X = X'\left(\frac{e'e}{n}\right)X + X'\left(I - \frac{e'e}{n}\right)X \quad (3.9)$$

なる形に書くことができる。これはまた

$$I = \frac{e'e}{n} + \left(I - \frac{e'e}{n}\right) \quad (3.10)$$

なる冪等行列への分解と同等である。 $(e'e/n)^2 = e'e/n$, $(I - e'e/n)^2 = I - e'e/n$ 。ここで重要なことは、 $(e'e/n)(I - e'e/n) = O$ となっていることで、これが \bar{x} と V との独立性に密接に関係している。

3.3 標本積和行列の分布——ウィッシュャート分布——

Wishart [62] の結果をより一般的な形で述べた Hsu の定理 [1, p. 319] を証明しよう。

[定理 3.2] (スーの定理) 確率行列 $X(\nu \times k)$, ($k \leq \nu$), の密度関数が,
 $p(X) = f(X'X)$ なる形のものであるならば, $V = X'X$ の密度関数は

$$p(V) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}k\nu - \frac{1}{4}k(k-1)}}{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} f(V) \quad (3.11)$$

[証明]* $A(k \times k)$ を任意の正則行列とし, $X = YA$ なる変換を施せば,
 $J(X:Y) = |A|^\nu$ であるから

$$p(Y) = f(A'Y'YA) |A|^\nu \quad (3.12)$$

となる。また (A.2.7) により, $Y(\nu \times k) = L(\nu \times k) \tilde{T}(k \times k)$ なる変換が存在する。ここに $L'L = I_k$ で, \tilde{T} は三角行列である。これにより Y を (L, \tilde{T}) に移し, $U = \tilde{T}'\tilde{T} (= Y'Y)$ により \tilde{T} を U に移せば

$$p(U) = f(A'UA) |A|^\nu J(U) \quad (3.13)$$

と書ける。ただし

$$J(U) = \int \cdots \int_{L'L = I_k} J(Y:L, \tilde{T}) J(\tilde{T}:U) dL$$

一方 $X = L^* \tilde{T}^*$, $V = \tilde{T}^{*'} \tilde{T}^* (= X'X)$ の変換により, $p(V) = f(V) J(V)$ が得られるが, これに変換 $V = A'WA$ を施せば, (A.5.4) により $J(V:W) = |A|^{k+1}$ であるから

$$p(W) = f(A'WA) J(A'WA) |A|^{k+1} \quad (3.14)$$

である。ところが, $W = A'^{-1}VA^{-1} = A'^{-1}X'XA^{-1} = Y'Y = U$ で,

$$p(U) = f(A'UA) J(A'UA) |A|^{k+1} \quad (3.15)$$

となる。式 (3.13) と (3.15) を比較すれば,

$$J(A'UA) = J(U) |A|^{\nu-k-1} \quad (3.16)$$

が得られる。これは任意の $U > 0$ に対して成立するから, 特に $U = I$ とすれば

$$J(A'A) = J(I) |A'|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)}$$

* ここに与える証明は, G. Rash [42] によるものである。

あるいは, $H = A'A$ として

$$J(H) = J(I) |H|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)}$$

A は任意の正則行列でよいから, H も任意の正値定符号の対称行列としてよく,

$$p(V) = J(V) f(V) = J(I) |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} f(V) \quad (3.17)$$

となる。

あとは $\int_{V>0} p(V) dV = 1$ となるように $J(I)$ を決めればよいが, ここでたいせつなことは, $J(I)$ が $f(\dots)$ の形に無関係な常数であることである。いま $f(\dots)$ として $N_v(\mathbf{O}; A)$ の密度関数を用いれば, $\Sigma = A^{-1}$ として, 証明すべきことは,

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_{V>0} |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr } \Sigma V\right\} dV \\ &= 2^{\frac{1}{2}k\nu} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}\nu} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

である。 $W = \Sigma^{\frac{1}{2}} V \Sigma^{\frac{1}{2}}$ とすれば, (A.5.4) より $J(V: W) = |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(k+1)}$ であるから

$$\begin{aligned} I &= |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \int_{V>0} |\Sigma^{\frac{1}{2}} V \Sigma^{\frac{1}{2}}|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr } \Sigma^{\frac{1}{2}} V \Sigma^{\frac{1}{2}}\right\} dV \\ &= |\Sigma|^{-\frac{1}{2}\nu} \int_{W>0} |W|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr } W\right\} dW \end{aligned}$$

ここで, $W = \tilde{T}' \tilde{T}$ なる変換をすると, (A.5.8) より $J(W: \tilde{T})$

$= 2^k \prod_{i=1}^k t_{ii}^{k+1-i}$ であるから

$$\begin{aligned} I &= 2^k |\Sigma|^{-\frac{1}{2}\nu} \int_{\tilde{T}' \tilde{T} > 0} \dots \int \left(\prod_{i=1}^k t_{ii}^2 \right)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \prod_{i=1}^k t_{ii}^{k+1-i} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i \leq j} t_{ij}^2\right\} dt_{11} \\ &\quad \dots dt_{kk} dt_{12} \dots dt_{k-1,k} \\ &= 2^k |\Sigma|^{-\frac{1}{2}\nu} \left\{ \prod_{i=1}^k \int_0^\infty t_{ii}^{\nu-i} e^{-\frac{1}{2} t_{ii}^2} dt_{ii} \right\} \left\{ \prod_{i < j} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{1}{2} t_{ij}^2} dt_{ij} \right\} \end{aligned}$$

$$= 2^{\frac{1}{2}k\nu} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}\nu} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]$$

$X \sim N_v(\mathbf{0}; \mathbf{A})$ のときの V の密度関数を書き下ろせば,

$$p(V) = \frac{1}{2^{\frac{1}{2}k\nu} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} |\mathbf{A}|^{-\frac{1}{2}\nu} |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\text{tr } \mathbf{A}^{-1}V\right\} \quad (3.19)$$

この分布がウィッシャート分布で, V をウィッシャート行列, ν を分布の自由度, \mathbf{A} を係数行列という。確率行列 V がウィッシャート分布に従うとき, $V \sim W(\mathbf{A}, k, \nu)$ と表わす。

[系] $N(\mu, \mathbf{A})$ からとられた大きさ n の任意標本における不偏共分散行列を $S(k \times k)$ とすれば

$$(n-1)S \sim W(\mathbf{A}, k, n-1) \quad (3.20)$$

である。

これは式 (3.8) から明らかである。

[定理 3.3] $V \sim W(\mathbf{A}, k, \nu)$ のとき, 正則行列 $C(k \times k)$ による変換 $W = CVC'$ を行なえば

$$W \sim W(CAC', k, \nu) \quad (3.21)$$

である。

証明は容易である。読者自ら試みよ。

[定理 3.4] $W(\mathbf{A}, k, \nu)$ の特性関数は

$$\phi(T) = |I - 2iAT|^{-\frac{1}{2}\nu} \quad (3.22)$$

[証明] 行列論により

$$CA^{-1}C' = I, \quad CTC' = D_\theta \equiv \text{diag}\{\theta_1, \dots, \theta_k\} \quad (3.23)$$

なる正則行列 C が存在する。 $V = C'WC$ なる変換を行なえば, 前定理により

$W \sim W(I, k, \nu)$ で

$$\begin{aligned}\phi(T) &= \mathcal{E}_W[\exp\{i \operatorname{tr} TV\}] = \mathcal{E}_W[\exp\{i \operatorname{tr} TC'WC\}] \\ &= \mathcal{E}_W[\exp\{i \operatorname{tr} D_\theta W\}] = \prod_{j=1}^k \mathcal{E}_{w_{jj}}[\exp(i\theta_j w_{jj})]\end{aligned}$$

と計算されるが、 w_{jj} は互いに独立な自由度 ν の χ^2 -変量であるから、結局、 w_{jj} の特性関数 $(1-2i\theta_j)^{-\nu/2}$ の積となる。ゆえに式 (3.23) を考慮すれば

$$\begin{aligned}\phi(T) &= \prod_{j=1}^k (1-2i\theta_j)^{-\nu/2} = |I-2iD_\theta|^{-\nu/2} \\ &= |CA^{-1}C' - 2iCTC'|^{-\nu/2} = \{|C|^2|A^{-1}|\}^{-\nu/2} |I-2iAT|^{-\nu/2}\end{aligned}$$

となり、 $|C|^2|A^{-1}|=1$ だから式 (3.22) が得られる。

[定理 3.5] $V_\alpha (\alpha=1, \dots, m)$ を互いに独立で、 $W(A, k, \nu_\alpha)$ に従うウィッシャート行列とすれば

$$V = \sum_{\alpha=1}^m V_\alpha \sim W(A, k, \sum_{\alpha=1}^m \nu_\alpha) \quad (3.24)$$

である。

[証明] V_α の特性関数 $\phi_\alpha(T)$ の積が V の特性関数 $\phi(T)$ であるから

$$\phi(T) = \prod_{\alpha=1}^m \phi_\alpha(T) = \prod_{\alpha=1}^m |I-2iAT|^{-\frac{1}{2}\nu_\alpha} = |I-2iAT|^{-\frac{1}{2}\sum_{\alpha} \nu_\alpha}$$

となる。これは、 $W(A, k, \sum_{\alpha} \nu_\alpha)$ の特性関数であるから、一意性の [定理 1.3] により結論を得る。

3.4 パートレットの分解、一般化分散

すでに、 $(n-1)S \sim W(A, k, n-1)$ を式 (3.20) で知っているのだから $(n-1)S = \tilde{T}'\tilde{T}$ と表わしたときの \tilde{T} の要素の分布を調べてみよう。

$J((n-1)S: \tilde{T}) = 2^k \prod_{i=1}^k t_{ii}^{k+1-i}$ であるから \tilde{T} の密度関数は式 (3.19) より

$$\frac{1}{2^{\frac{1}{2}k(n-3)} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]} |A|^{-\frac{1}{2}(n-1)} \prod_{i=1}^k t_{ii}^{n-1-i} \exp\left\{-\frac{1}{2} \operatorname{tr} A^{-1} \tilde{T}'\tilde{T}\right\} \quad (3.25)$$

(i) $A=I$ の場合、このときには、 $\operatorname{tr} A^{-1} \tilde{T}'\tilde{T} = \sum_{i,j} t_{ij}^2$ であるから

$t_{ij} \sim N(0, 1)$, ($i < j$), および $t_{ii} = \sqrt{\chi_{n-i}^2}$ で, これらはすべて互いに独立であることがわかる。

(ii) $A \neq I$ の場合には, $A = CC'$ なる C を用いれば, $(n-1)C^{-1}SC'^{-1} \sim W(I, k, n-1)$ であるから, $(n-1)C^{-1}SC'^{-1} = \tilde{T}'\tilde{T}$ としたときの \tilde{T} は (i) のときのものと同じで, 結局

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \cdots t_{1k} \\ & t_{22} \cdots t_{2k} \\ & 0 & \ddots \vdots \\ & & & t_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \chi_{n-1} & u_{12} & \cdots u_{1k} \\ & \chi_{n-2} & \cdots u_{2k} \\ & 0 & \ddots \vdots \\ & & & \chi_{n-k} \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

と書かれる。 $u_{ij} \sim N(0, 1)$, χ_{n-i}^2 は自由度 $n-i$ の χ^2 -変量であり, 各要素は互いに独立である。

これは $(n-1)C^{-1}SC'^{-1} \sim W(I, k, n-1)$ が, 互いに独立な χ^2 -分布と正規分布に分解されることを意味しており, パートレットの分解といわれている [3]。

上の結果を利用すれば, $V = (n-1)S$ としたとき, $|S|$, $|V|$ の積率は直ちに計算される。

$$|V| = |CC'| |T'T| = |A| \chi_{n-1}^2 \chi_{n-2}^2 \cdots \chi_{n-k}^2 \quad (3.27)$$

であるから, χ^2 -分布の積率を用いて

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\left(\frac{|V|}{|A|}\right)^h &= \prod_{i=1}^k \mathcal{E}(\chi_{n-i}^2) \\ &= \prod_{i=1}^k \frac{2^h \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]}, \quad h=0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.28)$$

と求まる。 $\mathcal{E}\{|S|/|A|\}^h = (n-1)^{-kh} \mathcal{E}\{|V|/|A|\}^h$

$|A|$, $|S|$ はそれぞれ母集団の, 標本の一般化分散とよばれている。 $k=1$ のときは明らかに自由度 $n-1$ の χ^2 -分布に従う。 $k=2$ のときは

$$\mathcal{E}\left(\frac{|V|}{|A|}\right)^{h/2} = 2^h \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-1)+h\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-2)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-1)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-2)\right]}, \quad h=0, 1, 2, \dots$$

ルジャンドルの公式 $\sqrt{\pi} \Gamma(2a) = 2^{2a-1} \Gamma(a) \Gamma\left(a + \frac{1}{2}\right)$ により

$$\mathcal{E}\left(\frac{|V|}{|A|}\right)^{h/2} = \frac{\Gamma(n-2+h)}{\Gamma(n-2)}, \quad h=0, 1, 2, \dots \quad (3.29)$$

となる。この右辺に 2^h を掛けたものは、 $\chi_{2(n-2)}^2$ の h 次の積率である。ゆえに次の結果を得る。

[定理 3.7] 2変量の場合、 $2(|V|/|A|)^{1/2}$ は自由度 $2(\nu-1)$ の χ^2 -分布に従う。ここに $\nu=n-1$ 。

3.5 標本残差共分散行列の分布

$V=(n-1)S \sim W(A, k, \nu=n-1)$, ($k \leq \nu$) とする。いま,

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \end{matrix}, \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} A^{11} & A^{12} \\ A^{21} & A^{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \end{matrix}, \quad V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \end{matrix}$$

母集団における残差共分散行列 $A_{11 \cdot 2} = A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}$ に対応する。標本量 $Z = V_{11} - V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}$ の分布を求めよう。

$$\begin{aligned} p(V) &= \text{const.} |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} A^{-1} V\right\} \\ &= \text{const.} |V_{22}|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} |V_{11} - V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr}(A^{11}V_{11} + A^{12}V_{21} + A^{21}V_{12} + A^{22}V_{22})\right\} \end{aligned}$$

V_{22} を止めて $V_{12}V_{22}^{-1/2} = L$, $V_{11} - LL' = Z$ により, (V_{12}, V_{11}) を (L, Z) に変換すれば, $J(V_{12}, V_{11}; L, Z) = J(V_{12}; L)J(V_{11}; Z) = |V_{22}|^{\frac{1}{2}k_1}$ [(A.5.1), (A.5.3)] であるから

$$\begin{aligned} p(Z, L, V_{22}) &= \text{const.} |Z|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} A^{11} Z\right\} \\ &\quad \cdot |V_{22}|^{\frac{1}{2}(\nu-k_2-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr}(L'A_{11}^{11}L + L'A^{12}V_{22}^{1/2} \right. \\ &\quad \left. + V_{22}^{1/2}A^{21}L + V_{22}^{1/2}A^{22}V_{22}^{1/2})\right\} \end{aligned} \quad (3.30)$$

となる。これより \mathbf{Z} と $(\mathbf{L}, \mathbf{V}_{22})$ は独立である。ゆえに $\mathbf{L}, \mathbf{V}_{22}$ について積分すれば

$$p(\mathbf{Z}) = \text{const.} |\mathbf{Z}|^{\frac{1}{2}(\nu - k_2) - k_1 - 1} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}^{11} \mathbf{Z}\right\}$$

すなわち, $W((\mathbf{A}^{11})^{-1}, k_1, \nu - k_2)$ の密度関数である。 $\mathbf{A}^{11} = (\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21})^{-1} = \mathbf{A}_{11 \cdot 2}^{-1}$ (A. 1.6) に注意すれば

〔定理 3.8〕 $\mathbf{V}_{11 \cdot 2} = \mathbf{V}_{11} - \mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21}$ は $\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21}$ あるいは, $\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1}$ と独立に $W(\mathbf{A}_{11 \cdot 2}, k_1, \nu - k_2)$ に従う。

3.6 非心 χ^2 -分布, 非心 F -分布

$\mathbf{x}(1 \times \nu) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{I})$ のとき, $\chi'^2 = \mathbf{x} \mathbf{x}' = x_1^2 + \cdots + x_\nu^2$ の分布は, 非心 χ^2 -分布といわれ, その密度関数は

$$p(\chi'^2) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j(\lambda) f_{\nu+2j}(\chi'^2) \quad (3.31)$$

と書かれる。ここに

$$c_j(\lambda) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^j}{j!}, \quad \lambda = \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{\mu}' \quad (3.32)$$

$$f_{\nu+2j}(u) = \frac{1}{2^{\frac{1}{2}(\nu+2j)} \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+2j)\right]} u^{\frac{1}{2}(\nu+2j)-1} e^{-\frac{1}{2}u} \quad (3.33)$$

すなわち, $c_j(\lambda)$ は係数 λ のポアソン分布の確率, $f_{\nu+2j}(u)$ は自由度 $\nu+2j$ の普通の χ^2 -分布の密度関数である。 λ は分布の非心率といわれる。次に χ_m^2 を自由度 m の中心的 χ^2 -変量, $\chi_\nu'^2$ を自由度 ν , 非心率 λ の非心 χ^2 -変量とし, かつ両者は独立であるとする。このとき, $F' = (\chi_\nu'^2/\nu)/(\chi_m^2/m)$ の密度関数は

$$p(F') = \sum_{j=0}^{\infty} c_j(\lambda) f_{\nu+2j,m}(F') \quad (3.34)$$

で, $c_j(\lambda)$ は式 (3.32) と同じく,

$$f_{\nu+2j, m}(y) = \frac{\left(\frac{\nu}{m}\right)^{\frac{1}{2}(\nu+2j)} y^{\frac{1}{2}(\nu+2j)-1}}{B\left[\frac{1}{2}(\nu+2j), \frac{1}{2}m\right] \left(1 + \frac{\nu}{m}y\right)^{\frac{1}{2}(\nu+m+2j)}} \quad (3.35)$$

である。 F' の分布は、非心率 λ をもつ自由度 $(\nu+2j, m)$ の非心 F -分布とよばれる。

3.7 ホテリングの T^2 -分布

$\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ とし、大きさ n の任意標本における平均を $\bar{\mathbf{x}}$ 、積和行列を $(n-1)\mathbf{S} = \mathbf{V}$ とすれば、[定理 3.1] および [定理 3.2] の系により、 $\bar{\mathbf{x}}$ と \mathbf{V} は独立で、かつ、 $\bar{\mathbf{x}} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}/n)$ 、 $\mathbf{V} \sim W(\mathbf{A}, k, n-1)$ である。指定された $\boldsymbol{\mu}_0$ に対して統計量

$$T^2 = n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)' = (n-1)n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)\mathbf{V}^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)' \quad (3.36)$$

をホテリングの T^2 -統計量という [17]。 $\sqrt{n}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0) = \mathbf{y} \sim N\{\sqrt{n}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}_0), \mathbf{A}\}$ であるから $T^2/(n-1) = \mathbf{y}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}'$ とすれば、任意の正則行列 $\mathbf{C}(k \times k)$ に対して

$$T^2/(n-1) = (\mathbf{y}\mathbf{C})(\mathbf{C}'\mathbf{V}\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{y}\mathbf{C})' = \mathbf{y}^*\mathbf{V}^{*-1}\mathbf{y}^{*'} = \mathbf{y}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}' \quad (3.37)$$

と不変である。いま $\mathbf{C} = \mathbf{A}^{-1/2}$ (A.2.3) とするとき、[定理 1.7] および [定理 3.3] を考慮すると、 $\boldsymbol{\eta} = \sqrt{n}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}_0)\mathbf{A}^{-1/2}$ 、 $\nu = n-1$ として

$$\mathbf{y}^* \sim N(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{I}), \quad \mathbf{V}^* \sim W(\mathbf{I}, k, \nu) \quad (3.38)$$

である。そして $T^2/\nu = \mathbf{y}^*\mathbf{V}^{*-1}\mathbf{y}^{*'}$ の分布を求めよう。式 (3.37) の \mathbf{C} とし、第 1 列が $\mathbf{y}^{*'}(\mathbf{y}^*\mathbf{y}^{*'})^{-1/2}$ である直交行列 \mathbf{A} を用いれば

$$\mathbf{z} = \mathbf{y}^*\mathbf{A} = (\sqrt{\mathbf{y}^*\mathbf{y}^{*'}}, 0, \dots, 0), \quad \mathbf{W} = \mathbf{A}'\mathbf{V}^*\mathbf{A}$$

と変換して

$$T^2/\nu = \mathbf{z}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{z}' = (\mathbf{y}^*\mathbf{y}^{*'})(1, 0, \dots, 0)\mathbf{W}^{-1}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = (\mathbf{y}^*\mathbf{y}^{*'})w^{11}$$

となる。ここに、(A.1.6) により $w^{11} = (w_{11} - w_1\mathbf{W}_{22}^{-1}w_1')^{-1}$ と書ける。ただし

$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_1 \\ w_1' & W_{22} \end{bmatrix}$ である。さて、 $1/w^{11}$ は A 、したがって y^* に依存しているが、 A を止めたときの $1/w^{11}$ の条件つき分布を考えれば、[定理 3.3]、[定理 3.8] により、 $1/w^{11}$ は自由度 $\nu - k + 1$ の χ^2 -変量であり、その分布は A に依存しない。ゆえに $1/w^{11}$ は y^* と独立である。一方 $(y^* y^{*'})$ は 3.6 節により非心率 $\lambda = \eta\eta'/2 = n(\mu - \mu_0)A^{-1}(\mu - \mu_0)'/2$ をもつ自由度 k の非心 χ^2 -分布に従う。こうして $T^2/\nu = \chi_k'^2/\chi_{\nu+1-k}^2$ と表わすことができ、再び 3.6 節により

[定理 3.9] $y(1 \times k) \sim N(\xi, A)$, $V \sim W(A, k, \nu)$ のとき、 $T^2(\nu+1-k)/k\nu = [(\nu+1-k)/k] y V^{-1} y'$ は非心率 $\lambda = \xi A^{-1} \xi'/2$ をもつ自由度 $(k, \nu+1-k)$ の非心 F -分布に従う。

もし $\xi = 0$ であれば、 $T^2(\nu+1-k)/k\nu$ は同じ自由度の中心的 F -分布に従う。

次に二つの分布 $x_1(1 \times k) \sim N(\mu_1, A)$, $x_2(1 \times k) \sim N(\mu_2, A)$ を考える。おのおのからの大きさ n_1, n_2 の任意標本における平均、積和行列に対して、 $\bar{x}_1 \sim N(\mu_1, A/n_1)$, $\bar{x}_2 \sim N(\mu_2, A/n_2)$; $V_1 = (n_1 - 1)S_1 \sim W(A, k, n_1 - 1)$, $V_2 = (n_2 - 1)S_2 \sim W(A, k, n_2 - 1)$ とすれば、[定理 3.5] により $y = \sqrt{n_1 n_2 / (n_1 + n_2)} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2) \sim N\{\sqrt{n_1 n_2 / (n_1 + n_2)}(\mu_1 - \mu_2), A\}$, $V = V_1 + V_2 \sim W(A, k, n_1 + n_2 - 2)$ であるから、[定理 3.9] が使えて

$$T^2/(n_1 + n_2 - 2) = y V^{-1} y' = (n_1 n_2 / (n_1 + n_2)) (\bar{x}_1 - \bar{x}_2) V^{-1} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' \quad (3.39)$$

とするとき、 $T^2(n_1 + n_2 - k - 1)/k(n_1 + n_2 - 2)$ の分布は非心率 $\lambda = (n_1 n_2 / (n_1 + n_2))(\mu_1 - \mu_2)A^{-1}(\mu_1 - \mu_2)'$ をもつ自由度 $(k, n_1 + n_2 - k - 1)$ の非心 F -分布である。

2 標本問題で二つの母集団共分散行列 A_1, A_2 が異なっている場合については、H. Scheffé [46], B. M. Bennett [5], G. S. James [25] を参照せよ。

3.8 多次元ベータ分布

$V \sim W(I, k, m)$, $W \sim W(I, k, n)$ で両者は独立とする。このとき

$$Z = V^{-1/2} W V^{-1/2} \quad (3.40)$$

の分布を考える。 V と W の同時分布は

$$p(V, W) = c(k, m) c(k, n) |V|^{\frac{1}{2}(m-k-1)} |W|^{\frac{1}{2}(n-k-1)} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}(V+W) \right\} \\ c(k, \nu) = 2^{-\frac{1}{2}k\nu} \pi^{-\frac{1}{4}k(k-1)} \left\{ \prod_{i=1}^k \Gamma \left[\frac{1}{2}(\nu+1-i) \right] \right\}^{-1}$$

である。ゆえに V と Z の同時分布は、 $J(W: Z) = |V|^{\frac{1}{2}(k+1)}$ であるから

$$p(V, Z) = c(k, m) c(k, n) |V|^{\frac{1}{2}(m+n-k-1)} |Z|^{\frac{1}{2}(n-k-1)} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} V(I+Z) \right\}$$

V を積分により消去すれば

$$p(Z) = \frac{c(k, m) c(k, n)}{c(k, m+n)} |Z|^{\frac{1}{2}(n-k-1)} \int_{V>0} c(k, m+n) |V|^{\frac{1}{2}(m+n-k-1)} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} V(I+Z) \right\} dV \\ = \frac{c(k, m) c(k, n)}{c(k, m+n)} |Z|^{\frac{1}{2}(n-k-1)} \frac{1}{|I+Z|^{\frac{1}{2}(m+n)}}$$

いま,

$$\Gamma_k(a) = \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma \left[a - \frac{1}{2}(i-1) \right], \quad B_k(a, b) = \frac{\Gamma_k(a) \Gamma_k(b)}{\Gamma_k(a+b)}$$

なる記号を導入すれば

$$p(Z) = \frac{1}{B_k \left(\frac{m}{2}, \frac{n}{2} \right)} \frac{|Z|^{\frac{1}{2}(n-k-1)}}{|I+Z|^{\frac{1}{2}(m+n)}}, \quad (Z>0) \quad (3.41)$$

と書かれる。この分布は、 $Y = (I+Z)^{-1}Z$ で Y に変換すれば、 $J(Z: Y) = |I-Y|^{-(k+1)}$ と計算されるから

$$p(Y) = \frac{1}{B_k\left(\frac{m}{2}, \frac{n}{2}\right)} |Y|^{\frac{1}{2}(n-k-1)} |I-Y|^{\frac{1}{2}(m-k-1)}, \quad (I > Y > 0)$$

(3.42)

となる。式 (3.41) と (3.42) が一般化ベータ分布とよばれるものである。

次に $X(m \times k) \sim N_m(O; A)$, $V \sim W(A, k, \nu)$ とし, $k \geq m$ なる場合を考え
る。このとき統計量

$$W = XV^{-1}X' \quad (3.43)$$

をステューデント化された (中心的) ウィッシュャート行列という。 X と V が独立であるとして, W の分布を求めよう。まず任意の正則行列による変換 $X \rightarrow XC$, $V \rightarrow C'VC$ の下で W が不変であることに注意すれば, 一般性を失うことなく $A = I$ としてよい。このとき X と V の同時密度関数は

$$p(X, V) = c |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\text{tr}(X'X + V)\right\}$$

$$c^{-1} = 2^{\frac{1}{2}k(m+\nu)} \pi^{\frac{1}{2}km + \frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]$$

これに $X = LV^{\frac{1}{2}}$ なる変換を施せば, $J(X:L) = |V|^{\frac{1}{2}m}$ であるから

$$p(L, V) = c |V|^{\frac{1}{2}(\nu+m-k-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\text{tr } V(I+L'L)\right\}$$

これから V を積分により消去すれば

$$p(L) = \frac{c}{c(k, \nu+m)} \frac{1}{|I_k + L'L|^{\frac{1}{2}(\nu+m)}} = \frac{c}{c(k, \nu+m)} \frac{1}{|I_m + LL'|^{\frac{1}{2}(\nu+m)}}$$

(3.44)

[∵ (A.1.2)]

である。 $c(k, \nu+m)$ は $W(I, k, \nu+m)$ の常数因子である。 $W = LL' = XV^{-1}X'$ であるから, 式 (3.44) の形から, スーの [定理 3.2] を適用すれば, W の密度関数が直ちに得られる。すなわち, 常数を整理して,

$$p(W) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}m(m-1)}} \prod_{i=1}^m \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+m+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+m+1-k-i)\right]} \cdot \frac{|W|^{\frac{1}{2}(k-m-1)}}{|I_m + W|^{\frac{1}{2}(\nu+m)}}, \quad (W > 0) \quad (3.45)$$

である。一般化 ベータ 分布の詳しい議論については、C. L. Siegel [47], R. Bellman [4], I. Olkin [34], I. Olkin & H. Rubin [35] を参照せよ。

3.9 二次形式の独立性, コクランの定理

[定理 3.10] $\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ のとき, 二つの二次形式 \mathbf{xAx}' , \mathbf{xBx}' が独立であるための必要かつ十分な条件は, $\mathbf{AB} = \mathbf{0}$ である。

[証明] 十分であること: $\mathbf{AB} = \mathbf{0}$ であれば,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{\exp(it\mathbf{xAx}' + is\mathbf{xBx}')\} &= \mathcal{E}\{\exp[i\mathbf{x}(t\mathbf{A} + s\mathbf{B})\mathbf{x}']\} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{I} - 2it\mathbf{A} - 2is\mathbf{B}|^{1/2}} = \frac{1}{|\mathbf{I} - 2it\mathbf{A} - 2is\mathbf{B} + (2i)^2ts\mathbf{AB}|^{1/2}} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{I} - 2it\mathbf{A}|^{1/2}} \cdot \frac{1}{|\mathbf{I} - 2is\mathbf{B}|^{1/2}} \\ &= \mathcal{E}\{\exp(it\mathbf{xAx}')\} \mathcal{E}\{\exp(is\mathbf{xBx}')\} \end{aligned}$$

となるから十分性は成立している。

必要であること: \mathbf{xAx}' と \mathbf{xBx}' が独立であるとすれば, これは特性関数のほうで

$$|\mathbf{I} - \alpha\mathbf{A} - \beta\mathbf{B}| = |\mathbf{I} - \alpha\mathbf{A}| \cdot |\mathbf{I} - \beta\mathbf{B}| \quad (3.46)$$

($\alpha = 2it$, $\beta = 2is$) がすべての純虚数 α , β に対して成立していることを意味している。これより $|\mathbf{I} - \beta\mathbf{B}| = |\mathbf{I} - \beta(\mathbf{I} - \alpha\mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}|$ が得られるが, これに対して次の公式を用いる。 \mathbf{H} を正方行列とすれば

$$|\mathbf{I} + c\mathbf{H}| = 1 + c \operatorname{tr} \mathbf{H} + c^2 \operatorname{tr}_2 \mathbf{H} + \cdots + c^k |\mathbf{H}| \quad (3.47)$$

が成立する。ここで $\operatorname{tr}_j \mathbf{H}$ は j 次の主対角小行列式のすべての和である。ゆえに

$$1 - \beta \operatorname{tr} \mathbf{B} + \beta^2 \operatorname{tr}_2 \mathbf{B} - \cdots = 1 - \beta \operatorname{tr} (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A})^{-1} \mathbf{B} + \beta^2 \operatorname{tr}_2 (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A})^{-1} \mathbf{B} - \cdots$$

これより

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} \mathbf{B} &= \operatorname{tr} (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A})^{-1} \mathbf{B} = \operatorname{tr} (\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} + \alpha^2 \mathbf{A}^2 + \cdots) \mathbf{B} \\ &= \operatorname{tr} \mathbf{B} + \alpha \operatorname{tr} \mathbf{A} \mathbf{B} + \alpha^2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 \mathbf{B} + \cdots \end{aligned}$$

なる関係が得られる。これは絶対値が十分小さい α の区間で成立するから $\operatorname{tr} \mathbf{A}^j \mathbf{B} = 0$, $j=1, 2, \dots$ でなければならない。全く同様の手続きで $\operatorname{tr} \mathbf{A} \mathbf{B}^j = 0$, $j=1, 2, \dots$ が得られる。また式 (3.46) から

$$\log |\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A} - \beta \mathbf{B}| = \log |\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A}| + \log |\mathbf{I} - \beta \mathbf{B}|$$

となるが、これに展開公式

$$\log |\mathbf{I} + c \mathbf{G}| = c \operatorname{tr} \mathbf{G} - \frac{c^2}{2} \operatorname{tr} \mathbf{G}^2 + \frac{c^3}{3} \operatorname{tr} \mathbf{G}^3 - \cdots \quad (3.48)$$

(\mathbf{G} は対称で, $|c \cdot \operatorname{ch}(\mathbf{G})| < 1$) を適用すれば

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} (\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B}) + \frac{1}{2} \operatorname{tr} (\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B})^2 + \cdots \\ = \left(\alpha \operatorname{tr} \mathbf{A} + \frac{1}{2} \alpha^2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 + \cdots \right) + \left(\beta \operatorname{tr} \mathbf{B} + \frac{1}{2} \beta^2 \operatorname{tr} \mathbf{B}^2 + \cdots \right) \end{aligned}$$

これを整理してゆけば

$$0 = \{ \operatorname{tr} (\mathbf{A} \mathbf{B})^2 + 2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 \mathbf{B}^2 \} + (\alpha^r \beta^s, \quad r, s \geq 0, \quad r+s \geq 1 \text{ の項})$$

が得られる。ゆえに α, β を 0 とおけば $2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 \mathbf{B}^2 + \operatorname{tr} (\mathbf{A} \mathbf{B})^2 = 0$ を得る。いま $\mathbf{C} = (c_{ij}) = \mathbf{A} \mathbf{B}$ とおけば

$$0 = 2 \operatorname{tr} \mathbf{C} \mathbf{C}' + \operatorname{tr} \mathbf{C}^2 = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k (c_{ij}^2 + c_{ij} c_{ji} + c_{ji}^2) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \left\{ \left(c_{ij} + \frac{1}{2} c_{ji} \right)^2 + \frac{3}{4} c_{ji}^2 \right\}$$

となるが、この右辺は $c_{ij} = 0$, $i, j=1, \dots, k$ 以外では正である。こうして $\mathbf{C} = \mathbf{A} \mathbf{B} = \mathbf{O}$ が得られる。

さていままでは $\mathbf{x} \sim N(\mathbf{O}, \mathbf{I})$ として議論したけれども、 $\mathbf{x} \sim N(\mathbf{O}, \mathbf{A})$ のときには、 $\mathbf{y} = \mathbf{x} \mathbf{A}^{-1/2} \sim N(\mathbf{O}, \mathbf{I})$ であるから、定理の必要十分条件は次のようになる。

【系】 $\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\mathbf{O}, \mathbf{A})$ のとき、 $\mathbf{x} \mathbf{A} \mathbf{x}'$, $\mathbf{x} \mathbf{B} \mathbf{x}'$ が独立であるための必要

かつ十分な条件は $AAB=O$ である。

〔定理 3・11〕 $X(n \times k) \sim N_n(O; I)$, $(n \geq k)$ のとき, $\text{tr} AX'X$ と $\text{tr} BX'X$ が独立であるための必要かつ十分な条件は $AB=O$ である。ただし, A, B は $k \times k$ の対称行列である。

証明は読者の練習問題に残しておこう。

〔定理 3・12〕 $X'A_1X$ と $X'A_2X$ が独立であるための必要十分条件は, $A_1A_2=O$ である。ここに A_1, A_2 は $n \times n$ で対称である。

〔証明〕 X の k 個の列を $x_1^{*'}, \dots, x_k^{*}$ と表わせれば, 特性関数 $\mathcal{E}\{\exp(i \text{tr} T_1 X' A_1 X)\}$ において

$$\begin{aligned} \text{tr} T_1 X' A_1 X &= \sum_{i,j=1}^k t_{ij}^{(1)} x_i^{*'} A_1 x_j^{*'} = \sum_{i,j=1}^k x_i^{*'} (t_{ij}^{(1)} A_1) x_j^{*'} \\ &= (x_1^{*'}, \dots, x_k^{*'}) (T_1 \times A_1) \begin{bmatrix} x_1^{*'} \\ \vdots \\ x_k^{*'} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と書ける。 $T_1 \times A_1$ はクロネッカー積である。ゆえに $X \sim N_n(O; I_k)$ の代わりに, $y = (x_1^{*'}, \dots, x_k^{*'}) \sim N(O, I_{nk})$ と考えれば

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{\exp(i \text{tr} T_1 X' A_1 X)\} &= \mathcal{E}\{\exp(i y' (T_1 \times A_1) y)\} \\ &= |I_{nk} - 2i T_1 \times A_1|^{-1/2} \end{aligned}$$

と求められる。同様に

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{\exp(i \text{tr} T_2 X' A_2 X)\} &= |I_{nk} - 2i T_2 \times A_2|^{-1/2} \\ \mathcal{E}\{\exp(i \text{tr} T_2 X' A_2 X + i \text{tr} T_1 X' A_1 X)\} \\ &= |I_{nk} - 2i T_1 \times A_1 - 2i T_2 \times A_2|^{-1/2} \end{aligned}$$

であるから, [定理 3・10] の証明と全く同じようにして $(T_1 \times A_1)(T_2 \times A_2) = (T_1 T_2) \times (A_1 A_2) = O$ なる条件が得られる。 $T_1 T_2$ は O 以外の任意の行列であるから, 結局求める必要十分条件は, $A_1 A_2 = O$ となる。

最後に, $N(0, 1)$ に従う互いに独立な n 個の確率変数の 2 乗和を, 互いに独立に χ^2 -分布に従う二次形式に分割する場合に重要な役割をするコクランの定理 [7] を多変量解析に適するように観測行列のことばで述べておく。

[定理 3.13] $X(n \times k) \sim N_n(\mathbf{O}; I_k)$ で

$$\begin{aligned} X'X &= X'A_1X + X'A_2X + \cdots + X'A_mX \\ &= Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_m \end{aligned} \quad (3.49)$$

と表わされているものとしよう。 A_i の階数を $r(A_i) = n_i$ とするとき, Q_i , $i=1, \dots, m$ が互いに独立で, かつ, $Q_i = Y_i'Y_i$, $Y_i(n_i \times k) \sim N_{n_i}(\mathbf{O}; I_k)$, $i=1, \dots, m$ とする直交変換 $Y(n \times k) = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix} = \Delta X$ が存在するための必要十分条件は, $n = n_1 + \cdots + n_m$ である。

[系] もし $n_i \geq k$ ならば, $Q_i = X'A_iX \sim W(I, k, n_i)$

式 (3.49) の表示において行列の間に

$$I_n = A_1 + A_2 + \cdots + A_m \quad (3.50)$$

なる関係がある。もし $n = n_1 + \cdots + n_m$ であれば, Q_i , $i=1, \dots, m$ が互いに独立となり, [定理 3.12] により, $A_iA_j = \mathbf{O}$, $i \neq j$ である。ゆえに式 (3.50) の両辺に A_i を掛ければ, $A_i = A_i^2$ が得られる。すなわち, A_i , $i=1, \dots, m$ は冪等行列であることがわかる。

第4章 推定の問題

4.1 最大尤度推定ベクトル

k 変量母集団が m 個の未知パラメータ $\theta_1, \dots, \theta_m$ を含んでおり、その密度関数が $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_m)$ の形に与えられているものとする。大きさ n の任意標本、すなわち、観測行列 $\mathbf{X}'(k \times n) = (\mathbf{x}_1', \dots, \mathbf{x}_n')$ に対する尤度関数を $L(\boldsymbol{\theta}) = f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta}) = f(\mathbf{x}_1; \boldsymbol{\theta}) \cdots f(\mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta})$ で表わすとき、 $\boldsymbol{\theta}$ の最大尤度推定ベクトル $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m)$ は、 m 元連立方程式

$$\frac{\partial \log L(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i} = \sum_{a=1}^n \frac{\partial \log f(\mathbf{x}_a; \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i} = 0, \quad i=1, \dots, m \quad (4.1)$$

の解を求めることによって得られる*。もし、式 (4.1) の解が二つ以上ある場合には、それらのうち $L(\boldsymbol{\theta})$ を最大にするものを $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ とする。

〔定理 4.1〕 $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m)$ を $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_m)$ の最大尤度推定ベクトル (以後 MLE と書く) とし、 $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\theta}) = (\phi_1(\boldsymbol{\theta}), \dots, \phi_m(\boldsymbol{\theta}))$ を $\boldsymbol{\theta}$ と $\boldsymbol{\theta}^*$ の間の 1 対 1 変換とすれば、 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^* = \boldsymbol{\phi}(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ は $\boldsymbol{\theta}^*$ の MLE である。もし $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ が一意であれば $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$ も一意である。

〔証明〕 $L^*(\boldsymbol{\theta}^*) = L(\boldsymbol{\phi}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*))$ とする。ここに $\boldsymbol{\phi}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*)$ は $\boldsymbol{\theta}^*$ の原像で、これは一意である。すると

$$L^*(\boldsymbol{\theta}^*) = L(\boldsymbol{\phi}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*)) = L(\boldsymbol{\theta}) \leq L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = L(\boldsymbol{\phi}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}^*)) = L^*(\hat{\boldsymbol{\theta}}^*)$$

で $L^*(\boldsymbol{\theta}^*)$ は $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$ で最大となる。もし $L(\boldsymbol{\theta})$ の $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ における最大値が一意であれば、 $\boldsymbol{\theta} \neq \hat{\boldsymbol{\theta}}$ に対しては $L(\boldsymbol{\theta}) < L(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 。ゆえに $\boldsymbol{\theta}$ と $\boldsymbol{\theta}^*$ の対応が 1 対 1 であるから $L^*(\boldsymbol{\theta}^*)$ の最大値は一意である。

次の定理は MLE を求める時便利である。

* $L(\boldsymbol{\theta})$ は \mathbf{X} を止めて $\boldsymbol{\theta}$ の関数と考えたときの概念で、したがって式 (4.1) の解は、この止めた \mathbf{X} の値の関数として求められる。これを改めて確率行列 \mathbf{X} の関数、すなわち、統計量と考えたものが、最大尤度推定ベクトルである。

[定理 4.2] $A(k \times k) \geq 0$, $A(k \times k) > 0$ とするとき

$$f(A) \equiv c \log |A| - \text{tr}(AA) \leq kc \log c - kc - c \log |A| \quad (4.2)$$

が成立する。ここに $c > 0$ 。等号, すなわち, $f(A)$ の最大値は $A = cA^{-1}$ のとき得られる。

[証明]* $Z = AA$ とおき

$$g(Z) = c \log |Z| - \text{tr} Z = f(A) + c \log |A| \quad (4.3)$$

を考えると, $g(Z)$ は任意の直交変換の下で不変であるから, Z の特有根を θ_i , $i=1, \dots, k$ として

$$g(Z) = c \log \left(\prod_{i=1}^k \theta_i \right) - \sum_{i=1}^k \theta_i = \sum_{i=1}^k (c \log \theta_i - \theta_i) \quad (4.4)$$

と書ける。 $Z \geq 0$ であるから $\theta_i \geq 0$ である。 $\theta_i = 0$, $\theta_i = \infty$ のときは明らかに $g(Z)$ は $-\infty$ で, したがって式 (4.2) は成立する。 $\infty > \theta_i > 0$, $i=1, \dots, k$ では $\theta_i = c$ で式 (4.4) は最大値 $kc \log c - kc$ をとる。 $cI = D_\theta = AZA'$ (A は直交行列) で, したがって $Z = AA = cI$ となるから, $A = cA^{-1}$ で $f(A)$ は最大となり, その値は式 (4.2) の右辺である。

4.2 推定量の充足性と有効性

母集団の密度関数を $f(x; \theta)$ とし, $t \equiv t(X)$ を $X'(k \times n) = (x_1', \dots, x_n')$ に基づく θ の推定ベクトルとする。もし

$$f(X; \theta) \equiv \prod_{\alpha=1}^n f(x_\alpha; \theta) = g(t; \theta) h(X) \quad (4.5)$$

ならば, t は θ に対する充足統計量である。ただし $g(t; \theta)$ は t の密度関数, $h(X)$ は θ に依存しない。

いま $y(1 \times m)$ を平均 ν , 共分散行列 Φ をもつ確率ベクトルとするととき, Cramér [8, 300 頁] により

$$(y - \nu)\Phi^{-1}(y - \nu)' = m + 2 \quad (4.6)$$

を y に対する集中楕円体と定義された。これの包含関係を利用して多変量解析の場合の有効性を定義しよう。 $t_1(1 \times m) \equiv t_1(X)$, $t_2(1 \times m) \equiv t_2(X)$ を未

* この証明は, I. Olkin のスタンホード大学における講義をもとにしたものである。

知パラメーター $\theta(1 \times m)$ の不偏推定量とし、その共分散行列をそれぞれ Ψ_1 , Ψ_2 とする。このとき、もし t_1 に対する集中楕円体 $(t_1 - \theta)\Psi_1^{-1}(t_1 - \theta)' = m+2$ が t_2 に対する $(t_2 - \theta)\Psi_2^{-1}(t_2 - \theta)' = m+2$ に含まれるならば、 t_1 は t_2 より θ の推定量としてより有効であると定義する。集中楕円体の一方が他方に含まれないで交わる場合の有効性は一律に定義されない。

さて θ の不偏推定量のクラスの中で、できるだけ有効な推定量を求めることが要求されるが、次の定理はこの点について充足統計量が果たす役割を示すものである。

[定理 4.3] $t(X)$ を θ に対する充足統計量とし、 $u(X)$ を $g(\theta)$ の不偏推定量とする。このとき、 $h(t) = \mathcal{E}\{u(X)|t\}$ は $g(\theta)$ の不偏推定量で、かつ $u(X)$ より有効である。もし $u(X) = h(t(X))$ であれば、両者の集中楕円体は一致する。

証明は省略するがたとえば [14, p. 60] を見よ。

Cramér は θ の任意の不偏推定量 $t = t(X)$ に対する集中楕円体の下限を与えている。すなわち

$$\Psi_0^{-1} = \left(n \mathcal{E} \left\{ \frac{\partial \log f(X; \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial \log f(X; \theta)}{\partial \theta_j} \right\} \right) \quad (4.7)$$

と表わすとき、楕円体

$$(t - \theta)\Psi_0^{-1}(t - \theta)' = m+2 \quad (4.8)$$

は t の集中楕円体 $(t - \theta)\Psi^{-1}(t - \theta)' = m+2$ の中に含まれる。そして式 (4.8) の容積を規準にして推定量 t の効率 $e = |\Psi_0|/|\Psi|$ と定義される。 t が式 (4.8) に等しい集中楕円体をもつとき有効推定ベクトルという。したがって有効推定ベクトルの効率は 1 である*。

さて集中楕円体の包含関係により推定量の有効性をみたが、これを不偏推定ベクトルの共分散行列の 1.1 節の意味における不等号の關係に換言できる。集

* この効率の定義は完全ではない。すなわち、一様に最小な集中楕円体をもつ不偏推定ベクトルが存在しても、それが式 (4.8) と異なり、したがってこのときの効率が 1 より小さい場合がある欠点をもっている。[30]

中楕円体 $(t-\theta)\Psi_1^{-1}(t-\theta)'=m+2$ が集中楕円体 $(t-\theta)\Psi_2^{-1}(t-\theta)'=m+2$ の中に含まれるということは、すべての z に対して $z\Psi_1^{-1}z' \geq z\Psi_2^{-1}z'$ を意味しており、これはすべての z に対して $z\Psi_2 z' \geq z\Psi_1 z'$ であることと同等である。ゆえに $\Psi_2 \geq \Psi_1$ と書けるのである。同様に適当な正則条件を満たす任意の不偏推定量の共分散行列 Ψ に対して

$$\Psi \geq \Psi_0, \text{ または } \Psi_0 \Psi^{-1} \leq I \quad (4.9)$$

が成立している。この式 (4.9) の形で考えるとき、推定量の効率として、行列式による $|\Psi| \geq |\Psi_0|$, また $\text{tr} \Psi \geq \text{tr} \Psi_0$, $C_{\max}(\Psi) \geq C_{\max}(\Psi_0)$ などの関係を利用して、実情に適したものを選ぶことができる。

4.3 $N(\mu, A)$ における μ, A の推定

$X'(k \times n) = (x_1', \dots, x_n')$ を大きさ n の任意標本とすれば、 $\Psi = A^{-1}$ として

$$\log L(\mu, A) = \text{const.} + \frac{n}{2} \log |\Psi| - \frac{1}{2} \text{tr} \Psi \{V + n(\bar{x} - \mu)'(\bar{x} - \mu)\} \quad (4.10)$$

と書ける。 $\bar{x} = \sum_{a=1}^n x_a / n$, $V = \sum_{a=1}^n (x_a - \bar{x})'(x_a - \bar{x})$ である。 μ と A の最大尤度推定量としてまず $\hat{\mu} = \bar{x}$ は明らかである。ゆえに Ψ は

$$\log L(\hat{\mu}, \Psi) = \text{const.} + \frac{n}{2} \log |\Psi| - \frac{1}{2} \text{tr} \Psi V$$

を最大にするように定められる。[定理 4.2] により $\hat{\Psi} = nV^{-1}$ であるから、 (μ, Ψ) の MLE は (\bar{x}, nV^{-1}) ということになる。 (μ, Ψ) と (μ, A) の対応は明らかに 1 対 1 であるから、[定理 4.1] により、 (μ, A) の MLE は $(\bar{x}, V/n)$ である。 $V/n = S^*$ と書く。

前章定理 3.1 および式 (3.20) により、 $\bar{x} \sim N(\mu, A/n)$, $V \sim W(A, k, n-1)$ であつ互いに独立である。また式 (4.10) の形と (4.5) の判定規準から、 (\bar{x}, V) は (μ, A) に対する充足統計量である。もし A が既知であれば \bar{x} が μ に対する充足統計量である。しかし μ が既知のときには、 A に対する充足統計量は V でなく $\sum_{a=1}^n (x_a - \mu)'(x_a - \mu)$ である。

4.4 単相関係数の推定と分布

共分散行列 $A=(\lambda_{ij})$ と相関行列 $P=(\rho_{ij})$ の間には、式 (1.18) すなわち $A=D_{\sqrt{\lambda}}PD_{\sqrt{\lambda}}$ なる関係がある。母集団が正規のときには前節により $(\hat{\mu}, \hat{A})=(\bar{x}, S^*)$ であり、また (μ, A) と $(\mu, D_{\sqrt{\lambda}}, P)$ の間の対応は1対1であるから、 $(\mu, D_{\sqrt{\lambda}}, P)$ の MLE は $(\bar{x}, D_{\sqrt{S}}, R)$ である。ここに $R=(r_{ij})=D_{\sqrt{S}}^{-1}S^*D_{\sqrt{S}}^{-1}$ でしたがつて ρ_{ij} の MLE は

$$r_{ij} = \frac{S_{ij}^*}{(S_{ii}^*S_{jj}^*)^{1/2}} = \frac{\sum_{\alpha} x_{i\alpha}x_{j\alpha} - n\bar{x}_i\bar{x}_j}{\sqrt{\sum_{\alpha} x_{i\alpha}^2 - n\bar{x}_i^2} \sqrt{\sum_{\alpha} x_{j\alpha}^2 - n\bar{x}_j^2}} \quad (4.11)$$

である。もちろん $-1 \leq r_{ij} \leq 1$ である。

r_{ij} の標本分布：ウィッシュャート分布 $(n-1)S=nS^*=V \sim W(A, k, n-1)$ から出発して r_{ij} の標本分布を求めよう。 $V=D_{\sqrt{v}}RD_{\sqrt{v}}$, $D_{\sqrt{v}}=\text{diag}(\sqrt{v_{11}}, \dots, \sqrt{v_{kk}})$ と書けば

$$\begin{aligned} p(V) &= c(k, n-1) |A|^{-\frac{1}{2}(n-1)} |V|^{-\frac{1}{2}(n-k-2)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} A^{-1} V\right\} \\ &= c(k, n-1) |D_{\sqrt{\lambda}}|^{-(n-1)} |P|^{-\frac{1}{2}(n-1)} |D_{\sqrt{v}}|^{(n-k-2)} |R|^{-\frac{1}{2}(n-k-2)} \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} P^{-1} D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} D_{\sqrt{v}} R D_{\sqrt{v}} D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}\right\} \end{aligned}$$

ここに

$$[c(k, n-1)]^{-1} = 2^{\frac{1}{2}k(n-1)} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]$$

である。ゆえに D_v と R の同時密度関数は、 $J(V: D_v, R) = |D_{\sqrt{v}}|^{(k-1)}$ を掛けて

$$\begin{aligned} p(D_v, R) &= c(k, n-1) |D_{\sqrt{\lambda}}|^{-(n-1)} |D_{\sqrt{v}}|^{(n-3)} |P|^{-\frac{1}{2}(n-1)} |R|^{-\frac{1}{2}(n-k-2)} \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr} P^{-1} D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} D_{\sqrt{v}} R D_{\sqrt{v}} D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}\right\} \end{aligned}$$

$D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} D_{\sqrt{v}} = D_w$ とすれば、 $J(D_v: D_w) = 2^k |D_{\sqrt{\lambda}}|^2 |D_w|$ であるから

$$p(D_w, R) = 2^k c(k, n-1) |D_w|^{(n-2)} |P|^{-\frac{1}{2}(n-1)} |R|^{\frac{1}{2}(n-k-2)} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr } P^{-1} D_w R D_w\right\}$$

となるから、 D_w を消去すれば R の分布が得られる。ところで

$$\text{tr } P^{-1} D_w R D_w = \sum_{i=1}^k \sum_{\alpha=1}^k \rho^{i\alpha} w_{\alpha} r_{\alpha i} w_i = \sum_{i=1}^k \sum_{\alpha=1}^k w_i \rho^{i\alpha} r_{\alpha i} w_{\alpha} = w T w',$$

$$w = (w_1, \dots, w_k), \quad T = P^{-1} \cdot R \equiv (\rho^{i\alpha} r_{\alpha i}) \text{ と書けるから}$$

$$p(R) = 2^k c(k, n-1) |P|^{-\frac{1}{2}(n-1)} |R|^{\frac{1}{2}(n-k-2)} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} |D_w|^{(n-2)} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} w T w'\right\} dw \quad (4.12)$$

と多重積分を使って表わすことができる。

(I) $P=I$ の場合: $T=I \cdot R=I$ で式 (4.12) の積分ができて

$$p(R) = \frac{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)\right]^k}{\pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]} |R|^{\frac{1}{2}(n-k-2)} \quad (4.13)$$

と求められる。この場合には $|R|$ の積率が容易に計算される。

$$\int_{R>0} p(R) dR = 1 \text{ より}$$

$$\frac{\pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]}{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)\right]^k} = \int_{R>0} |R|^{\frac{1}{2}(n-k-2)} dR \quad (4.14)$$

であるから

$$\mathcal{E}(|R|^h) = \frac{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)\right]^k}{\pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]} \int_{R>0} |R|^{\frac{1}{2}(n+2h-k-2)} dR$$

$$= \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)+h\right)} \right]^k \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-i)\right]} \quad (4.15)$$

(II) $k=2$ の場合: 母集団, 標本の相関係数をそれぞれ ρ, r と添字を省略して表わせば, 式 (4.12) より

$$\begin{aligned}
 p(r) &= \frac{4c(2, n-1)(1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}}{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)}} \int_0^\infty \int_0^\infty (w_1 w_2)^{n-2} \cdot \\
 &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{w_1^2 - 2\rho r w_1 w_2 + w_2^2}{2(1-\rho^2)}\right\} dw_1 dw_2 \\
 &= \frac{4c(2, n-1)(1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}}{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)}} \sum_{j=0}^\infty \frac{1}{j!} \left(\frac{\rho r}{1-\rho^2}\right)^j \cdot \\
 &\quad \cdot \left[\int_0^\infty w^{n+j-2} e^{-\frac{w^2}{2(1-\rho^2)}} dw\right]^2 \\
 &= \frac{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)} (1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}}{\sqrt{\pi} \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-1)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-2)\right]} \sum_{j=0}^\infty \frac{1}{j!} (2\rho r)^j \cdot \\
 &\quad \cdot \Gamma^2\left[\frac{1}{2}(n+j-1)\right]
 \end{aligned}$$

公式 $\Gamma(a)\Gamma(a+1/2) = \sqrt{\pi} \Gamma(2a)/2^{2a-1}$ を用いて

$$\begin{aligned}
 p(r) &= \frac{2^{n-3}(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)} (1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}}{\pi \Gamma(n-2)} \sum_{j=0}^\infty \frac{(2\rho r)^j}{j!} \cdot \\
 &\quad \cdot \Gamma^2\left[\frac{1}{2}(n+j-1)\right]
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

が得られる。 $\rho=0$ のときは

$$p(r) = \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-1)\right]}{\sqrt{\pi} \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-2)\right]} (1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)} \tag{4.17}$$

で, 式 (4.13) の $k=2$ のときと一致する。 r の分布に関する Hotelling [20] の詳しい研究はすぐれたものであり, F.N. David [9] の数表は ρ に関する推論に有用である。

4・5 単相関係数に関する漸近分布

統計量の漸近分布を求めるとき次の定理はしばしば有用である。

[定理 4・4] $\mathbf{u}(n) = (u_1(n), \dots, u_m(n))$ を確率ベクトルとし、 $\sqrt{n} \{\mathbf{u}(n) - \mathbf{b}\}$ が漸近的に $N(\mathbf{0}, \Psi)$ に従うものとする。いま $\mathbf{f}(\mathbf{u}(n)) = (f_1(\mathbf{u}(n)), \dots, f_k(\mathbf{u}(n)))$, $k \leq m$ の各成分が $\mathbf{u}(n) = \mathbf{b}$ の近傍で一次、二次の微係数をもつ $\mathbf{u}(n)$ の関数であるとすれば、 $\sqrt{n} \{\mathbf{f}(\mathbf{u}(n)) - \mathbf{f}(\mathbf{b})\}$ の極限分布は、 $N(\mathbf{0}, \mathbf{A}\Psi\mathbf{A}')$ である。ここに $\mathbf{A} = (a_{ij})$ は $k \times m$ 行列で、その要素は、 $a_{ij} = [\partial f_i(\mathbf{u}) / \partial u_j]_{\mathbf{u}=\mathbf{b}}$ である。

この定理の本質的な証明は、Cramér の本 [8, p.366] に与えられている。

自由度 $\nu = n - 1$ の不偏共分散行列を $\mathbf{S}(k \times k)$ とし、 $\nu \mathbf{S} = \mathbf{V}$ とすれば、3・2 節により、 $\mathbf{Y}'(k \times \nu) = (\mathbf{y}_1', \dots, \mathbf{y}_\nu') \sim N_\nu(\mathbf{0} : \mathbf{A} = (\lambda_{ij}))$ なる \mathbf{Y} によって、 $\mathbf{V} = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} = \sum_{\alpha=1}^{\nu} \mathbf{y}_\alpha' \mathbf{y}_\alpha$ と表わされるから、いま $\mathbf{y}_\alpha' \mathbf{y}_\alpha$ の要素を $\mathbf{z}_\alpha = (y_{1\alpha}^2, y_{1\alpha}y_{2\alpha}, \dots, y_{2\alpha}^2, \dots, y_{k\alpha}^2)$ として考えれば、 $\mathcal{E}(\mathbf{z}_\alpha) = (\lambda_{11}, \lambda_{12}, \dots, \lambda_{22}, \dots, \lambda_{kk})$ 、また共分散行列 $\mathcal{E}(\mathbf{z}_\alpha - \mathcal{E}(\mathbf{z}_\alpha))'(\mathbf{z}_\alpha - \mathcal{E}(\mathbf{z}_\alpha))$ の要素は式 (1・33) により

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(y_{i\alpha}y_{j\alpha} - \lambda_{ij})(y_{l\alpha}y_{m\alpha} - \lambda_{lm}) &= \mathcal{E}(y_{i\alpha}y_{j\alpha}y_{l\alpha}y_{m\alpha}) - \lambda_{ij}\lambda_{lm} \\ &= \lambda_{il}\lambda_{jm} + \lambda_{im}\lambda_{jl} \end{aligned} \quad (4 \cdot 18)$$

である。ゆえに中心極限定理により次の結果が得られる。

[定理 4・5] $\mathbf{S} = \mathbf{V}/\nu$ を正規標本における不偏共分散行列とすれば、 $\sqrt{\nu}(\mathbf{S} - \mathbf{A}) = (1/\sqrt{\nu})(\mathbf{V} - \nu\mathbf{A})$ の漸近分布は $N(\mathbf{0}, \Psi)$ で、 Ψ の要素は式 (4・18)、したがって

$$\text{Cov}(S_{ij}, S_{lm}) = (\lambda_{il}\lambda_{jm} + \lambda_{im}\lambda_{jl})/\nu \quad (4 \cdot 19)$$

である*。

さて $\mathbf{U} = \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}}^{-1}$ とすれば $\sqrt{\nu}(\mathbf{U} - \mathbf{P}) = \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}}^{-1} \{\sqrt{\nu}(\mathbf{S} - \mathbf{A})\} \mathbf{D}_{\sqrt{\lambda}}^{-1}$ の漸近分布は平均 $\mathbf{0}$ で、共分散行列の要素として

* 式 (4・19) の “=” は、漸近分布におけるものであることを示す。

$$\nu \cdot \text{Cov}(u_{ij}, u_{lm}) \doteq (\rho_{il}\rho_{jm} + \rho_{im}\rho_{jl}) \quad (4.20)$$

をもつ正規分布である。 U と P の独立な要素を1行に並べて

$$u = (u_{11}, \dots, u_{kk}, u_{12}, \dots, u_{1k}, u_{23}, \dots, u_{2k}, \dots, u_{k-1,k})$$

$$\rho^* = (1, \dots, 1, \rho_{12}, \dots, \rho_{1k}, \rho_{23}, \dots, \rho_{2k}, \dots, \rho_{k-1,k})$$

とすれば、 $\sqrt{\nu}(u - \rho^*)$ は漸近的に平均 0 、式 (4.20) で与えられる共分散をもつ正規分布に従うことになる。これを出発点にして単相関係数の漸近分布を求めよう。 $r_{ij} = f_{ij}(u) = u_{ij} / \sqrt{u_{ii}u_{jj}}$

$$r = (r_{12}, r_{13}, \dots, r_{1k}, r_{23}, \dots, r_{2k}, \dots, r_{k-1,k})$$

$$\rho = (\rho_{12}, \rho_{13}, \dots, \rho_{1k}, \rho_{23}, \dots, \rho_{2k}, \dots, \rho_{k-1,k})$$

とすれば、[定理 4.4] によって、 $\sqrt{\nu}(r - \rho)$ が漸近的に平均 0 の $k(k-1)/2$ 変量正規分布に従うことは直ちにわかる。問題は $A\mathfrak{T}A'$ を計算することである。ここに A の要素は $\partial r_{ij} / \partial u_{lm}$ 、 \mathfrak{T} の要素は式 (4.20) である。実際の計算には 4 変数の場合、すなわち、 $(r_{12}, r_{13}, r_{14}, r_{23}, r_{24}, r_{34})$ を考えれば十分で、これから直ちに一般的表現が得られる。結果は

$$\text{Cov}(r_{ij}, r_{lm}) \doteq \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{1}{2} \rho_{ij}\rho_{lm}(\rho_{il}^2 + \rho_{im}^2 + \rho_{jl}^2 + \rho_{jm}^2) + \rho_{il}\rho_{jm} + \rho_{im}\rho_{jl} \right. \\ \left. - (\rho_{ij}\rho_{il}\rho_{im} + \rho_{ji}\rho_{jl}\rho_{jm} + \rho_{li}\rho_{lj}\rho_{lm} + \rho_{mi}\rho_{mj}\rho_{ml}) \right\} \quad (4.21)$$

$i=l$ または m のときには

$$\text{Cov}(r_{ij}, r_{im}) \doteq \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{1}{2} (2\rho_{jm} - \rho_{ij}\rho_{im})(1 - \rho_{ij}^2 - \rho_{im}^2 - \rho_{jm}^2) + \rho_{jm}^3 \right\} \quad (4.22)$$

また $i=l, j=m$ のときには

$$\text{Cov}(r_{ij}, r_{ij}) = \text{Var}(r_{ij}) \doteq \frac{1}{\nu} (1 - \rho_{ij}^2)^2 \quad (4.23)$$

となる。

[定理 4.6] r は漸近的に平均 ρ 、式 (4.21) を要素とする共分散行列をもつ正規分布に従う。

[系] r_{ij} の漸近分布は $N(\rho_{ij}, (1 - \rho_{ij}^2)^2/\nu)$ である。

さて r_{ij} の関数 $f(r_{ij})$ でその漸近分布における分散が常数たとえば 1 に等

しくなるものを求めよう。もし $f(r_{ij})$ が $r_{ij}=\rho_{ij}$ で一次、二次の微係数をもつものとすれば、[定理 4.4] により、 $\sqrt{\nu} \{f(r_{ij})-f(\rho_{ij})\}$ は漸近的に平均 0、分散 $[df(\rho_{ij})/d\rho_{ij}]^2(1-\rho_{ij}^2)^2$ の正規分布に従う。ゆえに求める f は

$$\frac{df(\rho_{ij})}{d\rho_{ij}} = \frac{1}{(1-\rho_{ij}^2)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{1+\rho_{ij}} + \frac{1}{1-\rho_{ij}} \right\}$$

を満たすものであり、したがってこれを解いて

$$f(\rho_{ij}) = \frac{1}{2} \log \left\{ \frac{(1+\rho_{ij})}{(1-\rho_{ij})} \right\} \equiv \zeta \quad (4.24)$$

となる。変換

$$z = \frac{1}{2} \log \frac{1+r_{ij}}{1-r_{ij}} \quad (4.25)$$

がいわゆる Fisher の z -変換で、 $\sqrt{\nu}(z-\zeta)$ の漸近分布は $N(0, 1)$ である。

[定理 4.6] の \mathbf{r} の分布を利用して標本相関行列の行列式 $|\mathbf{R}|$ の漸近分布を求める。再び [定理 4.4] により $\sqrt{\nu}(|\mathbf{R}| - |\mathbf{P}|)$ の漸近分布は平均 0 の正規分布で、分散は次のように計算される。

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \left\{ \sum_{i < j} \frac{\partial |\mathbf{P}|}{\partial \rho_{ij}} (r_{ij} - \rho_{ij}) \right\}^2 &= \sum_{i,j,l,m=1}^k |\mathbf{P}|^2 \rho^{ij} \rho^{lm} \text{Cov}(r_{ij}, r_{lm}) \\ &= \frac{1}{\nu} |\mathbf{P}|^2 \sum_{i,j,l,m} \rho^{ij} \rho^{lm} \left\{ \frac{1}{2} \rho_{ij} \rho_{lm} (\rho_{il}^2 + \rho_{im}^2 + \rho_{jl}^2 + \rho_{jm}^2) \right. \\ &\quad \left. + \rho_{il} \rho_{jm} + \rho_{im} \rho_{jl} - (\rho_{ij} \rho_{il} \rho_{im} + \rho_{ji} \rho_{jm} \rho_{jl} + \rho_{li} \rho_{lj} \rho_{lm} + \rho_{mi} \rho_{mj} \rho_{ml}) \right\} \end{aligned}$$

ところで

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,l,m} \rho^{ij} \rho^{lm} \rho_{ij} \rho_{lm} \rho_{il}^2 &= \sum_{\alpha,\beta} \rho_{\alpha\beta}^2 = \text{tr } \mathbf{P}^2 \\ \sum_{i,j,l,m} \rho^{ij} \rho^{lm} \rho_{il} \rho_{jm} &= k, \quad \sum_{i,j,l,m} \rho^{ij} \rho^{lm} \rho_{ij} \rho_{il} \rho_{im} = k \end{aligned}$$

と計算され、添字の入れ換えの下での不変性を考えれば

$$\text{Var}(|\mathbf{R}|) \doteq \frac{1}{\nu} |\mathbf{P}|^2 \left\{ \frac{1}{2} \cdot 4 \text{tr } \mathbf{P}^2 + 2k - 4k \right\} = \frac{2}{\nu} |\mathbf{P}|^2 \{ \text{tr } \mathbf{P}^2 - k \} \quad (4.26)$$

と求められる。

[定理 4.7] 標本相関行列の行列式 $|\mathbf{R}|$ は漸近的に平均 $|\mathbf{P}|$ 、分散、式

(4.26) をもつ正規分布に従う。ただし $P \neq I$ とする。

4.6 偏相関係数の推定とその分布

$\mathbf{x}(1 \times k) = (\mathbf{x}_1(1 \times k_1), \mathbf{x}_2(1 \times k_2))$ において, \mathbf{x}_1 に対する \mathbf{x}_2 の回帰を考える。その回帰係数の行列 $\mathbf{B}_{12} = \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}$, 残差共分散行列 $\mathbf{A}_{22 \cdot 1} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}$ の MLE は, \mathbf{A} と $(\mathbf{A}_{11}, \mathbf{B}_{12}, \mathbf{A}_{22 \cdot 1})$ の間の対応が 1 対 1 であることに注意すれば

$$n\hat{\mathbf{A}}_{11} = n\mathbf{S}_{11}^* = \mathbf{V}_{11}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{12} = \mathbf{S}_{11}^{*-1} \mathbf{S}_{12}^* = \mathbf{V}_{11}^{-1} \mathbf{V}_{12} \quad (4.27)$$

$$n\hat{\mathbf{A}}_{22 \cdot 1} = n(\mathbf{S}_{22}^* - \mathbf{S}_{21}^* \mathbf{S}_{11}^{*-1} \mathbf{S}_{12}^*) = \mathbf{V}_{22} - \mathbf{V}_{21} \mathbf{V}_{11}^{-1} \mathbf{V}_{12} \equiv \mathbf{V}_{22 \cdot 1} \quad (4.28)$$

であることが [定理 4.4] によりわかる。ここに,

$$n\mathbf{S}^*(k \times k) = n \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{11}^* & \mathbf{S}_{12}^* \\ \mathbf{S}_{21}^* & \mathbf{S}_{22}^* \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \end{matrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_{11} & \mathbf{V}_{12} \\ \mathbf{V}_{21} & \mathbf{V}_{22} \end{bmatrix} = \mathbf{V} \quad (4.29)$$

である。この結果から偏相関係数 $\rho_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$ の MLE は, 単相関係数の MLE を求めたのと同じ手続きを $\mathbf{A}_{22 \cdot 1}$ および $n\mathbf{S}_{22 \cdot 1}^* = \mathbf{V}_{22 \cdot 1}$ に施すことによって得られる。すなわち, $\mathbf{V}_{22 \cdot 1} = (v_{ij \cdot 1, \dots, k_1})$ の要素により

$$\hat{\rho}_{ij \cdot 1, \dots, k_1} \equiv r_{ij \cdot 1, \dots, k_1} = \frac{v_{ij \cdot 1, \dots, k_1}}{\sqrt{v_{ii \cdot 1, \dots, k_1} v_{jj \cdot 1, \dots, k_1}}} \quad (4.30)$$

となる。 $-1 \leq r_{ij \cdot 1, \dots, k_1} \leq 1$ である。

$r_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$ の標本分布に関しても単相関の場合と全く同様である。3.5 節において $\mathbf{V}_{22 \cdot 1} \sim W(\mathbf{A}_{22 \cdot 1}, k_2, n - k_1 - 1)$ が証明されているから, 式 (4.16), (4.17) において $\rho \rightarrow \rho_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$, $r \rightarrow r_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$, $n \rightarrow n - k_1$ としたものが, $r_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$ の密度関数である。また $r_{ij \cdot 1, \dots, k_1}$, $i < j$, $i, j = 1, \dots, k_2$ の同時分布などに対しても r_{ij} の同時分布のときと同様である。

4.7 重相関係数の推定および分布

$\mathbf{x}(1 \times k) = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ における \mathbf{x}_1 と $(\mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k)$ の間の重相関係数 $\rho_{1(2 \cdots k)} = \sqrt{\lambda_1 \mathbf{A}_{22}^{-1} \lambda_1' / \lambda_{11}} = \sqrt{\beta \mathbf{A}_{22} \beta' / \lambda_{11}}$ の MLE は, いままでと同様に $\lambda_1, \beta, \mathbf{A}_{22}, \lambda_{11}$ を対応する標本量で置き替えたものである。ここに

$$A(k \times k) = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_1 \\ \lambda_1' & A_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ k-1 \\ 1 & k-1 \end{matrix}, \quad \beta = \lambda_1 A_{22}^{-1} \quad (4.31)$$

である。ゆえにこれに対応する S^* , V の分割を

$$nS^* = \begin{bmatrix} s_{11}^* & s_1^* \\ s_1^{*'} & S_{22}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_1 \\ v_1' & V_{22} \end{bmatrix} = V \quad (4.32)$$

とすれば, $\bar{\rho}_{1(2 \cdots k)}$ の MLE は

$$\bar{r}_{1(2 \cdots k)} = \sqrt{s_1^* S_{22}^{*-1} s_1^{*'} / s_{11}^*} = \sqrt{v_1 V_{22}^{-1} v_1' / v_{11}} \quad (4.33)$$

で, また

$$1 - \bar{r}_{1(2 \cdots k)}^2 = |S^*| / s_{11}^* |S_{22}^*| = |V| / v_{11} |V_{22}| \quad (4.34)$$

と書ける。 $0 \leq \bar{r}_{1(2 \cdots k)} \leq 1$ である。

さて, $V \sim W(A, k, \nu = n-1)$ から出発して $\bar{r}_{1(2 \cdots k)}$ あるいは $\bar{r}_{1^2(2 \cdots k)}$ の標本分布を導く。簡単のために添字をとって $\bar{\rho}, \bar{r}$ と書けば, $\bar{r}^2 = v_1 V_{22}^{-1} v_1' / v_{11}$ となる。いま $\nu = \lambda_1 A_{22}^{-1/2} / \sqrt{\lambda_{11}}$ および L を第1列が $\nu' / \sqrt{\nu \nu'}$ なる $(k-1) \times (k-1)$ の直交行列とし

$$V \rightarrow V^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{11}}} & 0 \\ 0' & A_{22}^{-1/2} L \end{bmatrix}' V \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{11}}} & 0 \\ 0' & A_{22}^{-1/2} L \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

と変換すれば, $V^* \sim W(A^*, k, \nu)$ で

$$\begin{aligned} A^* &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{11}}} & 0 \\ 0' & A_{22}^{-1/2} L \end{bmatrix}' A \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{11}}} & 0 \\ 0' & A_{22}^{-1/2} L \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{\nu \nu'}(1, 0, \dots, 0) \\ \sqrt{\nu \nu'} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} & I \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.36)$$

となる。ここに $\sqrt{\nu \nu'} = (\lambda_1 A_{22}^{-1} \lambda_1' / \lambda_{11})^{1/2} = \bar{\rho}$ である。ところで \bar{r}^2 は式 (4.35) の変換の下で不変であることは容易に確かめられるから, われわれの問題は次の標準形から出発すればよいことになる。

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} v_{11} & \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_1' & \mathbf{V}_{22} \end{bmatrix} \sim W(\mathbf{A}, k, \nu), \quad \mathbf{A} = \left[\begin{array}{c|c} \begin{smallmatrix} 1 & \bar{\rho} \\ \bar{\rho} & 1 \end{smallmatrix} & \mathbf{O} \\ \hline \mathbf{O}' & \mathbf{I} \end{array} \right] \quad (4.37)$$

のとき、 $\bar{\mathbf{r}}^2 = \mathbf{v}_1 \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{v}_1' / v_{11}$ の分布を求めること。

$v_{11}, \mathbf{v}_1, \mathbf{V}_{22}$ の同時密度関数は、

$$\begin{aligned} p(v_{11}, \mathbf{v}_1, \mathbf{V}_{22}) &= \text{const.} |\mathbf{V}|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{V} \right\} \\ &= \text{const.} |\mathbf{V}_{22}|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} (v_{11} - \mathbf{v}_1 \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{v}_1')^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \\ &\quad \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \left\{ \frac{v_{11} - 2\bar{\rho}v_{12} + v_{22}}{1 - \bar{\rho}^2} + v_{33} + \dots + v_{kk} \right\} \right] \end{aligned} \quad (4.38)$$

で、これに $\mathbf{V}_{22} = \tilde{\mathbf{T}}' \tilde{\mathbf{T}}, \mathbf{v}_1 = \mathbf{u} \tilde{\mathbf{T}}$ なる変換を施せば、 $J(\mathbf{V}_{22}, \mathbf{v}_1; \tilde{\mathbf{T}}, \mathbf{u}) = 2^{k-1} \prod_{i=1}^{k-1} t_{ii}^{k-i+1}$ であるから

$$\begin{aligned} p(v_{11}, \mathbf{u}, \tilde{\mathbf{T}}) &= \text{const.} \left(\prod_{i=1}^{k-1} t_{ii}^{\nu-i} \right) (v_{11} - \mathbf{u} \mathbf{u}')^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \\ &\quad \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \left\{ \frac{v_{11} - 2\bar{\rho}u_1 t_{11} + t_{11}^2}{1 - \bar{\rho}^2} + \sum_{1 \leq i \leq j}^{k-1} t_{ij}^2 - t_{11}^2 \right\} \right] \end{aligned}$$

となる。 $\bar{\mathbf{r}}^2 = \mathbf{u} \mathbf{u}' / v_{11}$ であるから、まず t_{11} 以外の t_{ij} を積分して消去すれば、

$$\begin{aligned} p(v_{11}, \mathbf{u}, t_{11}) &= \text{const.} t_{11}^{\nu-1} (v_{11} - \mathbf{u} \mathbf{u}')^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \\ &\quad \cdot \exp \left\{ -\frac{v_{11} - 2\bar{\rho}u_1 t_{11} + t_{11}^2}{2(1 - \bar{\rho}^2)} \right\} \end{aligned}$$

となり、次いで $\mathbf{u} = \sqrt{v_{11}} \mathbf{w}$ と変換し $\exp \{ \bar{\rho} \sqrt{v_{11}} w_1 t_{11} / (1 - \bar{\rho}^2) \}$ を無限級数に展開すれば

$$\begin{aligned} p(v_{11}, \mathbf{w}, t_{11}) &= \text{const.} (1 - \mathbf{w} \mathbf{w}')^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{w_1^j}{j!} \left(\frac{\bar{\rho}}{1 - \bar{\rho}^2} \right)^j \\ &\quad \cdot t_{11}^{\nu+j-1} v_{11}^{\frac{1}{2}(\nu+j-1)} \exp \left\{ -\frac{v_{11} + t_{11}^2}{2(1 - \bar{\rho}^2)} \right\} \end{aligned}$$

であり、 $\bar{\mathbf{r}}^2 = \mathbf{w} \mathbf{w}'$ に注意して v_{11}, t_{11} を消去すれば、 $(0 < v_{11} < \infty, 0 < t_{11} < \infty)$

$$p(w) = \text{const.} (1 - ww')^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(w_1 \bar{\rho})^j}{j!} 2^j \Gamma^2 \left[\frac{1}{2}(\nu+j) \right]$$

が得られる。この関数は w_1 と $z = w_2^2 + \dots + w_{k-1}^2$ の関数とみることができるから、スーの [定理 3・2] を適用すれば、

$$p(w_1, z) = \text{const.} z^{\frac{1}{2}(k-4)} (1 - w_1^2 - z)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(w_1 \bar{\rho})^j}{j!} \cdot 2^j \Gamma^2 \left[\frac{1}{2}(\nu+j) \right]$$

$\bar{r}^2 = w_1^2 + z$ であるから、これにより z を \bar{r}^2 に変え $-\infty < w_1 < \infty$ で積分して w_1 を消去すれば \bar{r}^2 の密度関数が得られるわけである。積分するとき j が奇数の項は w_1 の奇関数の積分で 0 となり

$$\begin{aligned} p(\bar{r}^2) &= \text{const.} (1 - \bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(2\bar{\rho})^{2j}}{(2j)!} \Gamma^2 \left(\frac{1}{2}\nu + j \right) \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^{\infty} w_1^{2j} (\bar{r}^2 - w_1^2)^{\frac{1}{2}(k-4)} dw_1 \\ &= \text{const.} (1 - \bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(2\bar{\rho})^{2j} \Gamma^2 \left(\frac{1}{2}\nu + j \right)}{(2j)!} \cdot \\ &\quad \cdot B \left(j + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}k - 1 \right) (\bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(k-3)+j} \end{aligned}$$

と求まる。公式 $(2j)! = \left(\frac{2^{2j}}{\sqrt{\pi}} \right) j! \Gamma \left(j + \frac{1}{2} \right)$ を使って整理し、 $\int_0^1 p(\bar{r}^2) d\bar{r}^2 = 1$ により常数を決定すれば、最終的な結果として

$$p(\bar{r}^2) = \frac{(1 - \bar{\rho}^2)^{\frac{1}{2}\nu} (1 - \bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} (\bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(k-3)}}{\Gamma \left(\frac{1}{2}\nu \right) \Gamma \left[\frac{1}{2}(\nu-k+1) \right]} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(r^2 \bar{\rho}^2)^j \Gamma^2 \left(\frac{1}{2}\nu + j \right)}{j! \Gamma \left[\frac{1}{2}(k-1) + j \right]} \quad (4.39)$$

が得られる。もし $\bar{\rho} = 0$ であれば

$$p(\bar{r}^2) = \frac{\Gamma \left(\frac{1}{2}\nu \right)}{\Gamma \left[\frac{1}{2}(k-1) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(\nu-k+1) \right]} (\bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(k-3)} (1 - \bar{r}^2)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \quad (4.40)$$

と一つのベータ分布となる。

4・8 正準相関係数の推定

$\mathbf{x}(1 \times k) = (\mathbf{x}_1(1 \times k_1), \mathbf{x}_2(1 \times k_2))$, $(k_1 \leq k_2)$ としたとき, 2・4 節で \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 の間の母集団正準相関係数が定義された。そこでは $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ から正準変数ベクトル (\mathbf{u}, \mathbf{v}) への内部一次変換, 式 (2・31) が存在し, (\mathbf{u}, \mathbf{v}) の共分散行列を式 (2・30) とすることができた。ここで正準相関係数がすべて異なり, \mathbf{A}, \mathbf{B} の要素にある種の条件を付すと, 式 (2・30) の \mathbf{D}_ϕ , \mathbf{A}, \mathbf{B} は \mathbf{A} から一意に定められる (たとえば S. N. Roy [45, A. 3・16] を見よ)。ゆえにこの条件の下で母集団が正規のとき正準相関係数 $\phi_1, \dots, \phi_{k_1}$ および \mathbf{A}, \mathbf{B} の MLE は [定理 4・1] により 2・4 節で \mathbf{A} に対して行なったのと同じ演算を $\mathbf{S}^* = \mathbf{V}/n$ に施すことによって得られる。またそこで成立していた関係式もこれらの MLE に対して同様に成立する。したがって, $\phi_1, \dots, \phi_{k_1}$ の MLE を $r_1 > r_2 > \dots > r_{k_1}$ とすれば,

$$|\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21} - r^2 \mathbf{V}_{11}| = 0 \quad (4.41)$$

を満たし, $\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}$ の各行はそれぞれ

$$(\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21} - r_j^2 \mathbf{V}_{11}) \mathbf{a}_j' = \mathbf{0}, \quad j=1, \dots, k_1 \quad (4.42)$$

$$(\mathbf{V}_{21} \mathbf{V}_{11}^{-1} \mathbf{V}_{12} - r_j^2 \mathbf{V}_{22}) \mathbf{b}_j' = \mathbf{0}, \quad j=1, \dots, k_2 \quad (4.43)$$

より得られる。また

$$r_1^2 r_2^2 \dots r_{k_1}^2 = |\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21}| / |\mathbf{V}_{11}| \quad (4.44)$$

$$(1 - r_1^2)(1 - r_2^2) \dots (1 - r_{k_1}^2) = \left[\begin{array}{cc} \mathbf{V}_{11} & \mathbf{V}_{12} \\ \mathbf{V}_{21} & \mathbf{V}_{22} \end{array} \right] / |\mathbf{V}_{11}| |\mathbf{V}_{22}| \quad (4.45)$$

標本正準相関係数の標本分布については後に第7章で述べる。

第5章 検定の問題

5.1 尤度比検定

m 次元パラメーター空間を Ω , その部分領域を ω で表わすとき, 統計的仮説 $H_0: \theta \in \omega$ を対立仮説 $H: \theta \in \Omega - \omega$ に対して検定するための尤度比規準 (以後 LRC と書く) は

$$\lambda = \max_{\theta \in \omega} L(\theta) / \max_{\theta \in \Omega} L(\theta) \quad (5.1)$$

である。ここに $L(\theta) = f(X; \theta)$ は尤度関数である。尤度比検定 (以後 LRT と書く) は, 仮説 H_0 の下で λ の標本分布を求め, あらかじめ定められた有意水準 ε に対して $\Pr\{\lambda < \lambda_\varepsilon | H_0\} = \varepsilon$ なる臨界点 λ_ε を求め, $\{\lambda: 0 < \lambda < \lambda_\varepsilon\}$ を棄却域とするものである。実際の検定では, λ そのものよりもこれと単調関係にあるより簡単な統計量を検定規準に用いて, LRT と同等な検定を得ることがしばしばある。

[定理 5.1] 尤度関数を $L(\theta)$, パラメーター空間を Ω とし, かつ $\Omega \supset \Omega_a \supset \Omega_b$ とする。 H_a を $\theta \in \Omega_a$ なる仮説, H_b を $\theta \in \Omega_b$ なる仮説, $H_{b|a}$ を $\theta \in \Omega_a$ を既知としたときの $\theta \in \Omega_b$ なる仮説とする。いまこれらの LRC をそれぞれ $\lambda_a, \lambda_b, \lambda_{b|a}$ とすれば, $\lambda_b = \lambda_{b|a} \lambda_a$ である。

[証明]

$$\lambda_b = \frac{\max_{\theta \in \Omega_b} L(\theta)}{\max_{\theta \in \Omega} L(\theta)} = \frac{\max_{\theta \in \Omega_b} L(\theta)}{\max_{\theta \in \Omega_a} L(\theta)} \cdot \frac{\max_{\theta \in \Omega_a} L(\theta)}{\max_{\theta \in \Omega} L(\theta)} = \lambda_{b|a} \lambda_a$$

[定理 5.2] Ω を m 次元パラメーター空間, ω を Ω の中の s 次元超平面とし, 仮説 $H_0: \theta \in \omega$ を検定するための LRC を λ とすれば, H_0 の下で, $-2 \log \lambda$ は漸近的に自由度 $m-s$ の χ^2 -分布に従う (S. S. Wilks [60])。

5.2 平均ベクトルに関する T^2 -検定

$\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ で $\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}$ は未知とする。大きさ n の任意標本 $\mathbf{X}'(k \times n) = (\mathbf{x}_1', \dots, \mathbf{x}_n')$ に基づいて、仮説 $H_0: \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0$ に対する LRC を求める。尤度関数は $\boldsymbol{\Psi} = \mathbf{A}^{-1}$ として

$$L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}) = \text{const.} |\boldsymbol{\Psi}|^{\frac{1}{2}n} \exp \left[-\frac{1}{2} \text{tr} \boldsymbol{\Psi} \{V + n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu})'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu})\} \right]$$

であり、 $\omega = \{(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}) : \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Psi} > 0\}$, $\Omega = \{(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}) : -\infty < \mu_i < \infty, i=1, \dots, k, \boldsymbol{\Psi} > 0\}$ である。[定理 4.2] により

$$\max_{\boldsymbol{\Psi}} L(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Psi}) = \text{const.} n^{\frac{1}{2}kn} |V + n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)|^{-\frac{1}{2}n} e^{-\frac{1}{2}kn}$$

$$\max_{\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}} L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}) = \text{const.} n^{\frac{1}{2}kn} |V|^{-\frac{1}{2}n} e^{-\frac{1}{2}kn}$$

であるから

$$\begin{aligned} \lambda^{2/n} &= \frac{|V|}{|V + n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)|} = \frac{1}{|I + nV^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)|} \\ &= \frac{1}{1 + n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)V^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_0)'} = \frac{1}{1 + T^2/(n-1)} \end{aligned} \quad (5.2)$$

ここに T^2 はホテリングの T^2 -統計量、式 (3.36) である。 λ は明らかに T^2 の単調減少関数であるから、 LRT は T^2 による検定と同等である。棄却域は有意水準 ε に対して $\{T^2 : T^2 > T_{\varepsilon}^2\}$ である。ここに T_{ε}^2 は T^2 -分布の上方 $100\varepsilon\%$ 点、すなわち、 $\varepsilon = \Pr\{\lambda < \lambda_{\varepsilon} | H_0\} = \Pr\{T^2 > T_{\varepsilon}^2 | H_0\}$ を満たす。前節 [定理 3.9] によれば、 $H_0: \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0$ が真なるとき、 $T^2(n-k)/k(n-1)$ は、自由度 $(k, n-k)$ の中心的 F -分布に従うから、 F -表から上方 $100\varepsilon\%$ 点 $F_{k, n-k}(\varepsilon)$ を求めれば、 $T_{\varepsilon}^2 = [k(n-1)/(n-k)]F_{k, n-k}(\varepsilon)$ と求められる。

T^2 -検定の検定力は [定理 3.9] の一般分布によって与えられる。最強力な不変検定であること、許容的であることなど好ましい性質をもっているが、これらに関しては、P. L. Hsu [21], J. B. Simaika [48], C. Stein [56], E. L. Lehman [31] を参照せよ。

二つの正規母集団 $N(\boldsymbol{\mu}_{(1)}, \mathbf{A})$, $N(\boldsymbol{\mu}_{(2)}, \mathbf{A})$ において, 等平均仮説 $H_0: \boldsymbol{\mu}_{(1)} = \boldsymbol{\mu}_{(2)}$ を検定する場合には

$$\begin{aligned} \lambda^{2/(n_1+n_2)} &= \frac{1}{1 + \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} (\bar{\mathbf{x}}_{(1)} - \bar{\mathbf{x}}_{(2)}) (\mathbf{V}_{(1)} + \mathbf{V}_{(2)})^{-1} (\bar{\mathbf{x}}_{(1)} - \bar{\mathbf{x}}_{(2)})'} \\ &= \frac{1}{1 + T^2/(n_1 + n_2 - 2)} \end{aligned} \quad (5.3)$$

が LRC として得られる。記号は式 (3.40) のものと同じである。

5.3 成分変数の組の独立性の検定

A. 尤度比検定規準

$\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ において $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1(1 \times k_1), \dots, \mathbf{x}_m(1 \times k_m))$ とする。ただし $k = k_1 + \dots + k_m$ である。これに対応する $\boldsymbol{\mu}$, \mathbf{A} の分割をそれぞれ

$$\boldsymbol{\mu} = (\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_m), \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1m} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{m1} & \mathbf{A}_{m2} & \cdots & \mathbf{A}_{mm} \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

と表わす。このとき仮説 $H_0: \mathbf{A}_{ij} = \mathbf{O}$, $i \neq j$ に対する LRC を求める。 H_0 の下で尤度関数は

$$L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}) = \text{const.} \prod_{i=1}^m |\mathbf{A}_{ii}|^{-\frac{1}{2}n} \exp \left[-\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \{ \mathbf{V}_{ii} + n(\bar{\mathbf{x}}_i - \boldsymbol{\mu}_i)' (\bar{\mathbf{x}}_i - \boldsymbol{\mu}_i) \} \right]$$

と書けるから容易に

$$\max_{\omega} L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}) = \prod_{i=1}^m \max_{\boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{A}_{ii}} L_i(\boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{A}_{ii}) = \text{const.} \left(\prod_{i=1}^m |\mathbf{V}_{ii}|^{-\frac{1}{2}n} \right) n^{\frac{1}{2}kn} e^{-\frac{1}{2}kn}$$

となる。ここに $\bar{\mathbf{x}}_i = \sum_{\omega=1}^n \mathbf{x}_{i\omega}/n$, $\mathbf{V}_{ii} = \sum_{\omega=1}^n (\mathbf{x}_{i\omega} - \bar{\mathbf{x}}_i)' (\mathbf{x}_{i\omega} - \bar{\mathbf{x}}_i)$ である。ゆえに H_0 の $LRC = \lambda = \max_{\omega} L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}) / \max_{\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}} L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ に対して

$$\lambda^{2/n} = w = \frac{|\mathbf{V}|}{\prod_{i=1}^m |\mathbf{V}_{ii}|} = |\mathbf{V} \mathbf{D}_V^{-1}| \quad (5.5)$$

が得られる。 $\mathbf{D}_V = \text{diag}(\mathbf{V}_{11}, \dots, \mathbf{V}_{mm})$ である。

特別の場合を考えてみよう。

(i) $m=k$, $k_1=\cdots=k_m=1$ のとき

$$w = \frac{|V|}{v_{11}\cdots v_{kk}} = |R| \quad (5.6)$$

(ii) $m=2$, $k_1+k_2=k$ の場合

$$w = \frac{|V|}{|V_{11}||V_{22}|} = \frac{|V_{11}-V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}|}{|V_{11}|} = \frac{|V_{22}-V_{21}V_{11}^{-1}V_{12}|}{|V_{22}|} \quad (5.7)$$

で式 (4.45) のものである。

(iii) $m=2$, $k_1=1$, $k_2=k-1$ のとき, 式 (4.34) により

$$w = \frac{|V|}{v_{11}|V_{22}|} = 1 - \bar{r}_{1(2\cdots k)}^2 \quad (5.8)$$

となり, x_1 と (x_2, \cdots, x_k) の間の独立性に対する LRT は, 重相関係数の 2 乗 $\bar{r}_{1(2\cdots k)}^2$ に基づいてなされる。 $m>2$ の場合, x_1 と (x_2, \cdots, x_m) の間の独立性, x_2 と (x_3, \cdots, x_m) の間の独立性, \cdots , x_{m-1} と x_m の間の独立性を分解して考え

$$w = \frac{|V|}{|V_{11}||V_{22}\cdots V_{2m}|} \cdot \frac{\begin{vmatrix} V_{22} & \cdots & V_{2m} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{m2} & \cdots & V_{mm} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} V_{22} & \cdots & V_{3m} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{m3} & \cdots & V_{mm} \end{vmatrix}} \cdots \frac{\begin{vmatrix} V_{m-1,m-1} & V_{m-1,m} \\ V_{m,m-1} & V_{mm} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} V_{m-1,m-1} & \\ & V_{mm} \end{vmatrix}} \\ = w_1 w_2 \cdots w_{m-1} \quad (5.9)$$

と書ける。

B. 検定統計量の積率および分布

$H_0: A_{ij} \neq 0$, $i \neq j$ が正しいときの式 (5.5) の w の積率を求めよう。 $V \sim W(A, k, \nu=n-1)$ であるから, H_0 の下で w の h 次の積率は

$$\mathcal{E}(w^h) = \frac{c(A, \nu)}{c(A, \nu+2h)} \int_{V>0} \cdots \int_{i=1}^m |V_{ii}|^{-h} \left[c(A, \nu+2h) |V|^{\frac{1}{2}(\nu+2h-k-1)} \right. \\ \left. \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \text{tr} A_{ii}^{-1} V_{ii} \right\} \right] dV \quad (5.10)$$

と書ける。ここに

$$[c(\mathbf{A}, \nu)]^{-1} = 2^{\frac{1}{2}\nu k} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^m |A_{ii}|^{\frac{1}{2}\nu} \prod_{j=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-j)\right] \quad (5.11)$$

である。式(5.10)の[]の中が $W(\mathbf{A}, k, \nu+2h)$ の密度関数であるから、まず V_{ij} , $i \neq j$ について式(5.10)を積分すれば、 V_{ii} , $i=1, \dots, m$ の周辺分布 $W(A_{ii}, k_i, \nu+2h)$ の密度関数の積が出てきて

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w^h) &= \frac{c(\mathbf{A}, \nu)}{c(\mathbf{A}, \nu+2h)} \prod_{i=1}^m \int_{V_{ii}>0} \dots \int c(A_{ii}, \nu+2h) |V_{ii}|^{\frac{1}{2}(\nu-k_i-1)} \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr } A_{ii}^{-1} V_{ii}\right\} dV_{ii} \\ &= \frac{c(\mathbf{A}, \nu)}{c(\mathbf{A}, \nu+2h)} \prod_{i=1}^m \frac{c(A_{ii}, \nu+2h)}{c(A_{ii}, \nu)} \end{aligned}$$

と計算される。式(5.11)を代入して整理すれば、

$$\mathcal{E}(w^h) = \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} \prod_{j=1}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)+h\right]} \quad (5.12)$$

が得られる。

w の積率はこのように容易に計算されるが、その密度関数は特別の場合を除けば、一般に困難である。ただ次の結果は容易に得られる。

〔定理 5.3〕 独立性の検定統計量、式(5.5)の w は

$$w = \prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} z_{j\alpha} \quad (5.13)$$

と表わすことができる。ここに $z_{j\alpha}$ は互いに独立にベータ分布

$\beta\left(z_{j\alpha}; \frac{1}{2}(\nu+1-\bar{k}_j-\alpha), \frac{1}{2}\bar{k}_j\right)$ に従う確率変数であり、 $\bar{k}_j = k_1 + \dots + k_{j-1}$ である。

〔証明〕 式(5.12)を次のように書き直すことができる。

$$\mathcal{E}(w^h) = \prod_{i=k_1+1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} \prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)+h\right]}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\bar{k}_j-\alpha)+h\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\bar{k}_j-\alpha)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)+h\right]} \\
&= \prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} \frac{1}{B\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\bar{k}_j-\alpha), \frac{1}{2}\bar{k}_j\right]} \int_0^1 x^{\frac{1}{2}(\nu+1-\bar{k}_j-\alpha)+h-1} (1-x)^{\frac{1}{2}\bar{k}_j-1} dx \\
&= \prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} \mathcal{E}(z_{j\alpha}^h) = \mathcal{E}\left\{\left(\prod_{j=2}^m \prod_{\alpha=1}^{k_j} z_{j\alpha}\right)^h\right\}
\end{aligned}$$

w の分布はその積率によって一意に決まるから定理が成立する。

この結果を利用して特殊な場合の w の分布が具体的に求められる。たとえば、 $k=3$, $k_1=k_2=k_3=1$ のときには

$$\begin{aligned}
\Pr\{w \leq a\} &= \Pr\{z_1 z_2 \leq a\} \\
&= \left\{ B\left[\frac{1}{2}(\nu-1), \frac{1}{2}\right] B\left[\frac{1}{2}(\nu-2), 1\right] \right\}^{-1} \cdot \\
&\quad \cdot \left\{ \int_0^a \int_0^1 + \int_a^1 \int_0^{a/x} \right\} x^{\frac{1}{2}(\nu-1)-1} (1-x)^{-\frac{1}{2}} y^{\frac{1}{2}(\nu-2)-1} dy dx \\
&= I_a\left[\frac{1}{2}(\nu-1), \frac{1}{2}\right] + 2 B^{-1}\left[\frac{1}{2}(\nu-1), \frac{1}{2}\right] a^{\frac{1}{2}\nu-1} \arcsin \sqrt{1-a}
\end{aligned} \tag{5.14}$$

と求まる。ここで $I_a(\alpha, \beta)$ は不完全ベータ関数である。Wilks [59], Wald & Brookner [58] を参照せよ。

5.4 尤度比検定規準およびウィッシャート行列の関数の漸近分布

尤度比検定規準の正確な分布は、一般的には求めることが困難であるが、G. E. P. Box [6] は尤度比検定規準の積率に着目して、[定理 5.2] より精密な次の一般的な結果を与えた。

[定理 5.4] 統計量 $\lambda (0 \leq \lambda \leq 1)$ の h 次の積率が

$$\mathcal{E}(\lambda^h) = c \left[\frac{\prod_{j=1}^b y_j^{y_j}}{\prod_{i=1}^a x_i^{x_i}} \right]^h \frac{\prod_{i=1}^a \Gamma[x_i(1+h) + \xi_i]}{\prod_{j=1}^b \Gamma[y_j(1+h) + \eta_j]}, \quad h=0, 1, 2, \dots \quad (5.15)$$

であるとする。ただし c は $\mathcal{E}(\lambda^0)=1$ とする常数でかつ $\sum_{i=1}^a x_i = \sum_{j=1}^b y_j$ である。
このとき

$$v = -2 \log \lambda \quad (5.16)$$

とおけば、 $0 < \tau \leq 1$ なる τ に対して

$$\begin{aligned} \Pr\{\tau v \leq \tau v_0\} &= \Pr\{\chi_f^2 \leq \tau v_0\} + r_1 [\Pr\{\chi_{f+2}^2 \leq \tau v_0\} - \Pr\{\chi_f^2 \leq \tau v_0\}] \\ &\quad + [\tau_2 (\Pr\{\chi_{f+4}^2 \leq \tau v_0\} - \Pr\{\chi_{f+2}^2 \leq \tau v_0\}) \\ &\quad + \frac{r_1^2}{2} (\Pr\{\chi_{f+4}^2 \leq \tau v_0\} - 2 \Pr\{\chi_{f+2}^2 \leq \tau v_0\} \\ &\quad + \Pr\{\chi_f^2 \leq \tau v_0\})] + \dots \end{aligned} \quad (5.17)$$

なる漸近展開が成立する。ここで χ_{f+m}^2 は自由度 $f+m$ の χ^2 -変量。

$$f = -2 \left\{ \sum_{i=1}^a \xi_i - \sum_{j=1}^b \eta_j - \frac{1}{2}(a-b) \right\} \quad (5.18)$$

$$r_r = \frac{(-1)^{r+1}}{r(r+1)} \left\{ \sum_{i=1}^a \frac{B_{r+1}(u_i)}{(\tau x_i)^r} - \sum_{j=1}^b \frac{B_{r+1}(u_j^*)}{(\tau y_j)^r} \right\} \quad (5.19)$$

また $B_r(u)$ はベルヌーイの多項式 $[B_0(u)=1, B_1(u)=u-1/2, B_2(u)=u^2-u+1/6, B_3(u)=u^3-(3/2)u^2+(1/2)u, \dots]$, $u_i=(1-\tau)x_i+\xi_i$, $u_j^*=(1-\tau)y_j+\eta_j$ である。

この定理の τ としては多くの場合 $r_1=0$ を満たすように決められる。このとき式 (5.17) の第1項だけで、標本の大きさがそれほど大きくなくても相当よい近似を与えることが具体的な応用例で数値的に示されている。

次にウィッシュャート行列 $\mathbf{V} = \nu \mathbf{S}(k \times k)$ の関数 $f(\mathbf{S})$ の漸近分布を求めるときに便利な公式を与える。これは多変量解析における検定規準がしばしば \mathbf{S} の関数であるがこのときの近似的な検定力関数を与えるものである。

$f(\mathbf{S})$ を $\mathbf{S}=\mathbf{A}$ の近傍で一次、二次の微係数をもち、かつ $f(\mathbf{A}) \neq \mathbf{0}$ なる \mathbf{S} の関数のベクトルとする。[定理 4.5] により \mathbf{S} は漸近的に正規分布に従

うから、 $\sqrt{\nu}\{f(S)-f(A)\}$ の漸近分布は、[定理 4・4] により、平均 $\mathbf{0}$ の正規分布である。

[定理 5・5] $f(S)$ を上記の性質をもつ一つの S の一価関数とするととき、その漸近分布における分散は

$$\text{Var}\{f(S)\} \doteq \frac{2}{\nu} \{f(A)\}^2 \text{tr}(\Phi A)^2 \quad (5.20)$$

で与えられる。ただし、 $\Phi = (\phi_{ij})$, $\phi_{ij} = \partial \log f(A) / \partial \lambda_{ij}$ である。また $f(S)$, $g(S)$ なる二つの関数の漸近分布における共分散は

$$\text{Cov}\{f(S), g(S)\} = \frac{2}{\nu} f(A)g(A) \text{tr}(\Phi A \Psi A) \quad (5.21)$$

で与えられる。ただし、 $\Psi = (\psi_{ij})$, $\psi_{ij} = \partial \log g(A) / \partial \lambda_{ij}$ である。

[証明]

$$\begin{aligned} \text{Var}\{f(S)\} &\doteq \mathcal{E} \left\{ \sum_{i,j=1}^k \frac{\partial f(S)}{\partial s_{ij}} \bigg|_{S=A} (s_{ij} - \lambda_{ij}) \right\}^2 \\ &= \sum_{i,j,l,m=1}^k \frac{\partial f(A)}{\partial \lambda_{ij}} \cdot \frac{\partial f(A)}{\partial \lambda_{lm}} \mathcal{E}(s_{ij} - \lambda_{ij})(s_{lm} - \lambda_{lm}) \\ &\doteq \frac{1}{\nu} \{f(A)\}^2 \sum_{i,j,l,m=1}^k \phi_{ij} \phi_{lm} (\lambda_{il} \lambda_{jm} + \lambda_{im} \lambda_{jl}) \\ &= \frac{2}{\nu} \{f(A)\}^2 \sum_{i,j,l,m=1}^k \phi_{ij} \phi_{lm} \lambda_{il} \lambda_{jm} = \frac{2}{\nu} \{f(A)\}^2 \text{tr}(\Phi A)^2 \end{aligned}$$

となり式 (5.20) が得られる。式 (5.21) も同様にして求められる。

[例 1] 一般化分散 $|S|$ の漸近分布

$$f(S) = |S|, \quad \phi_{ij} = \partial \log |A| / \partial \lambda_{ij} = (A^{-1})_{ij}, \quad \Phi = (\phi_{ij}) = A^{-1}$$

であるから

$$\text{Var}(|S|) \doteq \frac{2}{\nu} |A|^2 \text{tr}(A^{-1} A)^2 = \frac{2}{\nu} k |A|^2 \quad (5.22)$$

である。ゆえに $\sqrt{\nu}\{|S|/|A| - 1\}$ の漸近分布は $N(0, 2k)$ である。

[例 2] S の左上の $r \times r$ 小行列を S_r とし、 $f(S) = |S|$, $g(S) = |S_r|$ の同時漸近分布における共分散を計算しよう。前例により $\Phi = A^{-1}$, $\Psi = \begin{bmatrix} A_r^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ であるから

$$\begin{aligned}\text{Cov}(|S|, |S_r|) &\doteq \frac{2}{\nu} |A| |A_r| \text{tr}(A^{-1} A^T A) \\ &= \frac{2}{\nu} |A| |A_r| \text{tr}(A_r^{-1} A_r) = \frac{2}{\nu} r |A| |A_r|\end{aligned}\quad (5.23)$$

と求まる。

[定理 5.5] のいろいろな応用例に関しては、塩谷・早川 [55] を参照のこと。

5.5 独立性の検定規準の漸近分布

5.3 節の独立性の検定の問題にもどらう。仮説 $H_0: A_{ij} = 0, i \neq j$, が正しいとき、尤度比検定規準 $\lambda = w^{n/2}$ (式 (5.5)) の積率は式 (5.12) より

$$\mathcal{E}(\lambda^h) = \mathcal{E}(w^{nh/2}) = c \cdot \frac{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}\{n(1+h)-i\}\right]}{\prod_{i=1}^m \prod_{j=1}^{k_i} \Gamma\left[\frac{1}{2}\{n(1+h)-j\}\right]}$$

となる。[定理 5.4] に対応させれば

$$\begin{aligned}a &= k, \quad x_i = n/2, \quad \xi_i = -i/2 \\ b &= k, \quad y_j = n/2, \quad \eta_j = (k_1 + \cdots + k_{i-1} - j)/2, \\ j &= k_1 + \cdots + k_{i-1} + 1, \cdots, k_1 + \cdots + k_i; \quad i = 1, \cdots, m\end{aligned}$$

となる。これより $f = \frac{1}{2} \{k(k+1) - \sum_i k_i(k_i+1)\} = \frac{1}{2} (k^2 - \sum_i k_i^2)$ と求まり、 $r_1 = 0$ とする τ は

$$\tau = 1 - \frac{2(k^3 - \sum k_i^3) + 9(k^2 - \sum k_i^2)}{6n(k^2 - \sum k_i^2)}$$

となる。ゆえにこの τ を用いて

$$-2\tau \log \lambda = -\left\{n - \frac{3}{2} - \frac{k_3 - \sum k_i^3}{3(k^2 - \sum k_i^2)}\right\} \log \frac{|V|}{\prod_{i=1}^m |V_{ii}|} \quad (5.24)$$

は、漸近的に自由度 $\frac{1}{2}(k^2 - \sum k_i^2)$ の χ^2 -分布に従うことになる。特別の場合として、

(i) $m = k, k_1 = k_2 = \cdots = k_m = 1$ のとき

$$-\left\{(n-1) - \frac{1}{6}(2k+5)\right\} \log |R| \quad (5.25)$$

は漸近的に自由度 $k(k+1)/2$ の χ^2 -分布に従う。

(ii) $m=2$, $k_1+k_2=k$ のときには

$$-\left\{(n-1)-\frac{1}{2}(k+1)\right\}\log|\mathbf{V}|/|\mathbf{V}_{11}||\mathbf{V}_{22}| \quad (5.26)$$

が自由度 k_1k_2 の χ^2 -分布に漸近的に従う。

(iii) $m=2$, $k_1=1$, $k_2=k-1$ のとき

$$-\left\{(n-1)-\frac{1}{2}(k+1)\right\}\log(1-\bar{r}_{1(2\cdots k)}^2) \quad (5.27)$$

は漸近的に自由度 $(k-1)$ の χ^2 -分布に従う。

以上のように正確な分布が求まっていない場合には、漸近分布を利用して近似的な χ^2 -検定が得られる。

次に H_0 が正しくないとき、すなわち、少なくとも一つ $\mathbf{A}_{ij} \neq \mathbf{O}$ であるときの漸近分布を求めておく。[定理 5.5] により

$$\begin{aligned} f(\mathbf{S}) &= |\mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}^{-1}|, \quad \mathbf{D}_S = \text{diag}(\mathbf{S}_{11}, \dots, \mathbf{S}_{mm}) \\ \phi_{ij} &= \partial \log f(\mathbf{A}) / \partial \lambda_{ij} = \partial \log |\mathbf{A}| / \partial \lambda_{ij} - \partial \log |\mathbf{D}_A| / \partial \lambda_{ij} \\ &= (\mathbf{A}^{-1})_{ij} - (\mathbf{D}_A^{-1})_{ij} \\ \boldsymbol{\phi} &= \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{D}_A^{-1} \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} \text{Var}\{f(\mathbf{S})\} &\doteq \frac{2}{\nu} |\mathbf{A}\mathbf{D}_A^{-1}|^2 \text{tr}\{(\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{D}_A^{-1})\mathbf{A}\}^2 \\ &\doteq \frac{2}{\nu} |\mathbf{A}\mathbf{D}_A^{-1}|^2 \{\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{D}_A^{-1})^2 - k\} \end{aligned} \quad (5.28)$$

と計算される。ゆえに $\mathbf{A}\mathbf{D}_A^{-1} \neq \mathbf{I}$ のとき $w = |\mathbf{S}\mathbf{D}_S^{-1}|$ は漸近的に平均 $|\mathbf{A}\mathbf{D}_A^{-1}|$, 分散, 式 (5.28) の正規分布に従う。[定理 4.7] はこの特別の場合である。

5.6 等共分散行列の仮説検定

A. 検定統計量

$\mathbf{X}'_{(h)}(k \times n_h) = (\mathbf{x}'_{(h)1}, \dots, \mathbf{x}'_{(h)n_h})$, $h=1, \dots, q$ をそれぞれ $N(\boldsymbol{\mu}_{(h)}, \mathbf{A}_{(h)})$, $h=1, \dots, q$ からの任意標本とする。これらに基づいて $H_0: \mathbf{A}_{(1)} = \dots = \mathbf{A}_{(q)}$ を

検定する LRC を求めると、各標本における積和行列を $V_{(h)}$, $\sum_{h=1}^q V_{(h)} = V$, $\sum_{h=1}^q n_h = n$ として

$$\lambda = \frac{\prod_{h=1}^q |V_{(h)}|^{\frac{1}{2}n_h}}{|V|^{\frac{1}{2}n}} \frac{n^{\frac{1}{2}kn}}{\prod_{h=1}^q n_h^{\frac{1}{2}kn_h}} \quad (5.29)$$

と計算される。しかし実際には、Bartlett にならって常数因子を落とし、 n_h の代わりに自由度 $\nu_h = n_h - 1$, $\nu = n - q$ を用いて

$$w = \frac{\prod_{h=1}^q |V_{(h)}|^{\frac{1}{2}\nu_h}}{|V|^{\frac{1}{2}\nu}} \quad (5.30)$$

を検定統計量とする。特に $q=2$ のときは

$$w = \frac{|V_{(1)}|^{\frac{1}{2}\nu_1} |V_{(2)}|^{\frac{1}{2}\nu_2}}{|V_{(1)} + V_{(2)}|^{\frac{1}{2}(\nu_1 + \nu_2)}} = \prod_{i=1}^k r_i^{\frac{1}{2}\nu_1} \prod_{i=1}^k (1 + r_i)^{-\frac{1}{2}(\nu_1 + \nu_2)} \quad (5.31)$$

と書ける。ここに r_i は $|V_{(1)} - rV_{(2)}| = 0$ の根である。

B. H_0 の下における検定統計量の積率

$H_0: A_{(1)} = \dots = A_{(q)} \equiv A_{(0)}$ の下で $V_{(h)} \sim W(A_{(0)}, k, \nu_h)$, $V = \sum_{h=1}^q V_{(h)} \sim W(A_{(0)}, k, \sum_{h=1}^q \nu_h)$ であるから、 $r=0, 1, 2, \dots$ に対して

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w^r) &= \mathcal{E} \left\{ \prod_{h=1}^q |V_{(h)}|^{\frac{1}{2}r\nu_h} |V|^{-\frac{1}{2}r\nu} \right\} \\ &= \prod_{h=1}^q \frac{c(A_{(0)}, \nu_h)}{c(A_{(0)}, \nu_h + r\nu_h)} \int \dots \int \left| \sum_{h=1}^q V_{(h)} \right|^{-\frac{1}{2}r\nu} \\ &\quad \cdot \left\{ \prod_{h=1}^q c(A_{(0)}, \nu_h + r\nu_h) |V_{(h)}|^{\frac{1}{2}(\nu_h + r\nu_h - k - 1)} \right. \\ &\quad \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \text{tr} A_{(0)}^{-1} V_{(h)} \right] \Big\} \prod_{h=1}^q dV_{(h)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{h=1}^q \frac{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu_h)}{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu_h + r\nu_h)} \int \cdots \int |\mathbf{V}|^{-\frac{1}{2}r\nu} \\
&\quad \cdot \{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu + r\nu) |\mathbf{V}|^{\frac{1}{2}(\nu + r\nu - k - 1)} \exp\left(-\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}_{(0)}^{-1} \mathbf{V}\right)\} d\mathbf{V} \\
&= \prod_{h=1}^q \frac{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu_h)}{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu_h + r\nu_h)} \cdot \frac{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu + r\nu)}{c(\mathbf{A}_{(0)}, \nu)} \\
&= \prod_{\alpha=1}^k \left\{ \prod_{h=1}^q \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu_h + r\nu_h + 1 - \alpha)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu_h + 1 - \alpha)\right]} \right\} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu + 1 - \alpha)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu + r\nu + 1 - \alpha)\right]} \\
&\hspace{25em} (5.32)
\end{aligned}$$

と計算される。この積率から求められる w の正確な分布に関しては, E. S. Pearson & Wilks [36] を参照せよ。

C. 漸 近 分 布

$$\lambda^* = w \cdot \frac{\nu^{\frac{1}{2}k\nu}}{\prod_{h=1}^q \nu_h^{\frac{1}{2}k\nu_h}} = \frac{\prod_{h=1}^q |\mathbf{V}_{(h)}|^{\frac{1}{2}\nu_h}}{|\mathbf{V}|^{\frac{1}{2}\nu}} \prod_{h=1}^q \left(\frac{\nu}{\nu_h}\right)^{\frac{1}{2}k\nu_h} \quad (5.33)$$

を考え, この $\frac{\nu_h}{\nu}$ 一定の条件の下での漸近展開を求める。 λ^* の積率は式 (5.32) より

$$\mathcal{E}(\lambda^*) = c \left[\frac{\prod_{j=1}^k \left(\frac{1}{2}\nu\right)^{\frac{1}{2}\nu}}{\prod_{h=1}^q \prod_{i=1}^k \left(\frac{1}{2}\nu_h\right)^{\frac{1}{2}\nu_h}} \right]^r \frac{\prod_{h=1}^q \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}\nu_h(1+r) + \frac{1}{2}(1-i)\right]}{\prod_{j=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}\nu(1+r) + \frac{1}{2}(1-j)\right]} \quad (5.34)$$

と式 (5.15) の形に書くことができる。記号の対応は

$$a = kq, \quad x_i = \frac{1}{2}\nu_h, \quad i = (h-1)k+1, \dots, hk, \quad h=1, \dots, q$$

$$\xi_i = \frac{1}{2}(1-i), \quad \xi_{k+i} = \frac{1}{2}(1-i), \dots, \xi_{(q-1)k+i} = \frac{1}{2}(1-i), \quad i=1, \dots, k$$

$$b = k, \quad y_j = \frac{1}{2}\nu, \quad \eta_j = \frac{1}{2}(1-j), \quad j=1, \dots, k$$

である。ゆえに $r_1=0$ とする, τ , および自由度 f は

$$\tau = 1 - \left(\sum_{h=1}^q \frac{1}{\nu_h} - \frac{1}{\nu} \right) \frac{2k^2 + 3k - 1}{6(k+1)(q-1)} \quad (5.35)$$

$$f = \frac{1}{2}(q-1)k(k+1) \quad (5.36)$$

と計算される。この τ と f を使用すれば, $-2\tau \log \lambda^*$ の分布は漸近的に自由度 f の χ^2 -分布となる。

5.7 共分散行列の構造に関する仮説検定

$\mathbf{x}(1 \times k) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})$ の \mathbf{A} に関する次の三つの仮説を考える。

(1) $H_{10}: \mathbf{A} = \mathbf{D}$ (対角行列), (2) $H_{20}: \mathbf{A} = \sigma^2 \mathbf{I}$, σ^2 は未知, (3) $H_{30}: \mathbf{A} = \mathbf{I}$

H_{10} は成分変量の独立性の仮説であるから, 大きさ n の任意標本における偏差積和行列を \mathbf{V} とすれば, H_{10} に対する LRC は式 (5.6) より

$$\lambda_1 = |\mathbf{V}|^{(1/2) \cdot n} \prod_{i=1}^k v_{ii}^{(1/2) \cdot n} \text{ である。}$$

H_{20} に対する LRC を求めるために次の仮説を考える。 $H_{211}: H_{10}: \mathbf{A} = \mathbf{D}$ が真であるとき, その対角要素がすべて等しい。この仮説は, x_1, \dots, x_k が互いに独立であるときの等分散仮説であるから前節の特別の場合に相当する。ゆえに式 (5.29) より直ちに $LRC \lambda_{211} = \prod_{i=1}^k v_{ii}^{(1/2) \cdot n} \left/ \left(\sum_{i=1}^k v_{ii}/k \right)^{(1/2) \cdot kn} \right. = \prod_{i=1}^k v_{ii}^{(1/2) \cdot n} / (\text{tr } \mathbf{V}/k)^{(1/2) \cdot kn}$ が得られる。したがって λ_2 を H_{20} に対する LRC とすれば, [定理5.1] により

$$\lambda_2 = \lambda_{211} \lambda_1 = |\mathbf{V}|^{\frac{1}{2}n} / (\text{tr } \mathbf{V}/k)^{\frac{1}{2}kn} \quad (5.37)$$

と求められる。

H_{30} に対する LRC は

$$\lambda_3 = \frac{\max_{\boldsymbol{\mu}} L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{I})}{\max_{\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}} L(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A})} = \frac{(2\pi)^{-\frac{1}{2}kn} \exp\left(-\frac{1}{2} \text{tr } \mathbf{V}\right)}{(2\pi)^{-\frac{1}{2}kn} \frac{1}{n^{\frac{1}{2}kn}} |\mathbf{V}|^{-\frac{1}{2}n} e^{-\frac{1}{2}kn}}$$

$$= |n^{-1}V|^{n/2} \exp\left\{\frac{1}{2}kn - \frac{1}{2}\text{tr } V\right\} \quad (5.38)$$

と計算される。

さて上に求めた LRC の標本分布を調べよう。 $\lambda_1^{2/n}$ に関しては、これを特別の場合として、すでに 5.3, 5.5 節で取り扱ったので、ここでは $w_2 = \lambda_2^{2/n}$, $w_3 = \lambda_3^{2/n}$ の分布を取り扱う。

w_3 の分布. H_{30} が正しいときの $w_3 = |n^{-1}V| \exp\{k - \text{tr } V/n\}$ の積率は、 $V \sim W(I, k, \nu = n-1)$ であるから

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w_3^h) &= \left(\frac{e}{n}\right)^{kh} \int_{\Delta > 0} \cdots \int c(I, \nu) |V|^{\frac{1}{2}(\nu+2h-k-1)} \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}\text{tr}\left(\frac{n+2h}{n}\right)V\right\} dV \\ &= \frac{c(I, \nu)}{c(I, \nu+2h)} \left(\frac{e}{n}\right)^{kh} \left(\frac{n}{n+2h}\right)^{\frac{1}{2}k\nu+kh} \\ &= \left(\frac{2e}{n}\right)^{kh} \left(\frac{n}{n+2h}\right)^{\frac{1}{2}k\nu+kh} \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} \end{aligned} \quad (5.39)$$

となる。これは式 (5.15) の形のものでなく Box の定理を適用することができない。しかし [定理 5.2] によれば、 $-2\log \lambda_3$ が漸近的に自由度 $k(k+1)/2$ の χ^2 -分布に従うことがいえるのである。

$A \neq I$ のときの w_3 の漸近分布、すなわち、 H_{30} に対する漸近的検定力関数も [定理 5.5] により容易に得られる。結果は $n \simeq \nu$ として、 w_3 は漸近的に平均 $|A| \exp\{\text{tr}(I-A)\}$ 、分散 $(2/n)|A|^2 \text{tr}(I-A)^2 \exp\{2\text{tr}(I-A)\}$ をもつ正規分布に従う。

w_2 の分布. λ_1 は相関係数 (r_{ij}) だけの関数、 λ_{211} は v_{ii} , $i=1, \dots, k$ だけの関数であることに注意すれば、4.4 節の $p(D_w, R)$ からわかるように、もし $H_{20}: A = \sigma^2 I$ が正しいとき λ_1 と λ_{211} は統計的に独立である。ゆえに $\mathcal{E}(w_2^h) = \mathcal{E}\{(\lambda_2^{2/n})^h\} = \mathcal{E}\{(\lambda_{211}^{2/n})^h\} \mathcal{E}\{(\lambda_1^{2/n})^h\}$ となる。ところで式 (5.12) により

$$\mathcal{E}\{(\lambda_1^{2/n})^h\} = \mathcal{E}\left\{|V|^h / \prod_1^k v_{ii}^h\right\} = \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu+h\right)} \right]^k \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]}$$

また, 式 (5.32) により

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\{(\lambda_{211}^{2/n})^h\} &= \mathcal{E}\left\{\prod_1^k v_{ii}^h / \left(\sum_1^k v_{ii}/k\right)^{kh}\right\} = k^{kh} \mathcal{E}\left\{\prod_1^k v_{ii}^h / \left(\sum_1^k v_{ii}\right)^{kh}\right\} \\ &= k^{kh} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu+h\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu\right)} \right]^k \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}k\nu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}k\nu+kh\right)} \end{aligned}$$

であるから

$$\mathcal{E}(w_2^h) = k^{kh} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}k\nu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}k\nu+kh\right)} \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} \quad (5.40)$$

と求められる。

この積率を利用すると w_2 を独立なベータ確率変数の積に書くことができる。

[定理 5.6] $w_2 = \prod_{i=2}^k z_i$, ただし z_i は互いに独立でベータ分布 $\beta\left[z_i; \frac{1}{2}(\nu+1-i), (i-1)\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{k}\right)\right]$ に従う確率変数である。

[証明] ガンマ関数に関する公式

$$\Gamma(ka) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}(k-1)} k^{ka-\frac{1}{2}} \Gamma(a) \Gamma\left(a+\frac{1}{k}\right) \cdots \Gamma\left(a+\frac{k-1}{k}\right) \quad (5.41)$$

を式 (5.40) に適用すれば, すべての $h=0, 1, 2, \dots$ に対して

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w_2^h) &= \prod_{i=2}^k \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu+\frac{i-1}{k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\nu+\frac{i-1}{k}+h\right)} \cdot \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]} \\ &= \prod_{i=2}^k \frac{1}{B\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i), (i-1)\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{k}\right)\right]} \end{aligned}$$

$$\int_0^1 x^{\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h-1} (1-x)^{(i-1)(\frac{1}{2}+\frac{1}{k})-1} dx$$

となるから定理が得られる。

特に $k=2$ のときには

$$\Pr\{w_2 \leq t\} = \left\{ B\left[\frac{1}{2}(\nu-1), 1\right] \right\}^{-1} \int_0^t z^{\frac{1}{2}(\nu-1)-1} dz = t^{\frac{1}{2}(\nu-1)} \quad (5.42)$$

$k=3$ のときは $\Pr\{w_2 \leq t\} = \Pr\{z_2 z_3 \leq t\}$ となり式 (5.14) と同様に計算される。読者の練習問題とする。

w_2 の H_{20} の下での漸近分布は Box の [定理 5.4] が適用できるので容易に求められる。 $\lambda_2^* = w_2^{\nu/2}$ の積率を考えれば式 (5.40) により

$$\mathcal{E}(\lambda_2^{*k}) = \mathcal{E}(w_2^{k\nu/2}) = c k^{\nu k h/2} \frac{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}\nu(1+h) + \frac{1}{2}(1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}k\nu(1+h)\right]} \quad (5.43)$$

と書けるから、式 (5.15) との対応

$$a=k, \quad x_i = \frac{1}{2}\nu, \quad \xi_i = \frac{1}{2}(1-i), \quad i=1, \dots, k$$

$$b=1, \quad y_j = \frac{1}{2}k\nu, \quad \eta_j = 0, \quad j=1$$

が得られる。ゆえに $r_1=0$ とする τ , および自由度 f は

$$\tau = 1 - \frac{2k^2 + k + 2}{6k\nu}, \quad f = \frac{1}{2}k(k+1) - 1 \quad (5.44)$$

と計算される。したがって

$$-2\tau \log \lambda_2^* = -\tau \nu \log \frac{|V|}{(\text{tr } V/k)^k} \quad (5.45)$$

は漸近的に自由度 $\frac{1}{2}k(k+1)-1$ の χ^2 -分布に従う。

最後に H_{20} が正しくないときの w_2 の漸近分布を求めておく。

$$f(S) = |S|/(\text{tr } S/k)^k = |V|/(\text{tr } V/k)^k = w_2$$

$$\phi_{ij} = \frac{\partial \log f(A)}{\partial \lambda_{ij}} = \frac{\partial}{\partial \lambda_{ij}} (\log |A| + k \log k - k \log (\text{tr } A))$$

$$\begin{aligned}
 &= (\mathbf{A}^{-1})_{ij} - k\delta_{ij}/\text{tr } \mathbf{A} \\
 \boldsymbol{\Phi} &= \mathbf{A}^{-1} - (k/\text{tr } \mathbf{A})\mathbf{I}
 \end{aligned}$$

であるから, [定理 5.20] により漸近分布における分散は

$$\text{Var}(w_2) = \text{Var}\{f(\mathbf{S})\} \doteq \frac{2}{\nu} \{f(\mathbf{A})\}^2 \left\{ \frac{\text{tr } \mathbf{A}^2}{(\text{tr } \mathbf{A}/k)^2} - k \right\} \quad (5.46)$$

と求まる。ゆえに w_2 は H_{20} が正しくないとき, 平均 $f(\mathbf{A}) = |\mathbf{A}|/(\text{tr } \mathbf{A}/k)^k$, 分散, 式 (5.46) の正規分布をその漸近分布としてもつ。

第6章 ユニオン・インターセクション法

6.1 拡張された第一種検定法

Roy [43], Roy & Bose [44] は、多変量解析において合理的に推定・検定方式を構成するときしばしば起きる困難をすくうため、第一種、第二種検定法と名づけられた発見的方法を定義した。このうち第二種のほうは尤度比検定と同じものである。ここでは、拡張された意味の第一種検定法について述べる。

検定すべき仮説を H_0 , 対立仮説の可能な範囲を Ω , その要素を H で表わす。 H_0, H を複合仮説とし, $H_0 = \cap_{\alpha \in \mathfrak{A}} H_{0\alpha}$, $H = \cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} H_\alpha$ と分解表現が可能であるとする。ここに \mathfrak{A} は連続の濃度をもつ集合で, $H_{0\alpha}, H_\alpha$ は複合仮説である。もし任意の $H \in \Omega$ について, $H_{0\alpha}$ を H_α に対して検定するための, 大きさ η の双方に相似な*最強力棄却域 $w(H_{0\alpha}, H_\alpha, \eta)$ が存在すれば, H_0 のすべての $H \in \Omega$ に対する検定の棄却域を和集合 $\cup_{H \in \Omega} \cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} w(H_{0\alpha}, H_\alpha, \eta)$ とし, したがって採択域をその補集合 $\cap_{H \in \Omega} \cap_{\alpha \in \mathfrak{A}} \bar{w}(H_{0\alpha}, H_\alpha, \eta)$ とする。 η は

$$\Pr\{X \in \cup_{H \in \Omega} \cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} w(H_{0\alpha}, H_\alpha, \eta) | H_0\} = \epsilon \quad (\text{有意水準})$$

によって定める。これが, 拡張された第一種検定法で, 棄却域, 採択域を和集合, 積集合をとることによって作ってゆく方法が, ユニオン・インターセクション法 (以後 UI-法という) といわれる。

6.2 等共分散行列の仮説に対する拡張された第一種検定

$N(\mu_{(1)}, \mathbf{A}_{(1)}), N(\mu_{(2)}, \mathbf{A}_{(2)})$ において $H_0: \mathbf{A}_{(1)} = \mathbf{A}_{(2)}$ の $H: \mathbf{A}_{(1)} \neq \mathbf{A}_{(2)}$ に対する検定を考える。いま $\alpha(1 \times k)$ を $\mathbf{0}$ でない実ベクトルとしその全体を \mathfrak{A} とすれば, H_0, H を次の擬似一変量問題の集りの形に書くことができる。

* この定義については, Roy の論文 [43] を参照のこと。

$$H_{0\alpha} : \alpha \mathbf{A}_{(1)} \alpha' = \alpha \mathbf{A}_{(2)} \alpha', \quad H_0 = \cap_{\alpha \in \mathfrak{A}} H_{0\alpha} \quad (6.1)$$

$$H_\alpha : \alpha_{(1)} \mathbf{A} \alpha' \neq \alpha \mathbf{A}_{(2)} \alpha', \quad H = \cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} H_\alpha \quad (6.2)$$

H_α をさらに二つに分けて

$$H_\alpha^{(1)} : \alpha \mathbf{A}_{(1)} \alpha' < \alpha \mathbf{A}_{(2)} \alpha', \quad H_\alpha^{(2)} : \alpha \mathbf{A}_{(1)} \alpha' > \alpha \mathbf{A}_{(2)} \alpha' \quad (6.3)$$

とすれば, $H = \cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} (H_\alpha^{(1)} \cup H_\alpha^{(2)})$ と書ける。すなわち H は少なくとも一つの $H_\alpha^{(1)}$ か $H_\alpha^{(2)}$ が成り立つことである。さて $\mathbf{S}_{(1)} = \mathbf{V}_{(1)}/(n_1-1)$, $\mathbf{S}_{(2)} = \mathbf{V}_{(2)}/(n_2-1)$ をそれぞれの任意標本における不偏共分散行列とし, $\mathbf{x}_{(i)} \sim N(\boldsymbol{\mu}_{(i)}, \mathbf{A}_{(i)})$, $i=1, 2$ とする。 $\alpha \mathbf{x}_{(i)}' \sim N(\alpha \boldsymbol{\mu}_{(i)}', \alpha \mathbf{A}_{(i)} \alpha')$ であるから, $\alpha \mathbf{S}_{(i)} \alpha'$ は $\alpha \mathbf{x}_{(i)}$ についての不偏分散で, したがって, $F_\alpha = \alpha \mathbf{S}_{(1)} \alpha' / \alpha \mathbf{S}_{(2)} \alpha'$ は自由度 (n_1-1, n_2-1) の F -統計量で $H_{0\alpha}$ の下で (中心的) F -分布に従う。このとき $H_{0\alpha}$ の $H_\alpha^{(i)}$ に対する片側検定では棄却域 $F_\alpha < F(\eta_1)$, $(i=1)$, と $F_\alpha > F(\eta_2)$, $(i=2)$ が一様最強力であることが知られている。ここに $F(\eta_1)$, $F(\eta_2)$ はそれぞれ F_{n_1-1, n_2-1} の下方 $100\eta_1\%$ 点, 上方 $100\eta_2\%$ 点である。ここで UI-法の原理により, $H_{0\alpha}$ の $H_\alpha = H_\alpha^{(1)} \cup H_\alpha^{(2)}$ に対する大きさ $\eta = \eta_1 + \eta_2$ の棄却域として和集合 $\cup(\alpha) = [F_\alpha < F(\eta_1)] \cup [F_\alpha > F(\eta_2)]$ を作る。もし与えられた η に対して, $\cup(\alpha)$ が局所的不偏性を満たすように η_1, η_2 を決めれば, $\cup(\alpha)$ は一様不偏, 許容的とか検定力が $H_{0\alpha}$ からの隔たりに関して単調増加であるなど好ましい性質をもつ。こうして UI-法による H_0 の H に対する拡張された第一種検定の棄却域は, α を \mathfrak{A} で動かしたときの和集合

$$\cup_{\alpha \in \mathfrak{A}} [\alpha \mathbf{S}_{(1)} \alpha' / \alpha \mathbf{S}_{(2)} \alpha' < F(\eta_1) \text{ または } \alpha \mathbf{S}_{(1)} \alpha' / \alpha \mathbf{S}_{(2)} \alpha' > F(\eta_2)] \quad (6.4)$$

となり, 採択域はその補集合

$$\cap_{\alpha \in \mathfrak{A}} [F(\eta_1) \leq \alpha \mathbf{S}_{(1)} \alpha' / \alpha \mathbf{S}_{(2)} \alpha' \leq F(\eta_2)] \quad (6.5)$$

である。いま方程式

$$|\mathbf{S}_{(1)} - r \mathbf{S}_{(2)}| = 0 \quad (6.6)$$

の最大根, 最小根をそれぞれ r_{\max} , r_{\min} と書けば, (A. 4. 2) により, すべての $\alpha \in \mathfrak{A}$ に対する $F(\eta_1) \leq \alpha \mathbf{S}_{(1)} \alpha' / \alpha \mathbf{S}_{(2)} \alpha' \leq F(\eta_2)$ と $F(\eta_1) \leq r_{\min} \leq r_{\max} \leq F(\eta_2)$ は同等であるから式 (6.4), (6.5) の棄却域, 採択域は

$$[r_{\min} < F(\eta_1) \text{ または } r_{\max} > F(\eta_2)]; [F(\eta_1) \leq r_{\min} \leq r_{\max} \leq F(\eta_2)] \quad (6.7)$$

となる。したがって $F(\eta_1)$, $F(\eta_2)$ は最初に与えた有意水準を ε とすれば、前述の局所的不偏性の条件と

$$\Pr\{F(\eta_1) \leq r_{\min} \leq r_{\max} \leq F(\eta_2) | H_0\} = 1 - \varepsilon \quad (6.8)$$

によって決められる。

6.3 等平均ベクトルの仮説に対する拡張された第一種検定

$N(\mu_{(i)}, A)$, $i=1, \dots, m$ のとき, $H_0: \mu_{(1)} = \dots = \mu_{(m)}$ を $H: \neq H_0$ に対して検定する場合には, $H_{0a}: a\mu_{(1)}' = \dots = a\mu_{(m)}'$, $H_a: \neq H_{0a}$, $a \in \mathfrak{A}$ とする。 H_{0a} を H_a に対して検定する擬似一変量問題を考えれば、前節と同様に拡張された第一種検定を構成することができる。 n_i を標本の大きさ, $S_b = \sum_{i=1}^m n_i (\bar{x}_{(i)} - \bar{x})' (\bar{x}_{(i)} - \bar{x}) / (m-1)$ を m 個の標本平均間の共分散行列, $S_w = \sum_{i=1}^m \sum_{a=1}^{n_i} (x_{(i)a} - \bar{x}_{(i)})' (x_{(i)a} - \bar{x}_{(i)}) / \left(\sum_{i=1}^m n_i - m \right)$ を標本内不偏共分散行列とすれば, $F_a = a S_b a' / a S_w a' = F_{m-1, n-m}$, $\left(n = \sum_{i=1}^m n_i \right)$ が F -統計量であり、一変量のときの等平均仮説に対する F -検定の棄却域 $F_a > F(\eta)$ をもとに, H_0 を H に対して検定する棄却域として、和集合 $\cup_{a \in \mathfrak{A}} [F_a > F(\eta)]$ が得られる。採択域はその補集合 $\cap_{a \in \mathfrak{A}} [F_a \leq F(\eta)]$ である。いま

$$|S_b - r S_w| = 0 \quad (6.9)$$

の最大根を $r_{\max} = C_{\max}(S_b S_w^{-1})$ とすれば、棄却域、採択域はそれぞれ $[r_{\max} > F(\eta)]$, $[r_{\max} \leq F(\eta)]$ と書かれ、 $F(\eta)$ は与えられた有意水準 ε に対して

$$\Pr\{r_{\max} \geq F(\eta) | H_0\} = \varepsilon \quad (6.10)$$

から決められる。

6.4 独立性の仮説に対する拡張された第一種検定

$x(1 \times k) = (x_1(1 \times k_1), x_2(1 \times k_2))$, $(k_1 \leq k_2)$ の分布 $N\left\{(\mu_1, \mu_2), \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}\right\}$ において, $H_0: A_{12} = O$ を $H: A_{12} \neq O$ に対して検定する場合には,

$$H_{0ab}: aA_{12}b' = 0, \quad H_{ab}: aA_{12}b' \neq 0, \quad a \in \mathfrak{A}_1, \quad b \in \mathfrak{A}_2 \quad (6.11)$$

と分解して擬似二変量問題として考える。標本における不偏共分散行列 $S = V/\nu$ の分割における小行列を $S_{ij} = V_{ij}/\nu$, $i, j=1, 2$ と書けば, 止めた a, b に対して, ax_1' と bx_2' の間の標本相関係数は $r_{ab} = aS_{12}b' / (aS_{11}a')^{1/2} \cdot (bS_{22}b')^{1/2}$ であるから, H_{0ab} を H_{ab} に対して行なう検定の棄却域 $[r_{ab}^2 > r_\gamma^2]$ を利用することができる。ゆえに UI-法を適用して, H_0 の H に対する拡張された第一種検定の採択域は $\cap_{a \in \mathfrak{A}_1} \cap_{b \in \mathfrak{A}_2} [r_{ab}^2 \leq r_\gamma^2]$ となる。これは

$$|S_{12}S_{22}^{-1}S_{21} - r^2S_{11}| = 0 \quad (6.12)$$

の根, すなわち, 標本正準相関係数の2乗の最大値を $r_{\max}^2 = C_{\max}(S_{12}S_{22}^{-1}S_{21}S_{11}^{-1})$ とすれば, (A.4.4) により $[r_{\max}^2 \leq r_\gamma^2]$ と書ける。棄却域は, $[r_{\max}^2 > r_\gamma^2]$ で, r_γ^2 は与えられた有意水準 ε に対して

$$\Pr\{r_{\max}^2 > r_\gamma^2 | H_0\} = \varepsilon \quad (6.13)$$

によって決められる。

6.2~6.4節でみられたように, UI-法によって棄却域を設けるととき, 対称非負行列の特有限の分布が必要である。これについては次章で取り扱う。

6.5 同時信頼区間

未知パラメーターの関数の組を $f_i(\theta)$, $i \in I = \{1, 2, \dots\}$ とし, 標本 X の関数 $\phi_{i1}(X)$, $\phi_{i2}(X)$ に対して

$$\Pr\{\phi_{i1}(X) \leq f_i(\theta) \leq \phi_{i2}(X), \quad i \in I\} = 1 - \varepsilon \quad (6.14)$$

($0 < \varepsilon < 1$) がなりたつとき, 区間の集り

$$\phi_{i1}(X) \leq f_i(\theta) \leq \phi_{i2}(X), \quad i \in I \quad (6.15)$$

を $f_i(\theta)$, $i \in I$ に対する信頼係数 $1 - \varepsilon$ の同時信頼区間という。いま X と $f_i(\theta)$ の関数 $\psi_i(X, f_i(\theta))$, $i \in I$ が存在し, i に無関係な d_1, d_2 に対して

$$d_1 \leq \psi_i(X, f_i(\theta)) \leq d_2, \quad i \in I \quad (6.16)$$

が式 (6.15) と同等であるとする。このとき任意の止めた θ に対し, $\bar{w}_{i,\theta} = \{X : d_1 \leq \psi_i(X, f_i(\theta)) \leq d_2\}$ とし, $i \in I$ についての積集合 $\bar{w}_\theta = \cap_{i \in I} \bar{w}_{i,\theta}$ を作るとき, もし \bar{w}_θ が各 θ についてボレル集合で, かつ, $\text{Pt}\{X \in \bar{w} | \theta\} = 1 - \varepsilon$, ($0 < \varepsilon < 1$) が θ に無関係に成立するならば, 式 (6.15) が $f_i(\theta)$, $i \in I$

に対する信頼係数 $1-\varepsilon$ の同時信頼区間の集りを与える。この場合には、式 (6.16) を (6.15) の形に書き直せばよいのである。

6.6 平均ベクトルの成分の一次結合に関する同時信頼区間

$N(\mu, A)$ の μ の成分のすべての一次結合に対する同時信頼区間を求める。 \mathcal{O} でないすべての実ベクトルの集合を \mathfrak{A} で表わすとき、すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する $a\mu'$ の信頼区間である。 \bar{x}, S をそれぞれ大きさ n の任意標本における平均ベクトル、不偏共分散行列とする。 $a \in \mathfrak{A}$ を止めたとき、 $ax' \sim N(a\mu', aAa')$ と 1 変量正規分布であるから、よく知られた t -分布に基づく $a\mu'$ の最短不偏性をもつ信頼区間

$$\frac{n^{1/2}|a(\bar{x}-\mu)'|}{(aSa')^{1/2}} \leq c \text{ または } \frac{na(\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)a'}{aSa'} \leq c^2 \quad (6.17)$$

がつくられる。 a を \mathfrak{A} で動かし、式 (6.17) を満たす標本空間における集合の積をつくろう。

$$\text{すべての式 (6.17)} \Leftrightarrow \sup_a \{na(\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)a'/aSa'\} \leq c^2 \quad (6.18)$$

であり、(A.4.3) により $\sup_a \{na(\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)a'/aSa'\} = n(\bar{x}-\mu)S^{-1}(\bar{x}-\mu)' \equiv T^2$ とホテリングの T^2 -統計量であるから、求める積集合は $T^2 \leq c^2$ を満たす X の集合である。いま $T^2(\varepsilon)$ を T^2 -分布の上方 $100\varepsilon\%$ 点とすれば

$$\Pr\{T^2 = \sup_a [na(\bar{x}-\mu)'(\bar{x}-\mu)a'/aSa'] \leq T^2(\varepsilon)\} = 1-\varepsilon \quad (6.19)$$

が成立する。ゆえに式 (6.18) により、 $c = T(\varepsilon)$ とおけば、すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する式 (6.17)、これを書き直して、すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する区間群

$$a\bar{x}' - [T^2(\varepsilon)aSa'/n]^{1/2} \leq a\mu' \leq a\bar{x}' + [T^2(\varepsilon)aSa'/n]^{1/2}, \quad a \in \mathfrak{A} \quad (6.20)$$

が信頼係数 $1-\varepsilon$ の $a\mu'$ 、 $a \in \mathfrak{A}$ に対する同時信頼区間を与えている。信頼係数が正確に $1-\varepsilon$ となるのはすべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する場合であり、現実には有限個の一次結合しかつくられないので実際には $\geq 1-\varepsilon$ となるであろう。しか

し実験、観測に先だって、 μ の成分のどのような一次結合を推定するか決めることができないで、データを検討してから決められる場合には便利である。

6.7 共分散行列に関する信頼区間

$N(\mu, A)$ において、すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する aAa' の同時信頼区間を考える。 $ax' \sim N(a\mu', aAa')$ であるから $(n-1)aSa'/aAa'$ は自由度 $n-1$ の χ^2 -統計量である。ゆえに

$$c_1 \leq (n-1)aSa'/aAa' \leq c_2 \quad (6.21)$$

を考えると、すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対して上の不等式が成立するためには、

$$c_1 \leq \inf_a \left\{ \frac{(n-1)aSa'}{aAa'} \right\} \leq \sup_a \left\{ \frac{(n-1)aSa'}{aAa'} \right\} \leq c_2.$$

が必要かつ十分である。(A. 4.2) によればこの不等式は、

$$\frac{c_1}{n-1} \leq C_{\min}(SA^{-1}) \leq C_{\max}(SA^{-1}) \leq \frac{c_2}{n-1}$$

と書けるから、

$$\Pr \{c_1(\varepsilon)/(n-1) \leq C_{\min}(SA^{-1}) \leq C_{\max}(SA^{-1}) \leq c_2(\varepsilon)/(n-1)\} = 1 - \varepsilon$$

$$\Pr \{c_1(\varepsilon)/(n-1) \leq C_{\min}(SA^{-1})\} = \Pr \{C_{\max}(SA^{-1}) \leq c_2(\varepsilon)/(n-1)\}$$

によって $c_1(\varepsilon)$, $c_2(\varepsilon)$ を定めれば

$$\Pr \{c_1(\varepsilon) \leq (n-1)aSa'/aAa' \leq c_2(\varepsilon) ; \forall a \in \mathfrak{A}\} = 1 - \varepsilon \quad (6.22)$$

が得られる。ゆえにすべての $a \in \mathfrak{A}$ に対する aAa' の同時信頼係数 $1 - \varepsilon$ をもつ信頼区間として

$$(n-1)c_1^{-1}(\varepsilon)aSa' \leq aAa' \leq (n-1)c_2^{-1}(\varepsilon)aSa', \quad \forall a \in \mathfrak{A} \quad (6.23)$$

を得るのである。上式の各辺を aa' で割り、 a を動かして考えれば容易に

$$(n-1)c_1^{-1}(\varepsilon)C_{\min}(S) \leq \text{ch}(A) \leq (n-1)c_2^{-1}(\varepsilon)C_{\max}(S) \quad (6.24)$$

なる A の特有根の信頼区間が得られるが、これの信頼係数はもちろん $\geq 1 - \varepsilon$ である。また $C_{\max}(A)$, $C_{\min}(A)$ に着目すれば、

$$\left. \begin{aligned} (n-1)c_1^{-1}(\varepsilon)C_{\max}(S) &\leq C_{\max}(A) \leq (n-1)c_2^{-1}(\varepsilon)C_{\max}(S) \\ (n-1)c_1^{-1}(\varepsilon)C_{\min}(S) &\leq C_{\min}(A) \leq (n-1)c_2^{-1}(\varepsilon)C_{\min}(S) \end{aligned} \right\} \quad (6.25)$$

なる信頼係数 $\geq 1 - \varepsilon$ をもつ同時信頼区間が得られる。

6・8 m 個の平均ベクトルの対比較に関する同時信頼区間

m 個の k 変量正規母集団 $N(\mu_i, A)$, $i=1, \dots, m$ の対比較として, すべての $\alpha \in \mathcal{A}$, すべての $i, j (i \neq j)$ に対して $a(\mu_i - \mu_j)'$ の信頼係数 $1-\varepsilon$ の同時信頼区間を求めよう。 $N(\mu_i, A)$ からの大きさ n_i の任意標本における平均ベクトルを \bar{x}_i とし, m 個の標本からの A の不偏推定行列を $\left(\sum_{i=1}^m n_i - m\right) S_0 = \sum_{i=1}^m \sum_{\alpha=1}^{n_i} (x_{i\alpha} - \bar{x}_i)(x_{i\alpha} - \bar{x}_i)$ とする。 $n_{ij} = n_i n_j / (n_i + n_j)$ と書き,

$$|a(\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j)'| \leq [c^2 a S_0 a' / n_{ij}]^{1/2} \quad (6 \cdot 26)$$

を考える。これは

$$n_{ij} a(\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j)'(\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j) a S_0 a' \leq c^2 \quad (6 \cdot 27)$$

と同等であり, これがすべての $\alpha \in \mathcal{A}$, すべての i, j について同時になりたつためには

$$\begin{aligned} c^2 &\geq \max_{i,j} \sup_a \{n_{ij} a(\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j)'(\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j) a S_0 a'\} \\ &= \max_{i,j} \{n_{ij} (\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j) S_0^{-1} (\bar{x}_i - \bar{x}_j - \mu_i + \mu_j)'\} \\ &= \max_{i,j} T_{ij}^2 \equiv T_{\max}^2 \end{aligned} \quad (6 \cdot 28)$$

が満たされていることが必要でかつ十分である。

そこで T_{\max}^2 の上方 $100\varepsilon\%$ 点を $T_{\max}^2(\varepsilon)$ とすれば, $\Pr\{T_{\max}^2 \leq T_{\max}^2(\varepsilon)\} = 1-\varepsilon$ である。ゆえに $c^2 = T_{\max}^2(\varepsilon)$ とすれば, 式 (6・26) がすべての $\alpha \in \mathcal{A}$, すべての i, j について同時になりたつ確率は $1-\varepsilon$ で, したがって, 求める同時信頼区間は

$$\begin{aligned} a(\bar{x}_i - \bar{x}_j)' - [T_{\max}^2(\varepsilon) a S_0 a' / n_{ij}]^{1/2} &\leq a(\mu_i - \mu_j)' \leq a(\bar{x}_i - \bar{x}_j)' \\ &\quad + [T_{\max}^2(\varepsilon) a S_0 a' / n_{ij}]^{1/2} \end{aligned} \quad (6 \cdot 29)$$

となる。 T_{\max}^2 の分布はきわめて複雑であるが, これに関しては筆者の論文 [52, 53] を参照せよ。

以上のほかにいろいろの場合に対する同時信頼区間が求められているが, これらの結果および関連文献については筆者の総合報告 [54] にまとめられて

いる。それ以後のものとして Anderson [2], Khatri [27, 28] を付け加えておく。

第7章 標本特有根の分布

7.1 二つのウィッシャート行列の場合

$V \sim W(A, k, \nu)$, $W \sim W(A, k, \mu)$ が互いに独立なとき

$$|V - rW| = 0 \quad (7.1)$$

あるいは

$$|V - t(V + W)| = 0 \quad (7.2)$$

の根 $r_1 \geq r_2 \geq \dots \geq r_k \geq 0$ あるいは $1 \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_k \geq 0$ の同時分布を求めよう。まずこれらの根が正則変換群の下で不変であることに注意すれば、最初から $A = I$ としてよい。もちろん $\nu, \mu \geq k$ とする。行列論より

$$V = TD_r T', \quad W = T T' \quad (7.3)$$

なる変換が存在し、 $r_i = r_j (i \neq j)$ となる確率は 0 であるから、もし $t_{1i} \geq 0$, $i = 1, \dots, k$ と規約すれば、式 (7.3) の変換は 1 対 1 である。非線型変換のヤコビアンを計算する例として次の定理を証明する。

[定理 7.1] 変換、式 (7.3) のヤコビアンは

$$J(V, W; T, D_r) = 2^k |T|^{k+2} \prod_{i < j}^k (r_i - r_j) \quad (7.4)$$

である。

[証明] 式 (7.3) の両辺の微分をとると

$$dV = (dT) D_r T' + T (dD_r) T' + T D_r (dT') \quad (7.5)$$

$$dW = (dT) T' + T (dT') \quad (7.6)$$

これらの左から T^{-1} , 右から T'^{-1} を掛け

$$dX = T^{-1} (dV) T'^{-1}, \quad dY = T^{-1} (dW) T'^{-1}, \quad dZ = T^{-1} (dT)$$

とおけば

$$dX = (dZ) D_r + D_r (dZ)' + dD_r, \quad dY = dZ + dZ' \quad (7.7)$$

となる。(A.5.6) により $J(V, W; T, D_r) = J(dV, dW; dT, dD_r)$ で、

これを三つの部分に分けて

$$J(dV, dW; dT, dD_r) = J(dV, dW; dX, dY) J(dX, dY; dZ, dD_r) \cdot J(dZ, dD_r; dT, dD_r)$$

として計算する。ところで

$$J(dV, dW; dX, dY) = J(dV, dX) J(dW, dY) = |T|^{2(k-1)}, \quad [\because (A.5.4)]$$

$$J(dZ, dD_r; dT, dD_r) = J(dZ; dT) = |T|^{-k}, \quad [\because (A.5.3)]$$

と求められる。 $J(dX, dY; dZ, dD_r)$ を計算するために式 (7.7) を各要素についてみると, $dx_{ii} = 2r_i dz_{ii} + dr_i$, $dx_{ij} = r_j dz_{ij} + r_i dz_{ji}$; $dy_{ii} = 2dz_{ii}$, $dy_{ij} = dz_{ij} + dz_{ji}$ であるから, ヤコービヤンは

	dr_i	dz_{ii}	$dz_{ij}(i > j)$	$dz_{ij}(i < j)$
dx_{ii}	I_k	L	O	O
dy_{ii}	O	$2I_k$	O	O
$dx_{ij}(i < j)$	O	O	P	Q
$dy_{ij}(i < j)$	O	O	$I_{k(k-1)/2}$	$I_{k(k-2)/2}$

の行列式の絶対値である。ここに $P = \text{diag}\{r_1, \dots, r_1; r_2, \dots, r_2; \dots; r_{k-1}\}$, $Q = \text{diag}\{r_2, r_3, \dots, r_k; r_3, \dots, r_k; \dots; r_k\}$ 。ゆえに $J(dX, dY; dZ, dD_r) = 2^k |P - Q| = 2^k \prod_{i < j}^k (r_i - r_j)$ となる。以上の三つの結果をまとめて式 (7.4) が得られる。

さてもとへもどって D_r の同時分布を導こう。 V, W の同時分布は

$$p(V, W) = c(k, \nu) c(k, \mu) |V|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} |W|^{\frac{1}{2}(\mu-k-1)} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{tr}(V+W)\right\} \cdot [c(k, \nu)]^{-1} = 2^{\frac{1}{2}k\nu} \pi^{\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right]$$

で、これに変換、式 (7.3) を施せば、式 (7.4) の結果を使って

$$p(\mathbf{T}, \mathbf{D}_r) = 2^k c(k, \nu) c(k, \mu) \prod_{i=1}^k r_i^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \prod_{i < j}^k (r_i - r_j) \cdot |\mathbf{T}' \mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(\mu+\nu-k)} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} (\mathbf{I} + \mathbf{D}_r) \mathbf{T}' \mathbf{T} \right\} \quad (7.8)$$

となるから、これより \mathbf{T} を積分により消去すれば \mathbf{D}_r の分布が得られる。さて t_{ij} の範囲は $0 < t_{ij} < \infty$, $-\infty < t_{ij} < \infty (i \neq 1)$ であるが、 $-\infty < t_{1j} < \infty$ とし 2^k で割っておけば積分の値に変化はないから

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^\infty \cdots \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \cdots \int_{-\infty}^\infty |\mathbf{T}' \mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu-k)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} (\mathbf{I} + \mathbf{D}_r) \mathbf{T}' \mathbf{T} \right\} d\mathbf{T} \\ &= \frac{1}{2^k} \int_{-\infty}^\infty \cdots \int_{-\infty}^\infty |\mathbf{T}' \mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu-k)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} (\mathbf{I} + \mathbf{D}_r) \mathbf{T}' \mathbf{T} \right\} d\mathbf{T} \end{aligned}$$

となる。被積分関数が $\mathbf{T}' \mathbf{T}$ の関数であることに着目してスーの [定理 3.2] を適用すれば

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2^k} \int_{U>0} \cdots \int \frac{\pi^{\frac{1}{2}k^2 - \frac{1}{4}k(k-1)}}{\prod_{i=1}^k \Gamma \left[\frac{1}{2}(k+1-i) \right]} |U|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu-k-1)} \\ &\quad \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} (\mathbf{I} + \mathbf{D}_r) U \right\} dU \\ &= \frac{1}{2^k} \frac{\pi^{\frac{1}{2}k^2 - \frac{1}{4}k(k-1)}}{\prod_{i=1}^k \Gamma \left[\frac{1}{2}(k+1-i) \right]} \frac{1}{c(k, \nu+\mu) |\mathbf{I} + \mathbf{D}_r|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu)}} \end{aligned}$$

と計算される。ゆえに式 (7.8) を \mathbf{T} で積分し常数を整理すれば

$$p(\mathbf{D}_r) = c(k, \nu, \mu) \prod_{i=1}^k r_i^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} (1+r_i)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} \prod_{i < j}^k (r_i - r_j) \quad (7.9)$$

$$c(k, \nu, \mu) = \pi^{\frac{1}{2}k} \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma \left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i) \right]}{\Gamma \left[\frac{1}{2}(\nu+1-i) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(\mu+1-i) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(k+1-i) \right]} \quad (7.10)$$

と求められる。

D_t の分布は $r_i = t_i / (1 - t_i)$, $i = 1, \dots, k$ であるから式 (7.9) から

$$p(D_t) = c(k, \nu, \mu) \prod_{i=1}^k t_i^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} (1-t_i)^{\frac{1}{2}(\mu-k-1)} \prod_{i < j}^k (t_i - t_j) \quad (7.11)$$

となる。以上をまとめて

[定理 7.2] $V \sim W(A, k, \nu)$, $W \sim W(A, k, \mu)$ で互いに独立とする。
 $(\nu \geq k, \mu \geq k)$: このとき $|V - rW| = 0$ の根 $r_1 \geq \dots \geq r_k \geq 0$ の同時密度関数は式 (7.9) で, $|V - t(V + W)| = 0$ の根 $1 \geq t_1 \geq \dots \geq t_k \geq 0$ の同時密度関数は式 (7.11) で与えられる。

7.2 一般化ベータ分布の利用

$V \sim W(I, k, \nu)$, $W \sim W(I, k, \mu)$ を互いに独立とするととき, $Z = W^{-1/2} V W^{-1/2}$ の分布は 3.8 節の一般化ベータ分布で, その密度関数は式 (3.41) により

$$p(Z) = \frac{1}{B_k\left(\frac{1}{2}\mu, \frac{1}{2}\nu\right)} \frac{|Z|^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)}}{|I+Z|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu)}} \quad (7.12)$$

$$\frac{1}{B_k\left(\frac{1}{2}\mu, \frac{1}{2}\nu\right)} = \pi^{-\frac{1}{4}k(k-1)} \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\mu+1-i)\right]} \quad (7.13)$$

である。ところで [(A.1.13)]

$$\text{ch}(Z) = \text{ch}(W^{-1/2} V W^{-1/2}) = \text{ch}(W^{-1} V) = (r_1, \dots, r_k) \quad (7.14)$$

であるから $|Z - rI| = 0$ の根 $r_1 \geq \dots \geq r_k \geq 0$ の同時密度関数は前節で求めた式 (7.9) である。式 (7.12) の Z に

$$Z = L D_r L' \quad (l_{ij} \geq 0, \quad j = 1, \dots, k) \quad (7.15)$$

なる変換を施す。ただし L は第一列が非負の要素である直交行列である。この変換の後 L で積分すれば, 変換のヤコビヤンを $J(Z; L, D_r)$ と書いて

$$p(D_r) = \frac{1}{B_k\left(\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}\mu\right)} \prod_{i=1}^k r_i^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \prod_{i=1}^k (1+r_i)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} \cdot \int \cdots \int_{\substack{LL'=I \\ l_{ij}s \geq 0}} J(Z; L, D_r) dL$$

が得られる。これは式 (7.9) と等しいはずであるから両者を比較して

$$\begin{aligned} \int \cdots \int_{\substack{LL'=I \\ l_{ij}s \geq 0}} J(Z; L, D_r) dL &= B_k\left(\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}\mu\right) \cdot c(k, \nu, \mu) \prod_{i < j}^k (r_i - r_j) \\ &= \frac{\pi^{\frac{1}{4}k(k+1)}}{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]} \prod_{i < j}^k (r_i - r_j) \quad (7.16) \end{aligned}$$

なる積分公式が得られる。

7.3 一つのウィッシュャート行列の場合

式 (7.16) の結果を使ってまず次の定理を証明する。

[定理 7.3] V を $k \times k$ の対称確率行列, その特有根を $s_1 > \cdots > s_k$ とする。もし V の密度関数が $g(s_1, \dots, s_k)$ と s_i/s だけの関数であるならば, s_1, \dots, s_k の同時密度関数は

$$\frac{\pi^{\frac{1}{4}k(k+1)}}{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]} g(s_1, \dots, s_k) \prod_{i < j}^k (s_i - s_j) \quad (7.17)$$

である。

[証明] $V = LD_s L'$ により $V \rightarrow (L, D_s)$ なる変換を行なう。 L は $l_{ij} \geq 0$, $j=1, \dots, k$ である直交行列で $D_s = \text{diag}(s_1, \dots, s_k)$ である。ゆえに $p(L, D_s) = g(s_1, \dots, s_k) J(V; L, D_s)$ となるから, 式 (7.16) を使って L について積分すれば D_s の同時密度関数, 式 (7.17) を得る。

この定理の V として $V \sim W(I, k, \nu)$ を用いれば次のようになる。

[定理 7.4] $V \sim W(I, k, \nu)$, ($\nu \geq k$) のとき, V の特有根 $s_1 \geq \cdots \geq s_k \geq 0$

の同時密度関数は

$$p(s_1, \dots, s_k) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}k}}{2^{\frac{1}{2}k\nu} \prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k s_i\right\} \prod_{i=1}^k s_i^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \prod_{i < j}^k (s_i - s_j) \quad (7.18)$$

である。

上の s_i , $i=1, \dots, k$ の同時密度より容易に

$$q = s_1 + s_2 + \dots + s_k \quad (7.19)$$

の分布を求めることができる。 q の特性関数を求めれば

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(e^{itq}) &= \frac{\pi^{\frac{1}{2}k}}{2^{\frac{1}{2}k\nu} \prod_{\alpha=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-\alpha)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]} \cdot \\ &\quad \cdot \int_{s_1 \geq \dots \geq s_k \geq 0} \dots \int \prod_{\alpha=1}^k s_{\alpha}^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \cdot \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}(1-2it) \sum_{i=1}^k s_i\right\} \prod_{i < j}^k (s_i - s_j) \cdot ds_1 \dots ds_k \\ &= (1-2it)^{-\frac{1}{2}k\nu} \end{aligned}$$

これは自由度 $k\nu$ の χ^2 -分布の特性関数である。

[定理 7.5] $V \sim W(I, k, \nu)$ の特有根を s_1, \dots, s_k とするとき, $q = s_1 + \dots + s_k$ は自由度 $k\nu$ の χ^2 -分布に従う。

7.4 異常ウィッシャート行列がある場合

7.1 節で二つのウィッシャート行列 V, W があるとき $|V - rW| = 0$ の根の分布を得た。本節では V の自由度 ν が次元数 k より小さく, V がウィッシャート分布をもたない場合を取り扱う。すなわち, $X(\nu \times k) \sim N_{\nu}(O; A)$ とし, $V = X'X$ と表わせるとき $|V - rW| = 0$ の 0 でない根 $r_1 \geq \dots \geq r_r$ の同時

密度関数を求める。7・1 節の場合と同様に、根が任意の正則変換の下で不変であるから $A=I$ としてよい。ところで、 $\text{ch}(VW^{-1})=\text{ch}(X'XW^{-1})=\text{ch}(XW^{-1}X')$ と 0 でない根は $Z=XW^{-1}X'$ の根である。この Z は 3・8 節の式 (3・43) で定義されたステューデント化されたウィッシャー行列で、その密度関数は式 (3・45) により

$$\begin{aligned} p(Z) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}\nu(\nu-1)}} \prod_{i=1}^{\nu} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-k-i)\right]} \\ &\quad \cdot \frac{|Z|^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)}}{|I+Z|^{\frac{1}{2}(\nu+\mu)}} \\ &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}\nu(\nu-1)}} \prod_{i=1}^{\nu} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-k-i)\right]} \\ &\quad \cdot \prod_{i=1}^{\nu} r_i^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)} (1+r_i)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} \end{aligned}$$

である。これは $r_i, i=1, \dots, \nu$ だけの関数であるから [定理 7・3] を適用すれば、 r_1, \dots, r_ν の同時密度関数は

$$p(r_1, \dots, r_\nu) = D(k, \nu, \mu) \prod_{i=1}^{\nu} r_i^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)} (1+r_i)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} \prod_{i < j}^{\nu} (r_i - r_j) \quad (7.20)$$

$$D(k, \nu, \mu)$$

$$= \pi^{\frac{1}{2}\nu} \prod_{i=1}^{\nu} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-k-i)\right]} \quad (7.21)$$

と求まるのである。式 (7・9) と比べてみれば、式 (7・9) の k, ν, μ をそれぞれ $\nu, k, \nu+\mu-k$ に置き替えると式 (7・20) が得られることがわかる。

$|V-t(V+W)|=0$ の根 $1 \geq t_1 \geq \dots \geq t_\nu \geq 0$ の同時密度関数は

$$p(t_1, \dots, t_\nu) = D(k, \nu, \mu) \prod_{i=1}^{\nu} t_i^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)} (1-t_i)^{\frac{1}{2}(\mu-k-1)} \prod_{i < j}^{\nu} (t_i - t_j) \quad (7.22)$$

〔定理 7.5〕 $V = X'X$, $X(\nu \times k) \sim N_\nu(\mathbf{0}; A)$, $W \sim W(A, k, \mu)$ とする。ただし $\nu \leq k$, $\mu \geq k$ である。もし V と W が独立ならば, $|V-rW|=0$ の根で 0 でないものの同時分布は式 (7.20) で, $|V-t(V+W)|=0$ の根の同時分布は式 (7.22) で与えられる。

さて $|V-rW|=0$ の根の分布において $\mu \rightarrow \infty$ としたときの漸近分布を求めてみよう。 $\nu \geq k$ の場合の式 (7.9), $\nu \leq k$ の場合の式 (7.20) のいずれに付いても全く同様にできるので, 式 (7.20) を取り扱う。 $\mu r_i = s_i$, $i=1, \dots, \nu$ とし $s_1 \geq \dots \geq s_\nu$ の同時密度関数を考えれば,

$$p_\mu(s_1, \dots, s_\nu) = \frac{D(k, \nu, \mu)}{\mu^{\frac{1}{2}k\nu}} \prod_{i=1}^{\nu} s_i^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)} \left(1 + \frac{s_i}{\mu}\right)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} \prod_{i < j}^{\nu} (s_i - s_j)$$

となる。ここで $\mu \rightarrow \infty$ とすれば, ガンマ関数に対するスターリングの公式を用いて

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{s_i}{\mu}\right)^{-\frac{1}{2}(\nu+\mu)} = e^{-\frac{1}{2}s_i},$$

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \frac{D(k, \nu, \mu)}{\mu^{\frac{1}{2}k\nu}} = \frac{\pi^{\frac{1}{2}\nu}}{2^{\frac{1}{2}k\nu} \prod_{i=1}^{\nu} \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]}$$

が容易に示されるから

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} p_\mu(s_1, \dots, s_\nu) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}\nu}}{2^{\frac{1}{2}k\nu} \prod_{i=1}^{\nu} \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(k+1-i)\right]} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\nu} s_i\right\} \prod_{i=1}^{\nu} s_i^{\frac{1}{2}(k-\nu-1)} \prod_{i < j}^{\nu} (s_i - s_j) \quad (7.23)$$

となる。式 (7・9) の場合には、上の式で k と ν を入れ替えたものである。

7・5 標本正準相関係数の2乗の分布

4・8 節で $\mathbf{x}_1(1 \times k_1)$, $\mathbf{x}_2(1 \times k_2)$, ($k_1 \leq k_2$) の間の標本正準相関係数の2乗は、積和行列 $(n-1)\mathbf{S} = \mathbf{V}$ の分割を用いて

$$|\mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21} - r^2 \mathbf{V}_{11}| = 0 \quad (7 \cdot 24)$$

の根 $r_1^2 \geq \dots \geq r_{k_1}^2$ であった。いま

$$\mathbf{U} = \mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21}, \quad \mathbf{V}_{11 \cdot 2} = \mathbf{V}_{11} - \mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1} \mathbf{V}_{21} \quad (7 \cdot 25)$$

とおけば、式 (7・24) は

$$|\mathbf{U} - r^2(\mathbf{U} + \mathbf{V}_{11 \cdot 2})| = 0 \quad (7 \cdot 26)$$

と書ける。[定理 3・8] によれば、 \mathbf{U} と $\mathbf{V}_{11 \cdot 2}$ は統計的に独立であり、かつ $\mathbf{V}_{11 \cdot 2} \sim W(\mathbf{A}_{11 \cdot 2} = \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}, k_1, \nu - k_2)$, $\nu = n - 1$ である。

さて母集団正準相関係数が全部 0, 換言すれば、 $\mathbf{A}_{12} = \mathbf{O}$ なるときの $r_1^2 \geq \dots \geq r_{k_1}^2$ の同時分布を求めよう。この場合には $\mathbf{V}_{11 \cdot 2} \sim W(\mathbf{A}_{11}, k_1, \nu - k_2)$ である。一方 \mathbf{U} の分布は [定理 3・8] を導いたときの議論から容易に得られる。すなわち、式 (3・30) から、 $\mathbf{A}_{12} = \mathbf{O}$ であれば、 $\mathbf{Z} = \mathbf{V}_{11 \cdot 2}$, $\mathbf{L} = \mathbf{V}_{12} \mathbf{V}_{22}^{-1/2}$, \mathbf{V}_{22} は互いに独立で $\mathbf{L}' \sim N_{k_2}(\mathbf{O}; \mathbf{A}_{11})$ であることがわかる。ところが $\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{L}'$ でかつ $k_1 \leq k_2$ であることに注意すれば、 $\mathbf{U} \sim W(\mathbf{A}_{11}, k_1, k_2)$ が得られるのである。これらの結果から $\mathbf{A}_{12} = \mathbf{O}$ のときの $r_1^2 \geq \dots \geq r_{k_1}^2$ の同時分布を求める問題は式 (7・2) を取り扱ったものと同じである。ゆえに [定理 7・2] により

$$\begin{aligned} p(r_1^2, \dots, r_{k_1}^2) &= c(k_1, k_2, \nu - k_2) \prod_{i=1}^{k_1} (r_i^2)^{\frac{1}{2}(k_2 - k_1 - 1)} \\ &\quad \cdot (1 - r_i^2)^{\frac{1}{2}(\nu - k_2 - k_1 - 1)} \prod_{i < j}^{k_1} (r_i^2 - r_j^2) \quad (7 \cdot 27) \end{aligned}$$

と求められる。ただし $c(k_1, k_2, \nu - k_2)$ は式 (7・10) と同様の常数である。

特別の場合として $k_1 = 1$, $k_2 = k - 1$ とすれば

$$p(r_1^2) = \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}\nu\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(k-1)\right]\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-k)\right]} (r_1^2)^{\frac{1}{2}(k-3)} (1-r_1^2)^{\frac{1}{2}(\nu-k-1)} \quad (7.28)$$

となり、これは重相関係数の2乗の分布、式(4.40)である。

7.6 最大根の分布に関する数表

前章で取り扱ったユニオン・インターセクション法による検定方式、同時信頼限界をつくる時、ウィッシャート行列に関する特有根の最大値、最小値の%点が必要であった。これらは本章で得た根の同時密度関数から最大根、最小根の周辺分布を出して計算する必要があるけれども、実際には積分がやっかいで簡単にはゆかない。そのために実用に便を与えるべく自動計算機により求められた数表、図表がいくつか用意されている。

これらは $|V - t(V+W)| = 0$ の根について求められているので、 $|V - rW| = 0$ の根に対しては $r = t/(1-t)$ の関係を使って計算される。また $t_i, i = 1, \dots, k$ の最小根は $\theta_i = 1 - t_i, i = 1, \dots, k$ の最大根であるから、結局、数表、図表としては最大根に対してつくられている。Pillai [37] は最大根 t_{\max} の上方%点を得るための近似公式を $k=2(1)5$ に対して求めるとともに、上方5%, 1%点の表をつくっている [38]。さらに彼と Bantegui [40] は $k=6$ のときの結果を出している。Foster & Rees [11], Foster [12, 13] は $k=2, 3, 4$ のときの t_{\max} の上方1%, 5%, 10%, 15%, 20%点のかなり詳しい表を与えた。また Heck [16] は $k=2(1)5$ に対して1%, 2.5%, 5%点の図表を与えている。

本章で取り扱った特有根の分布は、等共分散行列とか $A=I$ とか独立性とかいった仮定のもとに導かれたものであるが、一般的な場合は、その取り扱いがはなはだ複雑である。これに関しては James [24], Tsumura [57] を参照せよ。

第8章 正規回帰論——共分散行列分析——

8.1 回帰係数行列の推定

確率ベクトル $\mathbf{x}_\alpha (1 \times k)$, $(\alpha=1, \dots, n)$ の共分散行列が $\mathbf{A} (k \times k)$, その平均が $\mathcal{E}(\mathbf{x}_\alpha) = \mathbf{z}_\alpha \mathbf{B}$ であるとする。ここに $\mathbf{z}_\alpha (1 \times l)$ は既知ベクトル, $\mathbf{B} (l \times k)$ は未知パラメーターの行列である。 $\mathbf{X}' (k \times n) = (\mathbf{x}_1', \dots, \mathbf{x}_n')$, $\mathbf{Z}' (l \times n) = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n')$ とおけば

$$\mathcal{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{ZB} \quad (8.1)$$

と書くことができる。いま $n \geq k+l$, \mathbf{Z} の階数を l とし, 2.1 節, 4.2 節の意味で \mathbf{B} の最小共分散行列法による推定を考えよう。すなわち $(\mathbf{X} - \mathbf{ZB})'(\mathbf{X} - \mathbf{ZB})$ を最小にする \mathbf{B} を求める。これはよく知られている最小 2 乗法の変数の場合への拡張の一つである。[定理 2.3] の証明を利用すれば

$$\begin{aligned} (\mathbf{X} - \mathbf{ZB})'(\mathbf{X} - \mathbf{ZB}) &= \{(\mathbf{X}'\mathbf{X}) - (\mathbf{X}'\mathbf{Z})(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{X})\} \\ &\quad + \{\mathbf{B} - (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{X})\}'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\{\mathbf{B} - (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{X})\} \end{aligned} \quad (8.2)$$

と書け, $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ が正則だから右辺の各項は非負行列である。ゆえに \mathbf{B} の最小共分散行列推定量は

$$\hat{\mathbf{B}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{X}) \quad (8.3)$$

であり, このときの最小共分散行列は残差共分散行列

$$n\hat{\mathbf{A}} = (\mathbf{X} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{B}})'(\mathbf{X} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{B}}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X}) - (\mathbf{X}'\mathbf{Z})(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{X}) \quad (8.4)$$

である。しかし $\hat{\mathbf{B}}$ を発見的に求めるには, 任意の \mathbf{a} に対する二次形式 $\mathbf{a}(\mathbf{X} - \mathbf{ZB})'(\mathbf{X} - \mathbf{ZB})\mathbf{a}'$ を考え, これを最小にする \mathbf{B} を求めるために β_{ij} ($i=1, \dots, l; j=1, \dots, k$) について微分して 0 とおくことが必要である。この演算を実際に行なってまとめれば容易に

$$\mathbf{Z}'(\mathbf{X} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{B}}) = \mathbf{0}$$

が得られ, したがって式 (8.3) となる。

もし母集団が正規型; $\mathbf{x}_\alpha \sim N(\mathbf{z}_\alpha \mathbf{B}, \mathbf{A})$ であれば, 上の $\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{A}}$ はまた \mathbf{B}, \mathbf{A} の最大尤度推定量でもある。尤度関数はその対数をとって

$$\begin{aligned} \log L(\mathbf{B}, \mathbf{A}) &= -\frac{1}{2} kn \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log |\mathbf{A}| \\ &\quad - \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{X}' \mathbf{X} - \mathbf{X}' \mathbf{Z} \mathbf{B} - \mathbf{B}' \mathbf{Z}' \mathbf{X} + \mathbf{B}' \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \mathbf{B}) \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} \frac{\partial \log L(\mathbf{B}, \mathbf{A})}{\partial \beta_{ij}} &= \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}^{-1} \left(2 \frac{\partial \mathbf{B}'}{\partial \beta_{ij}} \mathbf{Z}' \mathbf{X} - 2 \frac{\partial \mathbf{B}'}{\partial \beta_{ij}} \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \mathbf{B} \right) \\ &= \text{tr} \left\{ \frac{\partial \mathbf{B}'}{\partial \beta_{ij}} (\mathbf{Z}' \mathbf{X} - \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \mathbf{B}) \mathbf{A}^{-1} \right\} \\ &= [(\mathbf{Z}' \mathbf{X} - \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \mathbf{B}) \mathbf{A}^{-1}]_{ji} \end{aligned}$$

となる。ゆえに行列の形にまとめて

$$(\mathbf{Z}' \mathbf{X} - \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \hat{\mathbf{B}}) \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{O} \quad \text{すなわち} \quad \mathbf{Z}' \mathbf{X} - \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \hat{\mathbf{B}} = \mathbf{O}$$

と計算され式 (8.3) が得られる。 \mathbf{A} の最大尤度推定は [定理 4.2] により式 (8.4) であることが容易に認められる。

8.2 $\hat{\mathbf{B}}$ と $\hat{\mathbf{A}}$ の標本分布

\mathbf{Z} が既知ベクトルで, したがって $\hat{\mathbf{B}}$ は \mathbf{X} について一次であるから, 正規母集団のとき, [定理 1.7] により, $\hat{\mathbf{B}}$ の分布は正規である。その平均は

$$\mathcal{E}(\hat{\mathbf{B}}) = (\mathbf{Z}' \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}' \mathcal{E}(\mathbf{X}) = (\mathbf{Z}' \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}' \mathbf{Z} \mathbf{B} = \mathbf{B} \quad (8.5)$$

で, $\hat{\mathbf{B}}$ の二つの列 $\hat{\beta}_i$ と $\hat{\beta}_j$ の間の共分散行列は容易に

$$\mathcal{E}(\hat{\beta}_i - \beta_i)(\hat{\beta}_j - \beta_j)' = \lambda_{ij} (\mathbf{Z}' \mathbf{Z})^{-1} \quad (8.6)$$

と計算される。

[定理 8.1] $\mathbf{x}_\alpha \sim N(\mathbf{z}_\alpha \mathbf{B}, \mathbf{A}), \alpha = 1, \dots, n$, すなわち $\mathbf{X} \sim N_n(\mathbf{Z} \mathbf{B}; \mathbf{A})$ のとき, 行ベクトル $(\hat{\beta}_1', \dots, \hat{\beta}_k')$ は平均 $(\beta_1', \dots, \beta_k')$, 共分散行列 $\mathbf{A} \times (\mathbf{Z}' \mathbf{Z})^{-1}$ をもつ kl 変量正規分布に従う。

次に $\hat{\mathbf{A}}$ の分布についてみよう。まず

$$n\hat{A} = (X - ZB)' \{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\} (X - ZB)$$

$$(\hat{B} - B)'(Z'Z)(\hat{B} - B) = (X - ZB)'Z(Z'Z)^{-1}Z'(X - ZB)$$

と表わせることを確かめられたい。 $X \sim N_n(ZB; A)$ に対して $Y = (X - ZB)A^{-1/2}$ なる変換を施せば、 $Y \sim N_n(O; I_k)$ となり、 $Y'Y \sim W(I_k, k, n)$ が得られる。ところで、上の関係を使えば

$$\begin{aligned} Y'Y &= A^{-1/2}(X - ZB)'(X - ZB)A^{-1/2} \\ &= A^{-1/2}\{(\hat{B} - B)'(Z'Z)(\hat{B} - B) + (X - Z\hat{B})'(X - Z\hat{B})\}A^{-1/2} \\ &= Y'\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\}Y + Y'\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\}Y \quad (8.7) \end{aligned}$$

と書くことができる。そして

$$\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\}^2 = Z(Z'Z)^{-1}Z',$$

$$\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\}^2 = I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'$$

であるから、 $Z(Z'Z)^{-1}Z'$ と $\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\}$ は冪等行列であり、したがってその階数は跡(トレース)をとれば得られる。すなわち

$$\begin{aligned} r\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\} &= \text{tr}\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\} \\ &= \text{tr}\{(Z'Z)^{-1}(Z'Z)\} = \text{tr}I_l = l, \\ r\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\} &= \text{tr}\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\} \\ &= \text{tr}I_n - \text{tr}\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\} = n - l \end{aligned}$$

である。ゆえに式(8.7)に対してコ克兰の[定理 3.13]を適用することができ、 $n - l \geq k$ に注意して

$$nA^{-1/2}\hat{A}A^{-1/2} = Y'\{I_n - Z(Z'Z)^{-1}Z'\}Y \sim W(I, k, n - l) \quad (8.8)$$

でかつ $A^{-1/2}(\hat{B} - B)'(Z'Z)(\hat{B} - B)A^{-1/2} = Y'\{Z(Z'Z)^{-1}Z'\}Y$ とは独立に分布することがわかる。さらに $A^{-1/2}(\hat{B} - B)'(Z'Z)(\hat{B} - B)A^{-1/2} = U'U$ と \hat{A} とは独立な $U \sim N_l(O; I_k)$ で表わして、したがって適当な直交行列 $A(l \times l)$ を用いて $(Z'Z)^{1/2}(\hat{B} - B)A^{-1/2} = AU$ と書けるから、 \hat{B} は \hat{A} と独立である。[定理 3.3] に注意して以上をまとめると次の定理が得られる。

[定理 8.2] $X \sim N_n(ZB; A)$ のとき、 $n\hat{A}$ は \hat{B} とは独立に $W(A, k, n - l)$ に従って分布する。

8.3 回帰係数行列に関する仮説検定

$\mathbf{X}(n \times k) \sim N_n(\mathbf{Z}(n \times l)\mathbf{B}(l \times k); \mathbf{A})$ において, 回帰係数行列 \mathbf{B} の分割:
 $\mathbf{B}' = (\mathbf{B}_1', \mathbf{B}_2')$, $\mathbf{B}_1: l_1 \times k$, $\mathbf{B}_2: l_2 \times k$, $l = l_1 + l_2$ を考え, 仮説

$$H_0: \mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_1^* \quad (8.9)$$

の尤度比検定を考えよう。8.1 節の結果を用いれば

$$L_{\Omega} \equiv \max_{\mathbf{B}, \mathbf{A}} L(\mathbf{B}, \mathbf{A}) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}kn} \frac{1}{n^{\frac{1}{2}kn}} |(X - Z\hat{\mathbf{B}})'(X - Z\hat{\mathbf{B}})|^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2}kn} \quad (8.10)$$

であり, 一方仮説 H_0 の下での最大尤度は, 次のように計算される。 $\mathbf{Z} = (\mathbf{Z}_1$
 $(n \times l_1), \mathbf{Z}_2(n \times l_2))$ と分割し, $\mathbf{Y} = \mathbf{X} - \mathbf{Z}_1\mathbf{B}_1^*$ とすれば, H_0 の下での尤度
 関数は

$$L(\mathbf{B}_2, \mathbf{A}) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}kn} |\mathbf{A}|^{-\frac{1}{2}n} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\mathbf{B}_2)' (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\mathbf{B}_2) \right\}$$

であるから, 最大尤度を与える \mathbf{B}_2 と \mathbf{A} の推定量は前と同様に

$$\hat{\mathbf{B}}_2 = (\mathbf{Z}_2' \mathbf{Z}_2)^{-1} \mathbf{Z}_2' \mathbf{Y}, \quad n\hat{\mathbf{A}} = (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2) \quad (8.11)$$

と求められる。ゆえに

$$L_{\omega} \equiv \max_{\mathbf{B}_2, \mathbf{A}} L(\mathbf{B}_2, \mathbf{A}) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}kn} \frac{1}{n^{\frac{1}{2}kn}} \cdot |(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)|^{-\frac{1}{2}n} e^{-\frac{1}{2}kn} \quad (8.12)$$

こうして H_0 に対する尤度比検定規準の $2/n$ 乗として

$$w = \left(\frac{L_{\omega}}{L_{\Omega}} \right)^{2/n} = \frac{|(X - Z\hat{\mathbf{B}})'(X - Z\hat{\mathbf{B}})|}{|(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)|} \quad (8.13)$$

が得られる。ところで

$$\begin{aligned} (X - Z\hat{\mathbf{B}})'(X - Z\hat{\mathbf{B}}) &= (X - \mathbf{Z}_1\mathbf{B}_1^* - \mathbf{Z}_2\mathbf{B}_2)' \\ &\quad (\mathbf{I}_n - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}') (X - \mathbf{Z}_1\mathbf{B}_1^* - \mathbf{Z}_2\mathbf{B}_2) \quad (8.14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2) &= (X - \mathbf{Z}_1\mathbf{B}_1^* - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2)' (X - \mathbf{Z}_1\mathbf{B}_1^* - \mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{B}}_2) \\ &= \{ (X - Z\hat{\mathbf{B}}) + \mathbf{Z}_1(\hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{B}_1^*) + \mathbf{Z}_2(\hat{\mathbf{B}}_2 - \hat{\mathbf{B}}_2) \}' \cdot \\ &\quad \cdot \{ (X - Z\hat{\mathbf{B}}) + \mathbf{Z}_1(\hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{B}_1^*) + \mathbf{Z}_2(\hat{\mathbf{B}}_2 - \hat{\mathbf{B}}_2) \} \end{aligned}$$

$$= (X - Z\hat{B})'(X - Z\hat{B}) + \{Z_1(\hat{B}_1 - B_1^*) + Z_2(\hat{B}_2 - \hat{B}_2^*)\}' \{Z_1(\hat{B}_1 - B_1^*) + Z_2(\hat{B}_2 - \hat{B}_2^*)\}$$

さらに, $\hat{B} = (Z'Z)^{-1}(Z'X)$ より $(Z'Z)\hat{B} = Z'X$, したがって $Z_2'X = (Z_2'Z_1)\hat{B}_1 + (Z_2'Z_2)\hat{B}_2$ で $\hat{B}_2 = \{(Z_2'Z_2)^{-1}\{(Z_2'X) - (Z_2'Z_1)\hat{B}_1\}$ と書けるから

$$\begin{aligned}\hat{B}_2 - \hat{B}_2^* &= (Z_2'Z_2)^{-1}\{(Z_2'X) - (Z_2'Z_1)\hat{B}_1\} \\ &\quad - (Z_2'Z_2)^{-1}\{(Z_2'X) - (Z_2'Z_1)B_1^*\} \\ &= -(Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)(\hat{B}_1 - B_1^*)\end{aligned}$$

ゆえに

$$\begin{aligned}\{Z_1(\hat{B}_1 - B_1^*) + Z_2(\hat{B}_2 - \hat{B}_2^*)\}' \{Z_1(\hat{B}_1 - B_1^*) + Z_2(\hat{B}_2 - \hat{B}_2^*)\} \\ = (\hat{B}_1 - B_1^*)' \{Z_1 - Z_2(Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)\}' \cdot \\ \cdot \{Z_1 - Z_2(Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)\} (\hat{B}_1 - B_1^*) \\ = (\hat{B}_1 - B_1^*)' \{(Z_1'Z_1) - (Z_1'Z_2)(Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)\} \cdot \\ \cdot (\hat{B}_1 - B_1^*)\end{aligned}$$

となるから

$$\begin{aligned}(Y - Z_2\hat{B}_2)'(Y - Z_2\hat{B}_2) &= (X - Z\hat{B})'(X - Z\hat{B}) \\ &\quad + (\hat{B}_1 - B_1^*)' \{(Z_1'Z_1) - (Z_1'Z_2) \cdot \\ &\quad \cdot (Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)\} (\hat{B}_1 - B_1^*)\end{aligned} \quad (8.15)$$

が得られる。

さて以上の準備をもとに検定統計量 w の分布を考えよう。まず前節の[定理 8.2]により $V = n\hat{A} = (X - Z\hat{B})'(X - Z\hat{B})$ の分布は $W(A, k, n-l)$ で \hat{B} と独立, したがって, 式 (8.15) の第2項

$$W = (\hat{B}_1 - B_1^*)' A_{11.2} (\hat{B}_1 - B_1^*)$$

と独立である。ただし, $A_{11.2} \equiv (Z_1'Z_1) - (Z_1'Z_2)(Z_2'Z_2)^{-1}(Z_2'Z_1)$ 。ところで仮説 H_0 の下で W は

$$W = U_1' U_1$$

と $U_1(l_1 \times k) \sim N_{l_1}(O; A)$ によって表わされることが容易に示される。まず [定理 8.1]により \hat{B} は kl 変量正規分布に従い, \hat{B}_1 は \hat{B} の部分行列である

から、 $\hat{\mathbf{B}}_1$ はやはり正規であることに注意する。 $\mathbf{U}_1 = \mathbf{A}_{11,2}^{1/2}(\hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{B}_1^*)$ とすれば、明らかに $\mathbf{W} = \mathbf{U}_1' \mathbf{U}_1$ 、 \mathbf{U}_1 の分布は kl_1 変量正規分布で、その平均は $\mathcal{E}(\mathbf{U}_1) = \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \mathcal{E}(\hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{B}_1^*) = \mathbf{O}$ である。 \mathbf{U}_1 、 $\hat{\mathbf{B}}_1$ の第 i 列をそれぞれ \mathbf{u}_{1i} 、 $\hat{\beta}_{1i}$ とするとき

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\mathbf{u}_{1i} \mathbf{u}_{1j}') &= \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \mathcal{E}(\hat{\beta}_{1i} - \beta_{1i}^*)(\hat{\beta}_{1j} - \beta_{1j}^*)' \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \\ &= \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \{\lambda_{ij}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} \text{ の左上隅の } l_1 \times l_1 \text{ 行列} \} \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \\ &= \lambda_{ij} \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} \mathbf{A}_{11,2}^{-1} \mathbf{A}_{11,2}^{1/2} = \lambda_{ij} \mathbf{I}_{l_1}\end{aligned}$$

と計算され、したがって $\mathbf{U}_1 \sim N_{l_1}(\mathbf{O}; \mathbf{A})$ がいえるのである。

以上をまとめると w は次の形に書かれる。

$$w = \frac{|\mathbf{V}|}{|\mathbf{V} + \mathbf{W}|} = \frac{1}{|\mathbf{I}_k + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{W}|} = \frac{1}{|\mathbf{I}_k + \mathbf{V}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{V}^{-1/2}|} \quad (8.16)$$

ここに $\mathbf{V} \sim W(\mathbf{A}, k, n-l)$ 、 $\mathbf{W} = \mathbf{U}_1' \mathbf{U}_1$ 、 $\mathbf{U}_1 \sim N_{l_1}(\mathbf{O}; \mathbf{A})$ (H_0 の下で) である。さらに l_1 と k の大きさにより次の二つの場合に分ける。

(i) $l_1 \geq k$ の場合：このときには $\mathbf{W} \sim W(\mathbf{A}, k, l_1)$ であるから、

$\mathbf{F} = \mathbf{V}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{V}^{-1/2}$ とおけば、これは第3・8節の一般化ベータ分布をもつ行列で

$$w = \frac{1}{|\mathbf{I}_k + \mathbf{F}|} \quad (8.17)$$

と書ける。

(ii) $l_1 < k$ の場合：このときには

$$\begin{aligned}w &= \frac{1}{|\mathbf{I}_k + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{W}|} = \frac{1}{|\mathbf{I}_k + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{U}_1' \mathbf{U}_1|} = \frac{1}{|\mathbf{I}_{l_1} + \mathbf{U}_1 \mathbf{V}^{-1} \mathbf{U}_1'|} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{I}_{l_1} + \mathbf{T}|}\end{aligned} \quad (8.18)$$

と書ける。ここに $\mathbf{T} = \mathbf{U}_1 \mathbf{V}^{-1} \mathbf{U}_1'$ はステューデント化されたウィッシュャート行列、式(3・43)である。

上の w は $\mathbf{A}^{-1/2} \mathbf{V} \mathbf{A}^{-1/2}$ 、 $\mathbf{A}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{A}^{-1/2}$ と変換しても不変で、一般性を失うことなく $\mathbf{A} = \mathbf{I}_k$ としてよいから、 \mathbf{F} 、 \mathbf{T} の分布はそれぞれ式(3・41)、(3・45)である。これを利用すれば仮設 H_0 の下における w の積率を容易に求めるこ

とができる。

(i) $l_1 \geq k$ の場合には

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(w^h) &= \frac{1}{B_k \left[\frac{1}{2}(n-l), \frac{1}{2}l_1 \right]} \int_{\mathbf{F} > 0} \cdots \int \frac{1}{|\mathbf{I} + \mathbf{F}|^h} \frac{|\mathbf{F}|^{\frac{1}{2}(l_1-k-1)}}{|\mathbf{I} + \mathbf{F}|^{\frac{1}{2}(n-l_2)}} d\mathbf{F} \\
 &= \frac{B_k \left[\frac{1}{2}(n-l) + h, \frac{1}{2}l_1 \right]}{B_k \left[\frac{1}{2}(n-l), \frac{1}{2}l_1 \right]} \\
 &= \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l+1-i) + h \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i) \right]}{\Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l+1-i) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i) + h \right]} \quad (8.19)
 \end{aligned}$$

(ii) $l_1 < k$ の場合には

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(w^h) &= C(n, l_1, l_2) \int_{\mathbf{T} > 0} \cdots \int \frac{1}{|\mathbf{I} + \mathbf{T}|^h} \frac{|\mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(k-l_1-1)}}{|\mathbf{I} + \mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(n-l_2)}} d\mathbf{T} \\
 &= \frac{C(n, l_1, l_2)}{C(n+2h, l_1, l_2)} \cdot C(n+2h, l_1, l_2) \int_{\mathbf{T} > 0} \cdots \int \frac{|\mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(k-l_1-1)}}{|\mathbf{I} + \mathbf{T}|^{\frac{1}{2}(n+2h-l_2)}} d\mathbf{T} \\
 &= \frac{C(n, l_1, l_2)}{C(n+2h, l_1, l_2)}
 \end{aligned}$$

となる。ここに式 (3.45) より

$$C(n, l_1, l_2) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}l_1(l_1-1)}} \prod_{i=1}^{l_1} \frac{\Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i) \right]}{\Gamma \left[\frac{1}{2}(k+1-i) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-k-i) \right]}$$

であるから、これを代入して計算すると

$$\mathcal{E}(w^h) = \prod_{i=1}^{l_1} \frac{\Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i) \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i) + h \right]}{\Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i) + h \right] \Gamma \left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i) \right]} \quad (8.20)$$

が得られる。

(i), (ii) に対する積率, 式 (8.19), (8.20) は, 表現としてどちらか一方に統一することができる。すなわち式 (8.19) は (8.20) の形に, 式 (8.20) は (8.19) の形に導くことができる。たとえば (i) の $l_1 \geq k$ の場合を考えれば, 式 (8.19) は

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(w^h) &= \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)+h\right]} \left\{ \prod_{i=1}^{l_1-k} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)+h\right]} \right. \\
 &\quad \cdot \left. \prod_{i=1}^{l_1-k} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)\right]} \right\} \frac{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l+1-i)+h\right]}{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l+1-i)\right]} \\
 &= \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)+h\right]} \prod_{i=k+1}^{l_1} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)+h\right]} \\
 &\quad \cdot \prod_{i=1}^{l_1-k} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)\right]} \\
 &\quad \cdot \prod_{i=l_1-k+1}^{l_1} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)\right]} \\
 &= \prod_{i=1}^{l_1} \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-i)+h\right]} \cdot \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2-k+1-i)\right]}
 \end{aligned}$$

と式 (8.20) の形になる。 w の分布はこれらの積率によって決まるから次の定理が得られる。

[定理 8.3] 式 (8.13) の尤度比検定標準の $2/n$ 乗を $w_{k, l_1, n-l_1-l_2}$ と書けば, 仮説 H_0 が正しいときの $w_{k, l_1, n-l_1-l_2}$ の分布は, k と l_1 を交換した

$w_{l_1, k, n-k-l_2}$ の分布と同じである。

この結果により $l_1 \geq k$ として議論を進めよう。[定理 5・3], [定理 5・6] の場合と同様に, w を互いに独立なベータ変数の積として表わすことができる。

[定理 8・4] $n-l=\nu$, $l_1=\mu$ と表わすとき, $w_{k, \mu, \nu}$ の分布は $\prod_{i=1}^k z_i$ の分布と同じである。ここに $z_i (i=1, \dots, k)$ は互いに独立で, ベータ分布 $\beta(z_i; \frac{1}{2}(\nu+1-i), \frac{1}{2}\mu)$ に従う確率変数である。

[証明]

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w^h) &= \prod_{i=1}^k \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i)\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1-i)+h\right]} \\ &= \prod_{i=1}^k \frac{1}{B\left[\frac{1}{2}(\nu+1-i), \frac{1}{2}\mu\right]} \int_0^1 x^{\frac{1}{2}(\nu+1-i)+h-1} (1-x)^{\frac{1}{2}\mu-1} dx \\ &= \prod_{i=1}^k \mathcal{E}(z_i^h) = \mathcal{E}\left\{\left(\prod_{i=1}^k z_i\right)^h\right\} \end{aligned}$$

から直ちにわかることである。

[定理 8・5] $k=2m$ のとき, $w_{2m, \mu, \nu}$ は $\prod_{i=1}^m y_i^2$ と同じ分布に従う。ここに y_i は互いに独立で, ベータ分布 $\beta(y_i; \nu+1-2i, \mu)$ をもつ。また $k=2m+1$ のときには, $w_{2m+1, \mu, \nu}$ の分布は $\prod_{i=1}^m z_i^2 \cdot z_{m+1}$ の分布と同じである。 $z_i, i=1, \dots, m+1$ は互いに独立で, z_i の密度関数は $\beta(z_i; \nu+1-2i, \mu)$, z_{m+1} の密度関数は $\beta(z_{m+1}; \frac{1}{2}(\nu+1-k), \frac{1}{2}\mu)$ である。

[証明] $k=2m$ のときは w の積率において二つずつ因子を組み合わせ

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(w^h) &= \prod_{i=1}^m \left\{ \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+2)-i+h\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1)-i+h\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+2)-i\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1)-i\right]} \cdot \right. \\ &\quad \left. \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+2)-i\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1)-i\right]}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+2)-i+h\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+\mu+1)-i+h\right]} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{i=1}^m \left\{ \frac{\Gamma[\nu+1-2i+2h]\Gamma[\nu+\mu+1-2i]}{\Gamma[\nu+1-2i]\Gamma[\nu+\mu+1-2i+2h]} \right\} \\
&= \prod_{i=1}^m \frac{1}{B(\nu+1-2i, \mu)} \int_0^1 x^{(\nu+1-2i)+2h-1} (1-x)^{\mu-1} dx \\
&= \prod_{i=1}^m \mathcal{E}(y_i^{2h}) = \mathcal{E}\left(\prod_{i=1}^m y_i^2\right)^h
\end{aligned}$$

が導かれるから定理の前半が得られる。後半はいまの証明と前定理の証明を合わせて考えれば明らかであろう。

8.4 特別な場合における w の分布

前節の [定理 8.3~8.5] によって、特別な場合における w の分布を具体的に求めることができる。次に二、三結果を述べておく。

- (i) $k=1: (\nu/\mu)(1-w_{1,\mu,\nu})/w_{1,\mu,\nu}$ は自由度 (μ, ν) の F -分布に従い、
 $[(\nu+1-\mu)/\mu](1-w_{\mu,1,\nu})/w_{\mu,1,\nu}$ は自由度 $(\mu, \nu+1-\mu)$ の F -分布に従う。
- (ii) $k=2: [(\nu-1)/\mu](1-\sqrt{w_{2,\mu,\nu}})/\sqrt{w_{2,\mu,\nu}}$ の分布は、自由度 $(2\mu, 2(\nu-1))$ の F -分布、 $[(\nu+1-\mu)/\mu](1-\sqrt{w_{\mu,2,\nu}})/\sqrt{w_{\mu,2,\nu}}$ の分布は、自由度 $(2\mu, 2(\nu+1-\mu))$ の F -分布である。

(iii) $k=3:$

$$\begin{aligned}
\Pr\{w_{3,3,\nu} \leq x\} &= I_x\left(\frac{1}{2}\nu-1, \frac{3}{2}\right) \\
&+ \frac{\Gamma(\nu+2)\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu+1)\right]}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu-1)\Gamma\left[\frac{1}{2}(\nu-1)\right]} \left\{ \frac{2x^{\frac{1}{2}\nu-1}\sqrt{1-x}}{\nu(\nu-1)} \right. \\
&+ \frac{x^{\frac{1}{2}(\nu-1)}}{\nu-1} \left[\arcsin(2x-1) - \frac{1}{2}\pi \right] \\
&\left. + \frac{2x^{\frac{1}{2}\nu}}{\nu} \log\left(\frac{1+\sqrt{1-x}}{\sqrt{x}}\right) + \frac{2x^{\frac{1}{2}\nu-1}(1-x)^{\frac{3}{2}}}{3(\nu+1)} \right\}
\end{aligned} \tag{8.21}$$

$$\Pr\{w_{3,4}, \nu \leq x\} = \frac{(\nu+2)(\nu+1)\nu^2(\nu-1)(\nu-2)}{48} x^{\frac{1}{2}(\nu-2)} \cdot \left\{ \frac{1}{\nu-2} - \frac{8\sqrt{x}}{\nu-1} + \frac{12}{\nu^2}x - \frac{6}{\nu}x \log x + \frac{8}{\nu+1}x^{\frac{3}{2}} - \frac{1}{\nu+2}x^2 \right\} \quad (8.22)$$

8.5 回帰係数行列に関する尤度比検定規準の漸近分布

式 (8.13) の積率 (8.19) より尤度比 $\lambda = w^{n/2}$ の積率は

$$\mathcal{E}(\lambda^h) = \mathcal{E}(w^{nh/2}) = C \frac{\prod_{i=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l+1-i+nh)\right]}{\prod_{j=1}^k \Gamma\left[\frac{1}{2}(n-l_2+1-j+nh)\right]} \quad (8.23)$$

と [定理 5.4] の式 (5.15) の形をしている。記号の対応は

$$a=k, \quad x_i = \frac{1}{2}n, \quad \xi_i = \frac{1}{2}(-l+1-i),$$

$$b=k, \quad y_j = \frac{1}{2}n, \quad \eta_j = \frac{1}{2}(-l_2+1-j)$$

で、これより自由度 f は

$$f = -2 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k (-l+1-i) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k (-l_2+1-j) - \frac{1}{2}(k-k) \right\} \\ = kl - kl_2 = kl_1 \quad (8.24)$$

で $r_1=0$ とする τ を計算すれば

$$\tau = \frac{1}{n} \left\{ n - l_2 - \frac{1}{2}(k+l_1+1) \right\} \quad (8.25)$$

が得られる。ゆえにこの f と τ を用いれば

$$-2\tau \log \lambda = - \left\{ n - l_2 - \frac{1}{2}(k+l_1+1) \right\} \log w \quad (8.26)$$

は近似的に自由度 kl_1 の χ^2 -分布に従うのである。

8.6 平均ベクトルに関する一様性の検定

q 個の正規母集団 $N(\boldsymbol{\mu}_{(h)}, \boldsymbol{A})$, $h=1, \dots, q$ において, 仮説

$$H_0: \boldsymbol{\mu}_{(1)} = \boldsymbol{\mu}_{(2)} = \dots = \boldsymbol{\mu}_{(q)} \quad (8.27)$$

の検定を考えよう。 $N(\boldsymbol{\mu}_{(h)}, \boldsymbol{A})$ からの任意標本を $\boldsymbol{y}_{(h)1}, \dots, \boldsymbol{y}_{(h)n_h}$ とし, $n = n_1 + \dots + n_q$ と表わす。いま

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}'(k \times n) &= (\boldsymbol{x}_1', \dots, \boldsymbol{x}_{n_1}', \boldsymbol{x}_{n_1+1}', \dots, \boldsymbol{x}_n') \\ &= (\boldsymbol{y}_{(1)1}', \dots, \boldsymbol{y}_{(1)n_1}', \boldsymbol{y}_{(2)1}', \dots, \boldsymbol{y}_{(2)n_2}', \dots, \boldsymbol{y}_{(q)n_q}') \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{Z}'(q \times n) = (\boldsymbol{z}_1', \dots, \boldsymbol{z}_{n_1}', \boldsymbol{z}_{n_1+1}', \dots, \boldsymbol{z}_{n_1+n_2}', \dots, \boldsymbol{z}_n')$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{n_1} & & \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{n_2} & & & & \dots & & & \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}_1' = (\boldsymbol{\mu}_{(1)}' - \boldsymbol{\mu}_{(q)}', \dots, \boldsymbol{\mu}_{(q-1)}' - \boldsymbol{\mu}_{(q)}') : k \times (q-1),$$

$$\boldsymbol{B}_2' = \boldsymbol{\mu}_{(q)}' : k \times 1, \quad \boldsymbol{B}'(k \times q) = (\boldsymbol{B}_1' \boldsymbol{B}_2')$$

とおけば, $\boldsymbol{x}_\alpha \sim N(\boldsymbol{z}_\alpha \boldsymbol{B}, \boldsymbol{A})$ あるいは $\boldsymbol{X} \sim N_n(\boldsymbol{Z} \boldsymbol{B}; \boldsymbol{A})$ と書くことができ, 検定すべき仮説 H_0 は $\boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{O}$ に同等である。したがって 8.3 節以下に展開した理論を使うことができる。これにより検定規準 w をもとの観測されるベクトル \boldsymbol{y}_α によって表わしておこう。

$$\begin{aligned} n\hat{\boldsymbol{A}} &= (\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}\hat{\boldsymbol{B}})'(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}\hat{\boldsymbol{B}}) = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{Z})(\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z})^{-1}(\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{X}) \\ &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{Z})\boldsymbol{E}'\{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z})\boldsymbol{E}'\}^{-1}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{X}) \\ &= \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} \boldsymbol{y}_{(i)\alpha}' \boldsymbol{y}_{(i)\alpha} - \left(n_1 \bar{\boldsymbol{y}}_{(1)}', \dots, n_{q-1} \bar{\boldsymbol{y}}_{(q-1)}', \sum_{i=1}^q n_i \bar{\boldsymbol{y}}_{(i)}' \right) \end{aligned}$$

$$\cdot E' \left\{ E \begin{bmatrix} n_1 & 0 & \cdots & 0 & n_1 \\ 0 & n_2 & \cdots & 0 & n_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & n_{q-1} & n_{q-1} \\ n_1 & n_2 & \cdots & n_{q-1} & n \end{bmatrix} E' \right\} E \begin{bmatrix} n_1 \bar{y}_{(1)} \\ n_2 \bar{y}_{(2)} \\ \vdots \\ n_{q-1} \bar{y}_{q-1} \\ \sum_{i=1}^q n_i \bar{y}_{(i)} \end{bmatrix}$$

ここで E として

$$E = \left[\begin{array}{c|c} I_{q-1} & 0 \\ \hline -1 & -1 & \cdots & -1 & 1 \end{array} \right]$$

を用いれば計算が容易になって上の第2項は $\sum_{i=1}^q n_i \bar{y}_{(i)}' \bar{y}_{(i)}$ となる。ゆえに

$$\begin{aligned} n\hat{A} &= \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} y_{(i)\alpha}' y_{(i)\alpha} - \sum_{i=1}^q n_i \bar{y}_{(i)}' \bar{y}_{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} (y_{(i)\alpha} - \bar{y}_{(i)})' (y_{(i)\alpha} - \bar{y}_{(i)}) \end{aligned} \quad (8.28)$$

といわゆる標本内共分散行列が得られる。

一方、式 (8.13) の分母のほうは $B_1^* = O$ であるから

$$Y = X - Z_1 B_1^* = X, \quad Z_2' (1 \times n) = (1, 1, \dots, 1)$$

$$\hat{B}_2 = (Z_2' Z_2)^{-1} Z_2' Y = \frac{1}{n} (1, 1, \dots, 1) X = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} y_{i(\alpha)} \equiv \bar{y}$$

したがって

$$\begin{aligned} n\hat{A} &= (Y - Z_2 \hat{B}_2)' (Y - Z_2 \hat{B}_2) = \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} (y_{(i)\alpha} - \bar{y})' (y_{(i)\alpha} - \bar{y}) \\ &= \sum_{i=1}^q n_i (\bar{y}_{(i)} - \bar{y})' (\bar{y}_{(i)} - \bar{y}) + \sum_{i=1}^q \sum_{\alpha=1}^{n_i} (y_{(i)\alpha} - \bar{y}_{(i)})' (y_{(i)\alpha} - \bar{y}_{(i)}) \end{aligned} \quad (8.29)$$

と標本間共分散行列と標本内共分散行列の和、すなわち、全共分散行列である。こうして H_0 の検定規準 w として式 (8.28) と式 (8.29) の比が得られ、 $w_{k,q-1,n-q}$ の分布に従うのである。

8.7 他への検定規準

$V = n\hat{A} = (X - Z\hat{B})'(X - Z\hat{B})$, $W = (\hat{B}_1 - B_1^*)'A_{11 \cdot 2}(\hat{B}_1 - B_1^*)$ とおけば
 $H_0: B_1 = B_1^*$ の検定規準 w は式 (8.17) の形

$$w = \frac{|V|}{|V + W|} \quad (8.30)$$

と書かれた。いま

$$|W - rV| = 0 \quad (8.31)$$

の根を $r_1 \geq r_2 \geq \dots \geq r_k \geq 0$ とすれば, $K'VK = I$, $K'WK = D$, とする正則な K が存在するから, w は

$$w = \frac{|K'VK|}{|K'VK + K'WK|} = \frac{|I|}{|I + D_r|} = \prod_{i=1}^k (1 + r_i)^{-1} \quad (8.32)$$

と r_i だけの関数として表わされる。したがって, V, W に対する正則な変換群の下で不変である。

H_0 の検定規準として尤度比に基づく w とは別に, Lawley [29], Hotelling [19] は

$$T_0^2 \equiv \sum_{i=1}^k r_i = \text{tr } D_r = \text{tr } K'WK = \text{tr } WKK' = \text{tr } WV^{-1} \quad (8.33)$$

を提唱した。もちろんこれも正則変換の下で不変である。いま $W = U_1'U_1 = u_1'u_1 + \dots + u_{l_1}'u_{l_1}$ と書けば

$$T_0^2 = \text{tr } U_1'U_1V^{-1} = \sum_{i=1}^{l_1} \text{tr } (u_i'u_iV^{-1}) = \sum_{i=1}^{l_1} u_iV^{-1}u_i' \equiv \sum_{i=1}^{l_1} T_i^2 \quad (8.34)$$

と表わされる。ここに T_i^2 は本質的には Hotelling の T^2 -統計量であるが, 共通に V^{-1} をもっているので互いに独立ではない。 T_0^2 の分布に関しては, Hotelling [19], Ito [22, 23], Pillai & Samson [39], Pillai & Mijares [41], 塩谷 [49], Siotani [50, 51] を参照せよ。

いま一つよく知られている検定規準は Roy [43] の与えたもので

$$r_1 = C_{\max}(WV^{-1}) \quad (8.35)$$

である。これは、ユニオン・インター・セクション法により導かれたものである。

以上あげた検定規準は式 (8.31) の根の関数として表わされているから、すでに求めた r_i , $i=1, \dots, k$, の同時分布 (7.1, 7.4 節) から H_0 の下でのこれらの分布を原理的には決定できるが、実際には $k=2$ を除けば計算は至って複雑である。

8.8 共分散行列分析

1 変量の場合における分散分析は、多変量の場合に容易に広げることができる。実際 8.6 節は一元配置におけるものであった。他の例として乱塊法を取り扱う。基礎の線型モデルは

$$x_{ij}(1 \times k) = \mu + \tau_i + \beta_j + e_{ij}, \quad i=1, \dots, a; j=1, \dots, b \quad (8.36)$$

$$\sum_{i=1}^a \tau_i = \sum_{j=1}^b \beta_j = 0, \quad e_{ij} \sim N(0, A) \quad (8.37)$$

である。農事試験のことはを使って、 τ_i を i 番目の処理効果、 β_j を j 番目のブロック効果、実験の行なわれる単位をプロットとよぶことにする。1 変量の場合に対応する全変動の分解は

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (x_{ij} - \bar{x}_{..})' (x_{ij} - \bar{x}_{..}) \\ &= b \sum_{i=1}^a (x_{i.} - \bar{x}_{..})' (x_{i.} - \bar{x}_{..}) + a \sum_{j=1}^b (x_{.j} - \bar{x}_{..})' (x_{.j} - \bar{x}_{..}) \\ & \quad + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (x_{ij} - x_{i.} - x_{.j} + \bar{x}_{..})' (x_{ij} - x_{i.} - x_{.j} + \bar{x}_{..}) \\ & \equiv T + S + E \end{aligned} \quad (8.38)$$

である。ここに $x_{i.} = \sum_{j=1}^b x_{ij}/b$, $x_{.j} = \sum_{i=1}^a x_{ij}/a$, $\bar{x}_{..} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b x_{ij}/ab$ で、 T は処理変動を、 S はブロック変動を、そして E は誤差変動を表わしている。

さて $n=ab$ 個のプロットをある一定の順序に並べ、 α 番目の観測ベクトル

を $\mathbf{x}_\alpha (\alpha=1, \dots, n)$, (\mathbf{x}_{ij} 's の中の一つ) とし, これを観測行列にまとめて $\mathbf{X}'(k \times n) = (\mathbf{x}_1', \dots, \mathbf{x}_n')$ と表わす。また処理, ブロックに関して

$$g_{ia} = \begin{cases} 1 & \alpha \text{ 番めのプロットが } i \text{ 番めの処理を受けたとき} \\ 0 & \text{そうでないとき} \end{cases}$$

$$h_{ja} = \begin{cases} 1 & \alpha \text{ 番めのプロットが } j \text{ 番めのブロックに属するとき} \\ 0 & \text{そうでないとき} \end{cases}$$

$$\mathbf{g}_i' = (g_{i1}, g_{i2}, \dots, g_{in}), \quad \mathbf{G}(n \times a) = (\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_a)$$

$$\mathbf{h}_j' = (h_{j1}, h_{j2}, \dots, h_{jn}), \quad \mathbf{H}(n \times b) = (\mathbf{h}_1, \dots, \mathbf{h}_b)$$

なる量を定義する。別に

$$\mathbf{1}_n'(1 \times n) = (1, \dots, 1), \quad \mathbf{B}_1'(k \times a) = (\boldsymbol{\tau}_1', \dots, \boldsymbol{\tau}_a'),$$

$$\mathbf{B}_2'(k \times b) = (\boldsymbol{\beta}_1', \dots, \boldsymbol{\beta}_b')$$

を定義すれば, 線型モデル, 式 (8.36) を

$$\mathcal{C}(\mathbf{X}) = \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu} + \mathbf{G} \mathbf{B}_1 + \mathbf{H} \mathbf{B}_2 = (\mathbf{1}_n \mathbf{G} \mathbf{H}) \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \equiv \mathbf{Z} \mathbf{B} \quad (8.39)$$

と書くことができる。 $\mathbf{Z}[n \times (1+a+b)] = (\mathbf{1}_n \mathbf{G} \mathbf{H})$ は実験の計画行列であり, $\mathbf{B}[(1+a+b) \times k]$ は未知パラメーター行列である。そして $\mathbf{X} \sim N_n(\mathbf{Z} \mathbf{B}; \mathbf{A})$ である。ただし, いままで取り扱ってきたものと異なり, ここの \mathbf{Z} の階数は $1+a+b$ より小さく (たとえば $\mathbf{1}_n = \mathbf{g}_1 + \dots + \mathbf{g}_a$ である), したがって $\mathbf{Z}' \mathbf{Z}$ の逆行列が存在しないから, $\hat{\mathbf{B}}$ を式 (8.3) として求めることができない。しかし式 (8.37) の条件, すなわち, $\mathbf{1}_a' \mathbf{B}_1 = \mathbf{0}$, $\mathbf{1}_b' \mathbf{B}_2 = \mathbf{0}$ の下で尤度関数を最大にすることができ, 最大尤度推定量として

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{x}_{..}, \quad \hat{\mathbf{B}}_1' = (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1', \dots, \hat{\boldsymbol{\tau}}_a') = (\mathbf{x}_{1..}' - \mathbf{x}_{..}', \dots, \mathbf{x}_{a..}' - \mathbf{x}_{..}')$$

$$\hat{\mathbf{B}}_2' = (\hat{\boldsymbol{\beta}}_1', \dots, \hat{\boldsymbol{\beta}}_b') = (\mathbf{x}_{1..}' - \mathbf{x}_{..}', \dots, \mathbf{x}_{b..}' - \mathbf{x}_{..}') \quad (8.40)$$

と1変量の場合に平行した結果が得られる。ゆえに \mathbf{A} に対する最大尤度推定量は

$$n \hat{\mathbf{A}} = (\mathbf{X} - \mathbf{Z} \hat{\mathbf{B}})' (\mathbf{X} - \mathbf{Z} \hat{\mathbf{B}})$$

$$= (\mathbf{X} - \mathbf{1}_n \hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbf{G} \hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{H} \hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{X} - \mathbf{1}_n \hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbf{G} \hat{\mathbf{B}}_1 - \mathbf{H} \hat{\mathbf{B}}_2)$$

$$= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..})' (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..}) = \mathbf{E} \quad (8.41)$$

と式 (8.38) の誤差変動そのものである。

さて次に処理間に変動がないという仮説

$$H_0: \tau_1 = \cdots = \tau_a = \mathbf{0} \text{ あるいは } \mathbf{B}_1 = \mathbf{0} \quad (8.42)$$

の検定を考えよう。仮説の下における μ , \mathbf{B}_2 , \mathbf{A} の最大尤度推定量を求めると

$$\hat{\mu} = \mathbf{x}_{..}, \quad \hat{\mathbf{B}}_2' = (\mathbf{x}_{.1}' - \mathbf{x}_{..}', \dots, \mathbf{x}_{.b}' - \mathbf{x}_{..}') \quad (8.43)$$

$$\begin{aligned} n\hat{\mathbf{A}} &= (\mathbf{X} - \mathbf{1}_n \hat{\mu} - \mathbf{H} \hat{\mathbf{B}}_2)' (\mathbf{X} - \mathbf{1}_n \hat{\mu} - \mathbf{H} \hat{\mathbf{B}}_2) \\ &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{.j})' (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{.j}) \\ &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..})' (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..}) \\ &\quad + b \sum_{i=1}^a (\mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{..})' (\mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{..}) = \mathbf{E} + \mathbf{T} \end{aligned} \quad (8.44)$$

であるから、尤度比に基づく検定規準は

$$w = \frac{|\mathbf{n}\hat{\mathbf{A}}|}{|\mathbf{n}\hat{\mathbf{A}}|} = \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{E} + \mathbf{T}|} \quad (8.45)$$

となる。

同様にブロック間の変動がないという仮説

$$H_0': \beta_1 = \cdots = \beta_b = \mathbf{0} \text{ あるいは } \mathbf{B}_2 = \mathbf{0} \quad (8.46)$$

に対しては、検定規準

$$w' = \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{E} + \mathbf{S}|} \quad (8.47)$$

が得られる。

w , w' の H_0 , H_0' の下における分布は、8.3~8.5 節と同様の議論を繰り返せば、それぞれ、 $w_{k, a-1, (a-1)(b-1)}$, $w_{k, b-1, (a-1)(b-1)}$ の分布であることがわかるが、これは次のように直接コ克兰の定理を適用して示すこともできる。いま $\mathbf{Y} = \mathbf{X} - \mathbf{Z}\mathbf{B} = \mathbf{X} - \mathbf{1}_n \mu - \mathbf{G}\mathbf{B}_1 - \mathbf{H}\mathbf{B}_2$ とおき $\mathbf{Y}'\mathbf{Y}$ を分解する。

$$\mathbf{Y}'\mathbf{Y} = \mathbf{Y}' \left(\frac{\mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'}{n} \right) \mathbf{Y} + \mathbf{Y}' \left(\mathbf{I}_n - \frac{\mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'}{n} \right) \mathbf{Y}$$

$$\begin{aligned}
&= Y' \left(\frac{1_n 1_n'}{n} \right) Y + Y' \left(\frac{GG'}{b} - \frac{1_n 1_n'}{n} \right) Y + Y' \left(\frac{HH'}{a} - \frac{1_n 1_n'}{n} \right) Y \\
&\quad + Y' \left(I_n - \frac{GG'}{b} - \frac{HH'}{a} + \frac{1_n 1_n'}{n} \right) Y \\
&\equiv Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 \tag{8.48}
\end{aligned}$$

ここに $n \times n$ の二次形式の行列は

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1_n 1_n'}{n} \right)^2 &= \frac{1_n 1_n'}{n}, \quad \left(I_n - \frac{1_n 1_n'}{n} \right)^2 = I_n - \frac{1_n 1_n'}{n}, \\
\left(\frac{GG'}{b} - \frac{1_n 1_n'}{n} \right)^2 &= \frac{GG'}{b} - \frac{1_n 1_n'}{n}, \\
\left(\frac{HH'}{a} - \frac{1_n 1_n'}{n} \right)^2 &= \frac{HH'}{a} - \frac{1_n 1_n'}{n}, \\
\left(I_n - \frac{GG'}{b} - \frac{HH'}{a} + \frac{1_n 1_n'}{n} \right)^2 &= I_n - \frac{GG'}{b} - \frac{HH'}{a} + \frac{1_n 1_n'}{n}
\end{aligned}$$

と冪等行列である。これらは

$$\begin{aligned}
G'G &= bI_a, \quad 1_n'G = b1_a', \quad G1_a = 1_n, \quad G'H = 1_a 1_b', \quad HH' = a1_b, \\
1_n'H &= a1_b', \quad H1_b = 1_n
\end{aligned}$$

に注意すれば容易に検証されるであろう。ゆえに各行列の階数を求めるために跡をとれば

$$\left. \begin{aligned}
r\left(\frac{1_n 1_n'}{n}\right) &= 1, \quad r\left(I_n - \frac{1_n 1_n'}{n}\right) = n-1 = ab-1, \\
r\left(\frac{GG'}{b} - \frac{1_n 1_n'}{n}\right) &= \text{tr}\{(g_1 g_1' + \cdots + g_a g_a')/b\} - 1 = a-1 \\
r\left(\frac{HH'}{a} - \frac{1_n 1_n'}{n}\right) &= b-1, \\
r\left(I_n - \frac{GG'}{b} - \frac{HH'}{a} + \frac{1_n 1_n'}{n}\right) &= n-a-b+1 = (a-1)(b-1)
\end{aligned} \right\} \tag{8.49}$$

が得られ、かつ

$$n = (1) + (a-1) + (b-1) + (n-a-b+1)$$

であるから、[定理 3.13] (コクラン) により、 Q_i , $i=1, \dots, 4$ は互いに独立で、かつ

$$\mathbf{Q}_i = \mathbf{U}_i' \mathbf{U}_i, \quad \mathbf{U}_i (\nu_i \times k) \sim N_{\nu_i}(\mathbf{O}; \mathbf{A}), \quad i=1, \dots, 4 \quad (8.50)$$

と表わすことができる。ただし、 ν_i は式 (8.49) に求めた \mathbf{Q}_i の自由度である。そして $\nu_i \geq k$ であれば $\mathbf{Q}_i \sim W(\mathbf{A}, k, \nu_i)$ なのである。

さて $\mathbf{1}_a' \mathbf{B}_1 = \mathbf{1}_b' \mathbf{B}_2 = \mathbf{O}$ を考慮して \mathbf{Q}_2 を \mathbf{x}_{ij} の関数として書き直してゆけば

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_2 &= \frac{1}{b} (\mathbf{G}' \mathbf{X} - \mathbf{G}' \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu} - \mathbf{G}' \mathbf{G} \mathbf{B}_1 - \mathbf{G}' \mathbf{H} \mathbf{B}_2)' \\ &\quad \cdot (\mathbf{G}' \mathbf{X} - \mathbf{G}' \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu} - \mathbf{G}' \mathbf{G} \mathbf{B}_1 - \mathbf{G}' \mathbf{H} \mathbf{B}_2) \\ &\quad - \frac{1}{n} (\mathbf{1}_n' \mathbf{X} - \mathbf{1}_n' \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu} - \mathbf{1}_n' \mathbf{G} \mathbf{B}_1 - \mathbf{1}_n' \mathbf{H} \mathbf{B}_2)' \\ &\quad \cdot (\mathbf{1}_n' \mathbf{X} - \mathbf{1}_n' \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu} - \mathbf{1}_n' \mathbf{G} \mathbf{B}_1 - \mathbf{1}_n' \mathbf{H} \mathbf{B}_2) \\ &= b \sum_{i=1}^a (\mathbf{x}_{i.} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\tau}_i)' (\mathbf{x}_{i.} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\tau}_i) - n (\mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\mu})' (\mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\mu}) \\ &= b \sum_{i=1}^a (\mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\tau}_i)' (\mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\tau}_i) \end{aligned} \quad (8.51)$$

となる。特に $H_0: \mathbf{B}_1 = \mathbf{O}$ が正しいときには $\mathbf{Q}_2 = \mathbf{T}$ である。同様に

$$\mathbf{Q}_3 = a \sum_{j=0}^b (\mathbf{x}_{.j} - \mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\beta}_j)' (\mathbf{x}_{.j} - \mathbf{x}_{..} - \boldsymbol{\beta}_j) \quad (8.52)$$

で、 $H_0': \mathbf{B}_2 = \mathbf{O}$ の下では $\mathbf{Q}_3 = \mathbf{S}$ となっているのである。また

$$\mathbf{Q}_4 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..})' (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i.} - \mathbf{x}_{.j} + \mathbf{x}_{..}) = \mathbf{E} \quad (8.53)$$

と $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$ のいかに関係なく \mathbf{E} に等しく、したがって $(a-1)(b-1) \geq k$ のとき、 $\mathbf{E} \sim W(\mathbf{A}, k, (a-1)(b-1))$ なのである。

こうして H_0 の下での式 (8.45), H_0' の下での式 (8.47) の分布は、それぞれ、 $w_{k, a-1, (a-1)(b-1)}$, $w_{k, b-1, (a-1)(b-1)}$ の分布であることが 8.3 節より直ちにわかるのである。

付 録

A. 1 行列式, 行列に関するいくつかの公式

(A. 1. 1) $A(p \times p)$, $B(p \times q)$, $C(q \times p)$, $D(q \times q)$ のとき

$$\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |D| |A - BD^{-1}C|, \quad (|D| \neq 0)$$

$$\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |A| |D - CA^{-1}B|, \quad (|A| \neq 0)$$

[証明]

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} \begin{vmatrix} I_p & O \\ -D^{-1}C & I_q \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_p & O \\ -D^{-1}C & I_q \end{bmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} A - BD^{-1}C & B \\ O & D \end{vmatrix} = |D| |A - BD^{-1}C| \end{aligned}$$

もう一つのほうも同様である。

(A. 1. 2) $A(p \times q)$, $B(q \times p)$ に対して

$$|I_p + AB| = |I_q + BA|$$

• (A. 1. 3) $|I + x'y| = 1 + yx'$

(A. 1. 4) (ヤコビの公式) $A(p \times p)$ の行列式 $|A|$ における a_{ij} の余因子を A_{ij} とすれば,

$$\begin{vmatrix} A_{i_1 k_1} & A_{i_1 k_2} \\ A_{i_2 k_1} & A_{i_2 k_2} \end{vmatrix} = A_{i_1 k_1} A_{i_2 k_2} - A_{i_1 k_2} A_{i_2 k_1} = |A| A_{(i_1, i_2; k_1, k_2)}$$

である。ここに $A_{(i_1, i_2; k_1, k_2)}$ は $|A|$ の i_1, i_2 行と k_1, k_2 列とを除いた $p-2$ 次の小行列式である。

[証明] はもっと一般的な形の定理とともに, 普通の行列, 行列式の教科書に出ているから参照されたい。たとえば, 藤原 [15] の 1・18 節を見よ。

(A. 1. 5) $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$

(A. 1. 6)

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad B = A^{-1} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

とし, 分割は対応しているものとする。このとき

$$B_{11} = (A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21})^{-1}, \quad B_{21} = -A_{22}^{-1}A_{21}B_{11}$$

$$B_{22} = (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}, \quad B_{12} = -A_{11}^{-1}A_{12}B_{22}$$

[証明]

$$I = AB = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

でなければならないから、 $B_{ij}(i, j=1, 2)$ は

$$A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} = I, \quad A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} = O$$

$$A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} = O, \quad A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} = I$$

を満たす。この行列方程式を解けば容易に定理の結果が得られる。左側の2式のうちの式から $B_{21} = -A_{22}^{-1}A_{21}B_{11}$ が得られ、これを上の式に代入すれば、 $(A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}) \cdot B_{11} = I$ 。したがって $B_{11} = (A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21})^{-1}$ となる。残りも同様である。

(A. 1. 7) $A(p \times p)$ で正則、 $U(p \times q)$, $V(q \times p)$, $B(q \times q)$ とするとき

$$\begin{aligned} (A + UBV)^{-1} &= A^{-1} - A^{-1}UB(B + BVA^{-1}UB)^{-1}BVA^{-1}, \\ &= A^{-1} - A^{-1}U(B^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}, \quad (|B| \neq 0) \end{aligned}$$

(A. 1. 8) $A(p \times p)$ で正則、 $x(1 \times p)$, $y(1 \times p)$ とすれば

$$(A + x'y)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}x'yA^{-1}/(1 + yA^{-1}x')$$

(A. 1. 9) A を対称で冪等な行列とすれば、 A の特有根は1か0である。ゆえに適当な直交行列 Γ によって

$$A = \Gamma' \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & O \end{bmatrix} \Gamma$$

の形に書ける。これより A の階数は $r(A) = \text{tr } A = r$ である。

(A. 1. 10) $M(p \times n)$, $(p \leq n)$, $r(M) = p$ とすれば、 $M'(MM')^{-1}M$ は冪等行列である。

(A. 1. 11) $A(p \times p)$ の特有根を $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ とすれば

$$\text{tr } A = \lambda_1 + \dots + \lambda_p, \quad |A| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_p$$

[証明] $|A - \lambda I| = (-1)^p (\lambda - \lambda_1) \dots (\lambda - \lambda_p)$ の両辺の展開における λ^{p-1} の係数を比較すれば $a_{11} + \dots + a_{pp} = \lambda_1 + \dots + \lambda_p$ が得られる。また $\lambda = 0$ とおけば $|A| = (-1)^p (-\lambda_1) \dots (-\lambda_p) = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_p$ である。

(A. 1. 12) $A(p \times p)$, $B(p \times p)$ とし、 A を正則とすれば、 $|B - \lambda A| = 0$ の根は、 BA^{-1} あるいは $A^{-1}B$ の特有根と同じである。

(A. 1. 13) $A(p \times q)$, $B(q \times p)$ とするとき、 AB の0でない特有根は、 BA の0でない特有根に等しい、すなわち、 $\text{ch}(AB) = \text{ch}(BA)$ 。

A. 2 行列の因子分解

(A. 2. 1) $V(p \times p)$ を対称で非負の行列とする。 V の特有根を $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ とすれば

$$V = A' D_\lambda A$$

なる直交行列 A が存在する。ここに $D_\lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ である。

もし、 V が正値定符号、 λ_i が相異なり、 A の第1列の要素が $a_{11} \geq 0$ であれば、上の

表現は一意である。

〔証明〕 前半はよく知られているから、ここには後半の一意性の証明だけを与える。定理の条件を満たす直交行列として A_1, A_2 があったとしよう。このとき、 $V = A_1' D_\lambda A_1 = A_2' D_\lambda A_2$ 、したがって $A_2 A_1' D_\lambda = D_\lambda A_2 A_1'$ が得られる。いま $A_2 A_1' = B \equiv (b_{ij})$ とおけば、 $b_{ij} \lambda_j = \lambda_i b_{ij}$ すなわち $b_{ij}(\lambda_i - \lambda_j) = 0$ である。仮定により $\lambda_i \neq \lambda_j (i \neq j)$ であるから $b_{ij} = 0 (i \neq j)$ 、すなわち $B = D_b \equiv \text{diag}(b_1, \dots, b_p)$ と対角行列であることがわかる。ところで、 $D_b D_b' = D_{b^2} = A_2 A_1' A_1 A_2' = I_p$ より $b_i^2 = 1$ 、したがって $b_i = \pm 1$ である。ゆえに $D_{\pm 1}$ で対角要素が 1 か -1 である対角行列を表わせば、 $A_2 = D_{\pm 1} A_1$ なる関係が得られる。しかし仮定により $a_{11}^{(1)} \geq 0, a_{11}^{(2)} \geq 0$ であるから、 $D_{\pm 1} = I_p$ 、すなわち、 $A_1 = A_2$ でなければならない。

(A. 2. 2) $V(p \times p)$ を対称で非負の行列とする。このとき常に $V(p \times p) = W'(p \times p) W(p \times p)$ の形に書ける。特に V が正則ならば W は正則である。

〔証明〕 前定理により直交行列 A が存在して $V = A' D_\lambda A$ と書ける。ところで V が非負であるから $\lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, p$ で、したがって、 $V = A' D_{\sqrt{\lambda}} D_{\sqrt{\lambda}} A$ となる。 $W = D_{\sqrt{\lambda}} A$ とおけば $V = W' W$ 。 V が正則ならば $D_{\sqrt{\lambda}}$ が正則で結局 W もまた正則である。

(A. 2. 3) $V(p \times p)$ が対称で正値定符号であるとき

$$V = V^{1/2} V^{1/2}$$

と表わすことができる。ここに $V^{1/2}$ は対称である。

〔証明〕 (A. 2. 1) により $V = A' D_\lambda A$ 。 V が正値定符号であるから特有根はすべて正、すなわち、 $\lambda_i > 0, i = 1, \dots, p$ 。ゆえに A が直交行列であることに注意すれば

$$V = A' D_{\sqrt{\lambda}} D_{\sqrt{\lambda}} A = A' D_{\sqrt{\lambda}} A A' D_{\sqrt{\lambda}} A$$

と書ける。 $V^{1/2} \equiv A' D_{\sqrt{\lambda}} A$ と定義すれば、これは対称かつ正則であり、 $V = V^{1/2} V^{1/2}$ となる。

(A. 2. 4) $V(p \times p)$ を対称な正値定符号の行列とする。このとき、正の対角要素をもつ三角行列 $\tilde{T}(p \times p)$ によって、一意に $V = \tilde{T}' \tilde{T}$ と表わすことができる。

〔証明〕 まず V が三角行列の積として表わされることを p についての数学的帰納法によって示そう。このため $p \times p$ のときの V, \tilde{T} を V_p, \tilde{T}_p と表わす。さて $p=1$ のときは明らかであるから、 $p-1$ のとき $V_{p-1} = \tilde{T}_{p-1}' \tilde{T}_{p-1}$ なる表現が可能であると仮定して、 $V_p = \tilde{T}_p' \tilde{T}_p$ とすることができることを示す。 V_p の第 p 行、第 p 列を除いた部分は、 $(p-1) \times (p-1)$ の対称、正値定符号行列であるから、これは $V_{p-1} = \tilde{T}_{p-1}' \tilde{T}_{p-1}$ と書ける。ゆえに

$$V_p = \left[\begin{array}{c|c} \tilde{T}_{p-1}' \tilde{T}_{p-1} & v' \\ \hline v & v_{pp} \end{array} \right], \quad (v: 1 \times (p-1), v_{pp} > 0)$$

の形である。 \tilde{T}_{p-1} は正則であるから $t = v \tilde{T}_{p-1}^{-1}$ によって t を定めることができ、した

がって、(A.1.1) により $v_{pp} - tt' > 0$ であることに注意すれば

$$V_p = \begin{bmatrix} \tilde{T}_{p-1}' \tilde{T}_{p-1} & \tilde{T}_{p-1}' t' \\ t \tilde{T}_{p-1} & v_{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{T}_{p-1}' & 0' \\ t & \sqrt{v_{pp} - tt'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{T}_{p-1} & t' \\ 0 & \sqrt{v_{pp} - tt'} \end{bmatrix} = \tilde{T}_p' \tilde{T}_p$$

と表現されるのである。

次にこの表現が一意であることを証明する。いま定理の条件を満たす三角行列が二つあったとして \tilde{T}_1, \tilde{T}_2 と名づけよう。すると $V = \tilde{T}_1' \tilde{T}_1 = \tilde{T}_2' \tilde{T}_2$ であるから $(\tilde{T}_2')^{-1} \tilde{T}_1' = \tilde{T}_2 \tilde{T}_1^{-1}$ であるが、 $\tilde{T}_2 \tilde{T}_1^{-1}$ がやはり \tilde{T}_1 と同じ形の三角行列であり、 $(\tilde{T}_2')^{-1} \tilde{T}_1'$ は \tilde{T}_1' と同じ形の三角行列であることに注意すれば、結局

$$\tilde{T}_2 \tilde{T}_1^{-1} = D_a \equiv \text{diag}(a_1, \dots, a_p)$$

であることがわかる。ところが $D_a D_a' = D_{a^2} = \tilde{T}_2 \tilde{T}_1^{-1} [(\tilde{T}_2')^{-1} \tilde{T}_1']' = \tilde{T}_2 \tilde{T}_1^{-1} \tilde{T}_1 \tilde{T}_2^{-1} = I$ で、したがって $a_i = \pm 1$, すなわち $D_a = D_{\pm 1}$ である。ゆえに $\tilde{T}_2 = D_{\pm 1} \tilde{T}_1$ 。ところが \tilde{T}_1, \tilde{T}_2 の対角要素は正であるから $D_{\pm 1} = I$ でなければならない。結局 $\tilde{T}_1 = \tilde{T}_2$ となり一意性の証明を終わる。

(A. 2. 5) $X(m \times p), Y(n \times p), p \leq m \leq n$ のとき

$$X'X = Y'Y \iff \Gamma'X = Y$$

ここに Γ は $\Gamma'\Gamma = I_m$ なる $n \times m$ 行列である。

【証明】 \leftarrow に対する証明は明らかであるから逆方向の証明を考えよう。もし $m < n$ のときは X' の代わりに $(X'O')$, $(O': p \times (n-m))$ を, Γ' の代わりに $(\Gamma'\Gamma_1)$ ($\Gamma_1: n \times (n-m)$) を考えれば、問題を変えることなく議論を進めることができるので、最初から $m=n$ としても一般性を失わない。

$X'X$ は対称で非負の $p \times p$ 行列であるから、 A なる直交行列があって

$$A'(X'X)A = \begin{bmatrix} D_{a^2} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_a & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_a & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

と書くことができる。これより

$$\begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_a^{-1} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} A'X'XA \begin{bmatrix} D_a^{-1} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

いま

$$A(n \times p) \equiv XA \begin{bmatrix} D_a^{-1} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \text{ とおけば } \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = A'A$$

同様に, $Y'Y (= X'X)$ に対しても同じ A と D_a が得られ

$$B(n \times p) \equiv YA \begin{bmatrix} D_a^{-1} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \text{ とおけば } \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = B'B$$

ここで $A = (A_1(n \times r), A_2(n \times \overline{p-r}))$ と分割すれば

$$A'A = \begin{bmatrix} A_1'A_1 & A_1'A_2 \\ A_2'A_1 & A_2'A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

であるから、 $A_1'A_1 = I_r$, $A_2'A_2 = O$, したがって $A_2 = O$ となる。そこで $A_3(n \times \overline{n-r})$ を $A_0(n \times n) = (A_1(n \times r), A_3(n \times \overline{n-r}))$ が直交行列になるように定める。すなわち、 $A_0'A_0 = A_0A_0' = I_n$ 。同じ議論を B に対して行なえば、直交行列 $B_0(n \times n) = (B_1(n \times r), B_3(n \times \overline{n-r}))$, $B_0'B_0 = B_0'B_0 = I_n$ が得られる。いま $\Gamma \equiv B_0A_0'$ とおけば、もちろん Γ は直交行列である。そして $(B_1B_3) = B_0 = \Gamma A_0 = (\Gamma A_1, \Gamma A_3)$ より $B_1 = \Gamma A_1$ 。ゆえに $A = (A_1, O)$, $B = (B_1, O)$ を結ぶ関係 $B = (B_1, O) = (\Gamma A_1, O) = \Gamma(A_1, O) = \Gamma A$ が得られる。これはまた

$$YA \begin{bmatrix} D_{\alpha}^{-1} & O \\ O & I \end{bmatrix} = \Gamma XA \begin{bmatrix} D_{\alpha}^{-1} & O \\ O & I \end{bmatrix}$$

であり、 $Y = \Gamma X$ が得られる。

(A. 2. 6) $X(n \times p)$, ($p \leq n$), を階数 p の行列とすれば、

$$X = \Gamma D_{\sqrt{1}} A$$

と表わすことができる。ここに A は $p \times p$ の直交行列、 $D_{\sqrt{1}} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_p})$ で λ_i は $X'X$ の特根、 Γ は $\Gamma'\Gamma = I_p$ なる $n \times p$ 行列である。もし λ_i がすべて異なり、 A の第1列の要素がすべて非負であるという条件をつけると、この表現は一意である。

【証明】 仮定により $(X'X)$ は対称で正値定符号の $p \times p$ 行列であるから、(A. 2. 1) により $X'X = A'D_{\lambda}A = (A'D_{\sqrt{1}})(D_{\sqrt{1}}A)$ なる直交行列 A が存在する。ゆえに (A. 2. 5) により $X = \Gamma D_{\sqrt{1}}A$ と表わすことができる。もし λ_i がすべて異なり、 A をその第1列の要素がすべて非負であるものとすれば、 $A, D_{\sqrt{1}}$ は $(X'X)$ から一意に定まり、したがって Γ も $\Gamma = XA'D_{\sqrt{1}}^{-1}$ により一意に定められる。

(A. 2. 7) $X(n \times p)$, ($p \leq n$) を階数 p の行列とすれば

$$X = A\tilde{T}$$

なる表現が可能である。ここに $\tilde{T}(p \times p)$ は三角行列、 $A(n \times p)$ は $A'A = I_p$ なる行列である。もし \tilde{T} の対角要素をすべて正のものとすれば、上の表現は一意である。

【証明】 は前定理の証明と同様に、(A. 2. 4) と (A. 2. 5) を組み合わせて考えればよい。

(A. 2. 8) $X(n \times p)$, ($p \leq n$) を階数 p の行列とすれば

$$X = \Gamma W$$

と表わすことができる。ここに $W(p \times p)$ は対称行列、 Γ は $\Gamma'\Gamma = I_p$ なる $n \times p$ 行列である。

【証明】 は (A. 2. 3) と (A. 2. 5) を組み合わせて考えればよい。

A. 3 行列の微分

行列 $A=(a_{ij})$ の各要素が x, y, \dots 等の関数とすると

$$\frac{dA}{dx} \equiv \left(\frac{da_{ij}}{dx} \right)$$

と定義される。全微分については、 $dA=(da_{ij})$ である。

$$(A. 3. 1) \quad (i) \quad \frac{d}{dx}(A \pm B) = \frac{dA}{dx} \pm \frac{dB}{dx}, \quad d(A \pm B) = dA \pm dB$$

$$(ii) \quad \frac{d}{dx}(AB) = \frac{dA}{dx} \cdot B + A \cdot \frac{dB}{dx}, \quad d(AB) = (dA)B + A(dB)$$

(A. 3. 2) A が正方行列で正則であるとき

$$\frac{d|A|}{dx} = |A| \operatorname{tr} \left\{ A^{-1} \frac{dA}{dx} \right\}, \quad d|A| = |A| \operatorname{tr} \{ A^{-1} (dA) \}$$

【証明】 a_{ij} の余因子を A_{ij} と書き、 $A^{-1}=(a^{ij})$ とする。このとき、

$$\begin{aligned} d|A| &= \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \frac{\partial |A|}{\partial a_{ij}} da_{ij} = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p A_{ij} da_{ij} = |A| \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \frac{A_{ij}}{|A|} da_{ij} \\ &= |A| \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p a^{ji} da_{ij} = |A| \operatorname{tr} \{ A^{-1} (dA) \}. \end{aligned}$$

$d|A|/dx$ のほうも同様である。

(A. 3. 3) $B=(b_{ij})$ を $p \times p$ 行列とすれば、

$$\frac{\partial |B|}{\partial b_{ij}} = B_{ij}, \quad \frac{\partial \log |B|}{\partial b_{ij}} = b^{ji} \quad [B_{ij} \text{ は } b_{ij} \text{ の余因子, } B^{-1}=(b^{ij})]$$

(A. 3. 4) A が対称行列のとき

$$\frac{\partial |A|}{\partial a_{ii}} = A_{ii}, \quad \frac{\partial |A|}{\partial a_{ij}} = 2A_{ij}, \quad (i \neq j); [A_{ij} \text{ は } a_{ij} \text{ の余因子}]$$

$$(A. 3. 5) \quad \frac{dA^{-1}}{dx} = -A^{-1} \cdot \frac{dA}{dx} \cdot A^{-1}, \quad dA^{-1} = -A^{-1} (dA) A^{-1}$$

【証明】 $AA^{-1}=I$ の両辺の微分をとれば

$$(dA)A^{-1} + A(dA^{-1}) = 0,$$

であるから、これより直ちに $dA^{-1} = -A^{-1}(dA)A^{-1}$ を得る。

$$(A. 3. 6) \quad \frac{\partial}{\partial x} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_p} \right) \text{ なる記号を使えば}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (xAx') = 2xA$$

A. 4 二次形式に関する結果

(A. 4. 1) $A(p \times p)$ を対称で階数 $r(\leq p)$ の非負行列とし、かつ、 $c_{\min} = C_{\min}(A)$, $c_{\max} = C_{\max}(A)$ とする。いま 0 でないベクトル $\alpha(1 \times p)$ の全体を \mathfrak{A} で表わせば、

$$c_{\min} = \inf_{a \in \mathfrak{A}} (aAa'/aa'), \quad c_{\max} = \sup_{a \in \mathfrak{A}} (aAa'/aa')$$

である。ゆえに，“すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対して $d_1 \leq aAa'/aa' \leq d_2$ である”ということは，“ $d_1 \leq c_{\min} \leq c_{\max} \leq d_2$ ”ということと同等である。

〔証明〕 aAa'/aa' の最大，最小を求める問題は， $b = a/\sqrt{aa'}$ とおけば， $bb' = 1$ なる条件の下に bAb' を最大，最小にする問題と同等である。ゆえにラグランジュの未定係数を c とすれば， $bAb' - c(bb' - 1)$ を b の要素について微分して 0 とおけばよい。(A. 3.6) によって $bA = cb$ となり， bAb' の極大極小を与えるベクトルが A の特有ベクトルであることがわかる。このときの値は $bAb' = cbb' = c$ で特有根にはかならない。したがって bAb' の最大値は c_{\max} であり，最小値は c_{\min} である。

(A. 4. 2) $A(p \times p)$ を対称で正値定符号， $B(p \times p)$ を対称で階数 $r(\leq p)$ の非負行列とする。方程式 $|B - cA| = 0$ の最小根，最大根をそれぞれ c_{\min} ， c_{\max} とすれば

$$c_{\min} = \inf_{a \in \mathfrak{A}} (aBa'/aAa'), \quad c_{\max} = \sup_{a \in \mathfrak{A}} (aBa'/aAa')$$

である。ここに \mathfrak{A} は (A. 4.1) のものと同じである。ゆえに，“すべての $a \in \mathfrak{A}$ に対して $d_1 \leq aBa'/aAa' \leq d_2$ である”ということは，“ $d_1 \leq c_{\min} \leq c_{\max} \leq d_2$ ”ということと同じである。

〔証明〕 $a = bA^{-1/2}$ とおけば， $A > 0$ であるから， b の全体は \mathfrak{A} と一致する。この b を使えば， $aBa'/aAa' = bA^{-1/2}BA^{-1/2}b'/bb'$ となり (A. 4.1) の場合となるから，求める最小値，最大値はそれぞれ $C_{\min}(A^{-1/2}BA^{-1/2})$ ， $C_{\max}(A^{-1/2}BA^{-1/2})$ である。ところで， $\text{ch}(A^{-1/2}BA^{-1/2}) = \text{ch}(BA^{-1}) = \{|B - cA| = 0 \text{ の根} \}$ であり，結局定理の結論が得られる。

(A. 4. 3) x を $1 \times p$ のベクトル， A を対称，正値定符号行列とすれば， $\sup_{a \in \mathfrak{A}} \{ax'xa'/aAa'\} = xA^{-1}x'$ である。

〔証明〕 (A. 4.2) において $B = x'x$ とおけば， $C_{\max}\{(x'x)A^{-1}\} = \sup_{a \in \mathfrak{A}} \{ax'xa'/aAa'\}$ であるが， $x'x$ の階数が 1 であり，したがって，0 でない $(x'x)A^{-1}$ の特有根はただ 1 個であるから，

$$C_{\max}\{(x'x)A^{-1}\} = \text{tr}\{(x'x)A^{-1}\} = xA^{-1}x'$$

となっているのである。

$$(A. 4. 4) \quad V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix} \quad (p \leq q) \text{ を対称で正値定符号の } (p+q) \times (p+q) \text{ 行列と}$$

し，0 でない実ベクトル $a(1 \times p)$ の全体を \mathfrak{A} ， $b(1 \times q)$ の全体を \mathfrak{B} とすれば

$$c_{\min} = \inf_{\substack{a \in \mathfrak{A} \\ b \in \mathfrak{B}}} \{[aV_{12}b']^2 / (aV_{11}a')(bV_{22}b')\},$$

$$c_{\max} = \sup_{\substack{a \in \mathfrak{A} \\ b \in \mathfrak{B}}} \{[aV_{12}b']^2 / (aV_{11}a')(bV_{22}b')\}$$

ここに, c_{\min} , c_{\max} は, それぞれ方程式 $|V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}-cV_{11}|=0$ の根の最小値 C_{\min} ($V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}V_{11}^{-1}$), 最大値 C_{\max} ($V_{12}V_{22}^{-1}V_{21}V_{11}^{-1}$) である。

【証明】は本文 2.4 節に含まれているのでここには述べない。

A. 5 行列変換のヤコービヤン

【証明】その他詳しいことは Deemer & Olkin [10] を見よ。

$$(A. 5. 1) \quad (i) \quad J(Y: X) = \frac{1}{J(X: Y)},$$

$$(ii) \quad Z=f(Y), \quad Y=f(X) \text{ のとき, } J(Z: X)=J(Z: Y)J(Y: X),$$

$$(iii) \quad U=f(X), \quad V=g(Y) \text{ のとき, } J(U, V: X, Y) \\ = J(U: X)J(V: Y)$$

$$(A. 5. 2) \quad y=xA(y, x; 1 \times p, A; p \times p), \quad J(y: x)=|A|$$

$$(A. 5. 3) \quad Y=XA(X, Y; p \times q, A; q \times q), \quad J(Y: X)=|A|^p$$

$$Y=BX(X, Y; p \times q, B; p \times p), \quad J(Y: X)=|B|^q$$

$$(A. 5. 4) \quad Y=A'XA \text{ (全部 } p \times p, X, Y \text{ は対称)}, \quad J(Y: X)=|A|^{p+1},$$

【証明】 A が正方で正則であるから, 行列論により

$$A=E_mE_{m-1}\cdots E_2E_1$$

表わすことができる。ここに E_i 's のあるものは, 対角要素のほかにすべて 0, 対角要素は $e_{ii}=c$, その他は 1 という型のものであり, 残りの E は, 対角要素が全部 1, (i, j) 要素 $(i \neq j)$ が c , その他の要素はすべて 0 といった型の行列である。ゆえに

$$Y=E_1'\cdots E_m'XE_m\cdots E_1$$

と書ける。 $Y_1=E_m'XE_m$, $Y_2=E_{m-1}'Y_1E_{m-1}$, \cdots , $Y_m \equiv Y=E_1'Y_{m-1}E_1$ とすれば, (A. 5.1) (ii) により

$$J(Y: X)=J(Y: Y_{m-1})J(Y_{m-1}: Y_{m-2})\cdots J(Y_1: X)$$

と分解される。ところで, E_a としてさきに述べた二つの型について

$Y_a=E_{m-a}'Y_{a-1}E_{m-a}$ の両辺の要素間の関係式を書き, これより偏微分係数のつくる行列式を計算すれば $J(Y_a: Y_{a-1})=|E_{m-a}|^{p+1}$ が容易に証明される。したがって

$$J(Y: X)=|E_1|^{p+1}\cdots|E_m|^{p+1}=|E_m\cdots E_1|^{p+1}=|A|^{p+1}$$

が得られる。

$$(A. 5. 5) \quad Y=\tilde{T}'\tilde{A}+\tilde{A}'\tilde{T} \text{ (全部 } p \times p, \tilde{A}, \tilde{T} \text{ は三角型, } Y \text{ は対称)},$$

$$J(Y: \tilde{T})=2^p \prod_{i=1}^p a_{ii}^{p-i+1}$$

【証明】 $\tilde{A}'^{-1}Y\tilde{A}^{-1}=\tilde{A}'^{-1}\tilde{T}'+\tilde{T}\tilde{A}^{-1}$ の形にして, $Z=\tilde{A}'^{-1}Y\tilde{A}^{-1}$, $\tilde{S}=\tilde{T}\tilde{A}^{-1}$ とおけば $Z=\tilde{S}'+\tilde{S}$ であり,

$$J(Y: \tilde{T})=J(Y: Z)J(Z: \tilde{S})J(\tilde{S}: \tilde{T})$$

と分解され, 各因子は容易に計算される。すなわち,

$$J(Z: \tilde{S}) = 2^p, \quad J(Y: Z) = |\tilde{A}|^{p+1} = \prod_{i=1}^p a_{ii}^{p+1} \quad [\because (A.5.4)],$$

$$J(\tilde{S}: \tilde{T}) = 1/J(\tilde{T}: \tilde{S}) = \prod_{i=1}^p a_{ii}^{-i}, \quad \left[t_{ij} = \sum_{\alpha=i}^j s_{i\alpha} a_{\alpha j}, \quad (i \leq j) \text{ を利用} \right]$$

この結果をまとめれば

$$J(Y: \tilde{T}) = \left(\prod_{i=1}^p a_{ii}^{p+1} \right) (2^p) \left(\prod_{i=1}^p a_{ii}^{-i} \right) = 2^p \prod_{i=1}^p a_{ii}^{p-i+1}$$

(A. 5. 6) 行列変換 $Y = f(X)$ が与えられているとき, $dY = df(X)$ は微分 dx_{ij} について線型であり, $J(Y: X) = J(dY: dX)$ である。

【証明】 行列変換は $y_i = f_i(x_1, \dots, x_m)$, $i=1, \dots, m$, と同じで, $dy_i = \sum_{j=1}^m (\partial f_i / \partial x_j) dx_j$ に注意すれば, $dY = df(X)$ は $(dy_1, \dots, dy_m) = (dx_1, \dots, dx_m) (\partial f_i / \partial x_j)$ の形のものである。行列式 $|\partial f_i / \partial x_j|$ はとりもなおさず最初の行列変換のヤコビアンである。

この定理は非線型変換のヤコビアンを計算するとき, 微分の線型変換に直して計算すればよいことを教えるものでたいへん便利である。

$$(A. 5. 7) \quad Y = X^{-1} \quad (X, Y: p \times p \text{ で対称}), \quad J(Y: X) = |X|^{-(p+1)}$$

$$[\text{証明}] \quad dY = -X^{-1}(dX)X^{-1}, \quad J(Y: X) = J(dY: dX) = |X|^{-(p+1)}, \quad [\because (A. 5. 4)]$$

$$(A. 5. 8) \quad V = \tilde{T}' \tilde{T}, \quad (V: p \times p \text{ で対称}, \quad \tilde{T}: p \times p \text{ で三角型}),$$

$$J(V: \tilde{T}) = 2^p \prod_{i=1}^p t_{ii}^{p-i+1}$$

$$[\text{証明}] \quad \text{両辺の微分をとって } dV = \tilde{T}'(d\tilde{T}) + (d\tilde{T})'\tilde{T}. \quad \text{ゆえに (A. 5. 5) により}$$

$$J(V: \tilde{T}) (= J(dV: d\tilde{T})) = 2^p \prod_{i=1}^p t_{ii}^{p-i+1} \quad \text{を得る。} \quad (\text{塩 谷 実})$$

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W.: *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, John Wiley & Sons, 1958.
- 2) Anderson, T.W.: Some optimum confidence bounds for roots of determinantal equations, *Ann. Math. Statist.*, 36 (1965), 468-488.
- 3) Bartlett, M.S.: On the theory of statistical regression. *Proc. Roy. Soc. Edinb.*, 53 (1933), 260-283.
- 4) Bellman, R.: A generalization of some integral identities due to Ingham and Siegel, *Duke Math. Jour.*, 23 (1956), 571-577.
- 5) Bennett, B.M.: Note on a solution of the generalized Behrens-Fisher problem, *Ann. Inst. Stat. Math.*, 2 (1951), 87-90.
- 6) Box, C.E.P.: A general distribution theory for a class of likelihood criteria,

$$J(Z: \tilde{S}) = 2^p, \quad J(Y: Z) = |\tilde{A}|^{p+1} = \prod_{i=1}^p a_{ii}^{p+1} \quad [\because (A.5.4)],$$

$$J(\tilde{S}: \tilde{T}) = 1/J(\tilde{T}: \tilde{S}) = \prod_{i=1}^p a_{ii}^{-i}, \quad \left[t_{ij} = \sum_{\alpha=i}^j s_{i\alpha} a_{\alpha j}, \quad (i \leq j) \text{ を利用} \right]$$

この結果をまとめれば

$$J(Y: \tilde{T}) = \left(\prod_{i=1}^p a_{ii}^{p+1} \right) (2^p) \left(\prod_{i=1}^p a_{ii}^{-i} \right) = 2^p \prod_{i=1}^p a_{ii}^{p-i+1}$$

(A. 5. 6) 行列変換 $Y = f(X)$ が与えられているとき, $dY = df(X)$ は微分 dx_{ij} について線型であり, $J(Y: X) = J(dY: dX)$ である。

【証明】 行列変換は $y_i = f_i(x_1, \dots, x_m)$, $i=1, \dots, m$, と同じで, $dy_i = \sum_{j=1}^m (\partial f_i / \partial x_j) dx_j$ に注意すれば, $dY = df(X)$ は $(dy_1, \dots, dy_m) = (dx_1, \dots, dx_m) (\partial f_i / \partial x_j)$ の形のものである。行列式 $|\partial f_i / \partial x_j|$ はとりもなおさず最初の行列変換のヤコビアンである。

この定理は非線型変換のヤコビアンを計算するとき, 微分の線型変換に直して計算すればよいことを教えるものでたいへん便利である。

$$(A. 5. 7) \quad Y = X^{-1} \quad (X, Y: p \times p \text{ で対称}), \quad J(Y: X) = |X|^{-(p+1)}$$

$$[\text{証明}] \quad dY = -X^{-1}(dX)X^{-1}, \quad J(Y: X) = J(dY: dX) = |X|^{-(p+1)}, \quad [\because (A. 5. 4)]$$

$$(A. 5. 8) \quad V = \tilde{T}' \tilde{T}, \quad (V: p \times p \text{ で対称}, \quad \tilde{T}: p \times p \text{ で三角型}),$$

$$J(V: \tilde{T}) = 2^p \prod_{i=1}^p t_{ii}^{p-i+1}$$

$$[\text{証明}] \quad \text{両辺の微分をとって } dV = \tilde{T}'(d\tilde{T}) + (d\tilde{T})'\tilde{T}. \quad \text{ゆえに (A. 5. 5) により}$$

$$J(V: \tilde{T}) (= J(dV: d\tilde{T})) = 2^p \prod_{i=1}^p t_{ii}^{p-i+1} \quad \text{を得る。} \quad (\text{塩 谷 実})$$

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W.: *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, John Wiley & Sons, 1958.
- 2) Anderson, T.W.: Some optimum confidence bounds for roots of determinantal equations, *Ann. Math. Statist.*, 36 (1965), 468-488.
- 3) Bartlett, M.S.: On the theory of statistical regression. *Proc. Roy. Soc. Edinb.*, 53 (1933), 260-283.
- 4) Bellman, R.: A generalization of some integral identities due to Ingham and Siegel, *Duke Math. Jour.*, 23 (1956), 571-577.
- 5) Bennett, B.M.: Note on a solution of the generalized Behrens-Fisher problem, *Ann. Inst. Stat. Math.*, 2 (1951), 87-90.
- 6) Box, C.E.P.: A general distribution theory for a class of likelihood criteria,

- Biometrika*, 36 (1949), 317-346.
- 7) Cochran, W.G.: The distribution of quadratic forms in a normal system, with applications to the analysis of variance, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 30(1934), 178-191.
 - 8) Cramér, H.: *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton Univ. Press, 1946.
 - 9) David, F.N.: *Tables of the Ordinates and Probability Integral of the Distribution of Correlation Coefficient in Small Samples*, Cambridge Univ. Press, 1938.
 - 10) Deemer, W.L. & Olkin, I.: The Jacobians of certain matrix transformations useful in multivariate analysis; Based on lectures of P.L. Hsu at the University of North Carolina, 1947, *Biometrika*, 38 (1951), 345-367.
 - 11) Foster, F.G. & Rees, D.H.: Upper percentage points of the generalized beta-distribution, I, *Biometrika*, 44 (1957), 237-247.
 - 12) Foster, F.G.: Upper percentage points of the generalized beta-distribution, II, *Biometrika*, 44 (1957), 441-453.
 - 13) Foster, F.G.: Upper percentage points of the generalized beta-distribution, III, *Biometrika*, 45 (1958), 492-503.
 - 14) Fraser, D.A.S.: *Nonparametric Methods in Statistics*, John Wiley & Sons, (1957).
 - 15) 藤原松三郎: 行列及び行列式, 岩波全書, 1964.
 - 16) Heck, D.L.: Charts of some upper percentage points of the distribution of the largest characteristic root, *Ann. Math. Statist.*, 31 (1960), 625-642.
 - 17) Hotelling, H.: The generalization of Student's ratio, *Ann. Math. Statist.*, 2 (1931), 360-378.
 - 18) Hotelling, H.: Relations between two sets of variates, *Biometrika*, 28 (1936), 321-377.
 - 19) Hotelling, H.: A generalized T test and measure of multivariate dispersion, *Proceeding of the 2nd Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Univ. of California Press, Los Angeles and Berkeley, (1951), 23-42.
 - 20) Hotelling, H.: New light on the correlation coefficient and its transforms, *Jour. Roy. Statist. Soc., B.*, 15 (1953), 193-225.
 - 21) Hsu, P.L.: On the power functions for the E^2 -test and the T^2 -test, *Ann. Math. Statist.*, 16 (1945), 278-286.
 - 22) Ito, K.: Asymptotic formulae for the distribution of Hotelling's generalized T_0^2 statistic, *Ann. Math. Statist.*, 27 (1956), 1091-1105.
 - 23) Ito, K.: Asymptotic formulae for the distribution of Hotelling's generalized

- T_0^2 statistic, II, *Ann. Math. Statist.*, 31 (1960), 1148-1153.
- 24) James, A.T.: Distributions of matrix variables and latent roots derived from normal samples, *Ann. Math. Statist.*, 35 (1964), 475-501.
 - 25) James, G.S.: Tests of linear hypotheses in univariate and multivariate analysis when the ratios of the population variances are unknown, *Biometrika*, 41 (1954), 19-43.
 - 26) Kendall, M.G.: *A Course in Multivariate Analysis*, Charles Griffin & Company Limited, London, 1957.
 - 27) Khatri, C.G.: Simultaneous confidence bounds on a set of linear functions of location parameters for dependent and independent normal variates, *Inst. of Stat. Mimeo Series*, No. 417, Univ. of North Carolina, 1964.
 - 28) Khatri, C.G.: A note on the confidence bounds for the characteristic roots of dispersion matrices of normal variates, *Ann. Inst. Statist. Math.*, 17 (1965), 175-183.
 - 29) Lawley, D.N.: A generalization of Fisher's z test, *Biometrika*, 30 (1938), 180-187.
 - 30) Lehmann, E.L.: *Lecture Notes of the Theory of Estimation*, Chap. 2 (1950).
 - 31) Lehmann, E.L.: *Testing Statistical Hypotheses*, John Wiley & Sons, 1959.
 - 32) Lévey, P.: *Calcul des Probabilités*, Paris, 1925.
 - 33) 小川潤次郎: 近代数理統計学序説, 惠文堂, 1962.
 - 34) Olkin, I.: A class of integral identities with matrix argument, *Duke Math. Jour.*, 26 (1959), 207-214.
 - 35) Olkin, I. & Rubin, H.: Multivariate beta distributions and independence properties of the Wishart distribution, *Ann. Math. Statist.*, 35 (1964), 261-269.
 - 36) Pearson, E.S. & Wilks, S.S.: Methods of analysis appropriate for k samples of two variables, *Biometrika*, 25 (1933), 353-378.
 - 37) Pillai, K.C.S.: On the distribution of the largest or the smallest root of a matrix in multivariate analysis, *Biometrika*, 43 (1956), 122-127.
 - 38) Pillai, K.C.S.: *Concise Tables for Statisticians*, The Stat. Center, Univ. of Philippines, Manila, 1957.
 - 39) Pillai, K.C.S. & Samson, P., Jr.: On Hotelling's generalization of T^2 , *Biometrika*, 46 (1959), 160-168.
 - 40) Pillai, K.C.S. & Bantegui, C.G.: On the distribution of the largest of six roots of a matrix in multivariate analysis, *Biometrika*, 46 (1959), 237-240.
 - 41) Pillai, K.C.S. & Mijares, T.A.: On the moments of the trace of a matrix and approximations to its distribution, *Ann. Math. Statist.*, 30 (1959), 1135-

1140.

- 42) Rash, G.: A functional equation for Wishart's distribution, *Ann. Math. Statist.*, 19 (1948), 262-266.
- 43) Roy, S.N.: On a heuristic method of test construction and its use in multivariate analysis, *Ann. Math. Statist.*, 24 (1953), 220-238.
- 44) Roy, S.N. & Bose, R.C.: Simultaneous confidence interval estimation, *Ann. Math. Statist.*, 24 (1953), 513-536.
- 45) Roy, S.N.: *Some Aspects of Multivariate Analysis*, John Wiley & Sons, New York, 1957.
- 46) Scheffe, H.: On solutions of the Behrens-Fisher problem based on the t -distribution, *Ann. Math. Statist.*, 14 (1943), 35-44.
- 47) Siegel, C.L.: Über die analytische Theorie der quadratischen Formen, *Ann. Math.*, 36 (1935), 527-606.
- 48) Simaika, J.B.: On an optimum property of two important statistical tests, *Biometrika*, 32 (1941), 70-80.
- 49) 塩谷 実: Hotelling の T^2 統計量の分布について, 統計数理研究所彙報, 第4巻 (1956), 33-42.
- 50) Siotani, M.: On the distribution of the Hotelling's T^2 -statistics, *Ann. Inst. Stat. Math.*, 8 (1957), 1-14.
- 51) Siotani, M.: Note on the utilization of the generalized Student's ratio in the analysis of variance or dispersion, *Ann. Inst. Statist. Math.*, 9 (1958), 157-171.
- 52) Siotani, M.: The extreme value of the generalized distances of the individual points in the multivariate normal sample, *Ann. Inst. Statist. Math.*, 10 (1959), 183-208.
- 53) Siotani, M.: The extreme value of generalized distances and its applications, *Bulletin of the International Statistical Institute*, 38 (1961), 591-599.
- 54) 塩谷 実: 多変数解析論の最近10年間における歩み, 統計数理研究所彙報, 第8巻第2号 (1961), 95-142.
- 55) 塩谷 実, 早川 毅: Wishart 行列の関数の漸近分布, 統計数理研究所彙報, 第12巻 (1964), 191-198.
- 56) Stein, C.: The admissibility of Hotelling's T^2 -test, *Ann. Math. Statist.*, 27 (1956), 616-623.
- 57) Tsumura, Y.: The distributions of latent roots and vectors, *TRU Mathematics*, 7 (1964), 1-16.
- 58) Wald, A. & Brookner, R.J.: On the distribution of Wilks' statistic for testing independence of several groups of variables, *Ann. Math. Statist.*, 12

- (1941), 137-152.
- 59) Wilks, S.S.: On the independence of k sets of normally distributed statistical variables, *Econometrika*, 3 (1935), 309-326.
- 60) Wilks, S.S.: The large-sample distribution of the likelihood ratio for testing composite hypotheses, *Ann. Math. Statist.*, 9 (1938), 60-62.
- 61) Wilks, S.S.: *Mathematical Statistics*, John Wiley & Sons, 1962.
- 62) Wishart, J.: The generalized product moment distribution in sample from a normal multivariate population, *Biometrika*, 20 (1928), 32-52.

第2編 応 用

第1章 概 論

1・1 多変量解析の認識

多変量解析 (multivariate statistical analysis) とは、実際的には統計理論の全域を包含するもので、独立または種々相関の度合いの異なる、二つ以上の変量による多次元分布法則に基づき、統計的推論を試みようとするものである。

たとえば、 n 個の一変量標本値が独立にかつ同一正規分布に従うと仮定して算術平均の分布を考えること、またその場合の平均値に関する検定で標本平均と標本分散による Student の t 統計量を導入してくることなど、通常の単一変量解析 (univariate statistical analysis) 理論も、多変量解析における卑近な特殊例として考えうる。

一方、自然現象や社会現象に対する構造模型への接近・法則性の追求を鋭く考究すればするほど、現象の多面性にたち返って、数種類の計測特性による統計解析、すなわち多様な計測情報の同時処理が、現実にも最も密着した統計解析理論として必要になってくる。

このように多変量解析は、日常に最もしばしば普遍的に適用されるものであり、通常次の二つの型式で表現されてくる。

1) p 種の異なった変量値で観測された n 個の標本に関し、各観測値は p 次元空間における座標の点として考えられる。すなわち、各点は p 種の変量値の順に、ただ 1 箇所の位置を占める。多変量としての性格は標本数 n に直接関係するものではない。

2) p 種の異なった変量は、互いにその変量間になんらかの関連性（一部分ない場合も含めて）を示し、現象を全体的に考えるときそれらの変量を一つでも無視して捨て去ることはできない。すなわち、これらの変量は必ず同時にともに考慮されねばならない。

さて、このように多変量解析を、関連性のある幾つかの観測特性をもつ資料についての統計解析として述べてきたが、この変量間の関連性について、変量の従属性（dependence）、独立性（independence）および内部従属性（interdependence）の区別をつける。

従属変量とは、ある一つまたはいくつかの変量の値を、当面するある条件で指定するとき、これらの値に対応し決定論的偏差（deterministic deviation）をまたは確率的変動（random fluctuation）を伴って値を定める変量をいう。独立変量とは、他の変量値の如何に関せず、すなわち従属せずに値を定めうる変量をいう。内部従属性とは、従属変量同志の間の関連性をいい、特に選定した変量値に対する関連をさすものではない。最も単純な回帰直線における二つの変量は、従属性（確率変量）と独立性（指定変量）をもつ変量に区別され、また相関係数や因子分析を論ずる際の変量は、内部従属性を示すよい例である。

次に、多変量解析の応用例を若干の学問分野の研究で示す。実際の現象と具体的な問題の所在により、読者が多変量解析の型を吟味するたすけとしたい。

A. 生 物 統 計

古代人の頭蓋骨は、種々の部位の大きさが測定され種族別の統計資料として収集されている。いま、ある地域の土壌から発掘された古代人の頭蓋骨の計測により、そこに棲息していたのはどの種族であったかを決定したい。また、このような調査として、測定する頭蓋骨の部位は通常どれほどであればよいか。

ある年令幅の成人男子の体型を類型化したい。体重・身長など身体各部位を詳しく測定した資料をもとに、どれほどの測定で如何なる体型を定義づければよいか。

B. 環 境 衛 生

各地区の環境衛生条件を羅列し、これらのデータより類型化を試み、各型別

に季節病・風土病を調査する。さらにこれを季節病カレンダーと比較し、各疾病の通性および地区別の特殊性を意義づける。

C. 産 業

毛糸の開発研究には、重要な品質特性の一つに毛糸の風合（ふうあい）という測定困難な特性がある。これを関連する物理・化学的特性の測定値の結合によって推定し、客観的な尺度をつくりえないか。もし可能なら、物理・化学的特性のうちで風合に最も影響・寄与をもたらすものを順にその程度を示せ。

D. 農 業

ある県内で部落別に各種作物の収穫が報告されている。この資料より一般的に生産性という量での比較が可能ならばいかにして求めるか。また各地の地力についても同様に検討し、地力と生産性の関係という見地からバランスがとれているか否か調査せよ。

E. 気 象

心臓発作は梅雨前線の通過と関係が深いことがいわれている。もちろん、心臓発作にはその他の天然現象・人体条件などに多くの要因があるが、これらの影響効果を除外して、前線通過が心臓発作にどの程度の影響をもたらすか。

F. 色 彩

Munsell は色の表現に3要素を提唱しているが、他にも種々の提唱がある。2ないし3種の色を隣り合わせたときの「配色のよさ」に関し、心理学的要素をも加えて、多くの観測値を集め、配色のよさについての法則性を類型化せよ。

G. 経 済 統 計

地域別経済水準を知るために、地域別収支、産業別生産高、スケール別企業数、労働人口、失業者数、手形交換高、金利率、等々が詳しく調べられている。これらを結合して経済水準を示す一般指数が得られないか。また、これに個人平均賃金、電話の有無、家賃、自家用車数などを付加して民力の指数が得られないか。もしこのような指数が得られるとすれば、それはどのような客観的意味をもつか。また地域・個人を社会的・経済的階層に類型化するには如何

にすればよい。

H. OR

地域別に、薬局を類型化し、薬品の供給ルートを検討したい。いま、薬局の規模、立地環境条件、薬種分類別販売高、化粧品その他保健日用品の販売高、総月商、占拠している地区面積、広告方法などに関する資料をもとに、いかに類型化すればよい。

I. 教育心理

児童の知能試験結果を総合得点で評価し、これを指数化する。知能指数としてどのような正当な意味をもっているか。またこの試験に含まれる諸種能力に分解して評価する方法を客観的な公式で示せ。

J. 文学

源氏物語 54 帖のうち、最終 1 帖は筆者が異なるのではないかという疑問がある。元来、筆者には独自の用語・用法があるとすると、用語用法について、53 帖と最終 1 帖の間の有意差の検定を行ない、筆者の相違に関する吟味ができよう。また第 1 帖より 53 帖までで、筆者の年代順作風を比較せよ。

明治・大正期の著名作家の作品より文章の構成・文体・用語・用法を無作為抽出で観測し、作家および作品の特徴を検討せよ。また、これを類型化するにはどうすればよい。

K. 医学

本態性高血圧症を状態像によっていくつかの型に類別したい。過去のカルテを集めて、どのような症状の組み合わせ（プロフィール）によっていくつかの類型化ができるか。A 地区と B 地区の同年代の高血圧症患者群がある。諸症状の上で両者に差異が認められるか否か。

ある衛生管理された工場での成年男子の普通感冒は、初診時、23 種の臨床検査によってどのような状態像分類が行なえるか。また、治療の過程で状態像から他の状態像への遷移はどうか。また治癒に至る状態像はどれどれか。

全国の主要大学病院におけるバセドウ氏病治療群のカルテによって、甲状腺重量、眼球突出の有無、既往歴などを加案したアイソトープの標準投与量の適

量推定式を求め、できればモノグラフ化したい。

ウツ症状患者の診断に利用される患者用および看護者用の rating scale (評価票) が作成されている。古今東西の文献から有益な設問をとり集め、完備かつ集約したものになりたい。この数多くの設問を実際観測した結果より、いかに減じ整理していくべきか。また各設問は、精神因子をいかなどの割合で含むものか。評価票は、いかなる精神因子を探り出し得、また反復観察の必要上、これら数多くの設問から適当に設問を取捨選択し、各精神因子を含み、しかも同等な数種の評価票をつくりえないか。

ある新型コーチゾンが合成された。この物質はどのような症状プロフィールのリューマチ患者に有効であろうか。あらかじめ多数病院のカルテから、リューマチ患者のプロフィールを類型化したい。またこの新物質が有効な患者のプロフィールの上で、従来品といかなる反応効果面で差異が認められるか。

1・2 多変量解析法の型

多変量解析で最もよく知られている方法は、いずれもいくつかの変量間の関連性について解明しようとする、相関分析 (multiple correlation analysis) および回帰分析 (multiple regression analysis) であろう。

相関分析は、各変量を全く平等に内部従属の変量として、これら変量間の線型性またはある関数関係性の深さを評価する立場をとる。すなわち、任意の2変量間の線型性には単相関、ある1変量に及ぼす他の全変量の線型効果の度合には重相関または寄与率、特定の2変量について残りの変量効果を固定し除去したときの線型性を偏相関とよび、それぞれの係数が定義されている。また非線型関数関係には相関比が役だてられる。またこのような相関性にに基づき、ある1変量の値を他の全変量から推測するために偏回帰平面がとりあげられ、重相関係数をこの推測の精度を示す指数とも考える。もちろん、これらの母数の推定や、統計量により母数値に関する有意性の検定がなされる。おそらく、諸科学の上で多変量解析を進めようとするほとんどの研究者にとって、自身の統計資料をまずこのような検討から開始するのが常法であろう。第4章はこれ

らの解析法を説明し、4・5の応用例以外にも、2・7で異なった立場での考え方の例を示している。

一方、回帰分析は諸変量を独立変量と従属変量に区別し、前者の上の後者に関する線型関係式を推測する立場をとっている。統計解析の理論は、推測される従属変量値がスカラーでもベクトルでも支障ないが、ベクトルの各要素を係数のみ異なる同じ形の線型構造式で表現することの制約から通常、従属変量をスカラーとして個々に模型式をあてはめている。たとえば4年生の学童に関する7種の知能試験成績より上級学校初年度の総合成績順位を推測する場合などがある。

また回帰論に基本的に含まれるのであるが、分散共分散分析法 (analysis of variance covariance) も自然科学・社会科学の分野で、過去のデータの解析や実験の計画に、ごく自然に考慮されてくる解析法であろう。この方法は各属性 (attribute) 別に回帰を考えることになるが、共通している要因や誤差変動に関する情報を利用し、精度よい推定・検定が行なえる利点をもつ。たとえば工場における品質管理の分野では、ある工程の化学反応機の型 (属性) と副原料濃度との収率に及ぼす影響などの検討にしばしば適用される。しかし、この手法は、各要因を変量にわりつけることにより、全く回帰論、ときに偏相関の考え方に含まれ同様の解析法に帰せられる。第5章は回帰論一般を記し、例として薬剤の投与量を患者の症状・条件により薬用量を算定する、いわゆる、標準用量式の問題をあげたが、これはむしろ共分散分析の形式で解きうる例であろう。

次によく知られている多変量解析は、判別関数法 (statistical discriminant analysis) であろう。この方法は、数種の観測特性を変量とする、いくつかの母集団 (またはカテゴリー) に関し、それぞれ既往の資料が得られたとき、この資料をもとに、新たに観測した個体、または集団が、さっきのどの母集団に帰属するものであるかを判別する。そしてこの判別関数に基づいたとき、誤った判別が下される確率も与えられる。観測される諸症状や臨床検査によって病名を判別する、いわゆる臨床診断機はこの理論に基づくものであり、この医学

分野では判別式による誤診率をいっそう小さくするような観測項目や方法が研究の対象とされている。

この解析には、まず既往の統計資料で、とりあげられた多変量の観点から、各母集団が互いに有意な差異を認めうるものであるか否かの検定が重要である。また事後的に、判別された個体や集団がその母集団を代表していると認めうるか否かという検定も試みられよう。事実、正確な判別の背景として、母集団わけの妥当性が、多変量の観点から、あらためて検討の対象となることも多い。第3章は、判別関数の一般的な作り方、および正規分布の場合を説明し、応用例は一つの考え方として来診患者に有効な薬剤の選択問題をあげている。

近年、心理学をはじめ、精神医学、その他の分野で、現象の類型化や構造分析に頻繁に活用されている、成因分析・因子分析 (component analysis, factor analysis) とよばれる多変量解析の方法がある。心理学者の発想動機としては、種々の心理テストの成績の間には、体系的な内部従属性を当然含んでいて、この内部従属因子を追求することから始まった。そして各テストに包含される一連の因子を探り出し、テストの数よりも次元数を減じ、次に心理学的な解釈・意義づけをより容易にするため、次元の軸を回転するという方法を開発してきた。

解析法は、まず内部従属変数の間のすべての相関係数を算出することから出発し、この相関行列の固有値 (非負) を大きい順に求め、かつ対応する基準化した固有ベクトルを算出する。この計算方法は、通常の変換法としてパワー法 (power method) やこれを加速した (accelerated) 方法など電子計算機によることが多い。手動計算には、セントロイド法 (centroid method) が頻々用いられている。得られた固有ベクトルのうちから、固有値の大きさ順に、意義の考えうる若干個を選び出す。しかしこの段階では各ベクトル要素の値の大きさにより、諸科学分野で直ちに具体的意義づけすることはむずかしく、解釈づけやすい位置に因子を回転することが通常は必要となる。この回転法として、直交法ではバリマックス法 (Varimax method)、クァーチマックス法

(Quartimax method), 斜交法ではコバリミン法 (Covarimin method), オブリマックス法 (Oblimax method), オブリミン法 (Oblimin method) などが開発されている。第2章はこれら因子分析の諸法を解説し、一応用としてウツ症状患者の状態像の類型化問題に関する文献例をあげている。

さて、ここでとくに計算プログラミングについて付記する。

多変量解析の実施は、当然高次元のベクトル・行列演算を行なうことになり、莫大な計算量をかかえこみがちである。また一方、現実の事象を、実は不完全規定の数学模型から出発し、反復試行により逐次近似的に現象の構造を追求する方法論をとるのであるから、多変量解析の諸方法は、他の実験科学におけると同様、目的・意図に応じ、適宜選択し修正されながら、試行解析を反復することになる。

この二つの理由から、高度の計算速度と精度が要請され、近年まで多変量解析が比較的敬遠されてきた所以でもあろう。しかし、いまや電子計算機の利用は、各地で容易で、常識となってきた。本稿では、多くの計算機に共通性をもって適用される FORTRAN STATEMENT で主要な計算プログラミングを示している。これらの計算プログラミングは、すべてシオノギ解析センターの作成で、かなり簡潔にまとめられていると思われる。読者の参考用として便宜を供すれば幸いである。

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W.: Introduction to multivariate statistical analysis (1958), John Wiley & Sons.
- 2) Bartlett, M.S.: Multivariate analysis, *J. Roy. Statist. Soc., B*, 9 (1947), 176.
- 3) Cochran, W.G.: The comparison of different scales of measurements for experimental results. *Ann. Math. Statist.*, 14 (1943), 205.
- 4) Cooley, W.W. and Lohnes, P.R.: Multivariate procedures for the behavioral sciences, John Wiley & Sons (1962).
- 5) Fisher, R.A.: The use of multiple measurements in taxonomic problems.

Ann. Eugen. Lond., 7 (1936), 179.

- 6) Fisher, R.A.: The statistical utilization of multiple measurements. *Ann. Eugen. Lond.*, 5 (1938), 376.
- 7) Jones, K.J.: The multivariate statistical analysis, Harvard Cooperative Society (1964).
- 8) Kendall, M.G.: A course in multivariate analysis, Charles Griffin and Co., (1957).
- 9) Kullback, S.: Information theory and statistics (1959), John Wiley & Sons.
- 10) McNemar, Q.: Psychological statistics (1962), John Wiley & Sons.
- 11) Rao, C.R.: Advanced statistical methods in biometric research (1952), John Wiley & Sons.
- 12) Seal, H.L.: Multivariate statistical analysis for biologists (1964), Methuen & Co., 塩谷実訳: 多変量解析入門, 共立出版 (1970)

第2章 因子分析法

2・1 概 要

因子分析法 (factor analysis) は、数種類の観測変量間の内部従属性を詳しく解明する目的で開発されてきた。たとえば、児童の知能を調査する目的で数種の知能テストが行なわれ採点される。しかし、この一つ一つの成績は、計数能力、読解力、推理力、直観力、記憶力、注意力などの重みこそ異なれ、それらの複合した力に、そのときの調子による変動が確率誤差として付加して、観測されたものである。このように考えると、一連のテスト成績自体よりも、むしろ成績をいろいろと組み合わせて上記のような各能力がそれぞれいかにあるかを知るほうが望ましい場合がある。またそれ以前にテスト自体が上記諸能力を知る上で十分な問題を集めているか否かが基本的な問題になってくる。また一連のテストを固定して考えれば、この成績は上記のなかのいかなる能力を見つけうるものであろうか。さらに個々のテストの中に含まれる各能力の配分割合を吟味することにより、テスト数を増減する可能性や、また考察している能力以外に各児童の特殊能力の有無・その種類も追求されてくる。同様な例は医学の神経科領域で精神分裂症・うつ病・ノイローゼなどで患者の精神・身体状態の病態像を左右する内因因子を探索する上で、また内科領域で臨床検査に基づき本態性高血圧症の状態像を識別し、これにより起因を類推することなども可能となろう。OR の一例では、多品目を販売している企業で、多品目の販売高を能力テストの成績反応とすれば、販売員の能力・個性が解明でき、企業に有利な教育・配置・分担を考えることもできよう。

すなわち、因子分析法の第一の立場は、数種の観測特性（変量）の中に含まれる共通な内因的因子の数を推測し、同時に大約の意味づけを考えよう（成分分析, component analysis) とすることであり、第二は、変量間の内部従属性を利用し、変量の数よりも小さいある次元に減じたときの、各共通因子を積

極的に意義づけよう（因子分析, factor analysis）とする立場である。そして最終的な目的は変量の張る多次元領域を、より少ない基本的な次元で意義づけしうる因子を追究することである。この“構造追求”の仕事は、通常、主成分分析（principal component analysis）の考え方を反復することにより、まず参考軸（reference axis）を逐次つくり出す成分分析（component analysis）を実施し、共通因子数と大約の意義を考察する。次いで実質科学分野からの考察をも加え、共通因子の数を決めて因子分析（factor analysis）を行なう。この結果より、最終的に共通因子の厳密な解釈を定義づけるため、参考軸を種々に直交または斜交回転して共通因子を最も解釈しやすいように変換する。もちろん、この過程で新たに得た参考軸より共通因子の数と意味および観測変量の適否が吟味されて、解析は成分分析と因子分析の間を数回往復させるわけである。このように成分分析と因子分析は、表裏のように繰り返されるものであるが、この手順を総称してまた単に因子分析とよんでいる。

2.2 主成分分析と成分分析

いま p 種の変量をもつ n 個の観測値 $x'_j = (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{pj})$, ($j=1, 2, \dots, n$), が得られ、各 x_{ij} は次のようにすべての i について基準化されているとする。

$$\sum_{j=1}^n x_{ij} = 0, \quad \sum_{j=1}^n \frac{x_{ij}^2}{n} = 1 \quad (2.1)$$

したがって、任意の i と i' の標本共分散は、標本相関係数と同じで

$$\text{Cov}(x_{ij}, x_{i'j}) = r_{ii'} = \sum_{j=1}^n \frac{x_{ij}x_{i'j}}{n}, \quad i, i' = 1, 2, \dots, p \quad (2.2)$$

で示され、この標本相関行列を R とする。

さて、成分分析の目的は、これら p 種の変量に含まれる共通な因子を求めようとするのであるが、これらの因子は p 種の変量の一次結合で表現されることを仮定し、次のようにおく。

$$\zeta_j = A x_j, \quad (j=1, 2, \dots, n) \quad (2.3)$$

そして、この $p \times p$ の係数行列 A について、因子ベクトル ζ_j の次元数 p を

$q \leq p$ なる q 次の互いに独立な因子で表現できないかをしらべる。事実、 p 個の変量が $p-q$ 次の従属性をもつならば、 ξ_j のランク (rank) は q であり、これは A の行ベクトルを互いに直交するように求めればよい。

さて、各因子について、 p 個の変量のどのような一次結合を当てはめるか、すなわちどのような基準 (criterion) で直交行ベクトルをもつ行列 A を求めていくかが問題となる。ここに主成分分析の考え方が適用される。

A. 主成分分析

いま、観測値ベクトル \mathbf{x}_j を p 次元空間における座標点を示すと考えると、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ はこの空間中の n 個の点であり、この点群を代表する p 次元の 1 本の直線を考え、これを一般的に次式で示そう。

$$\frac{X_1 - m_1}{l_1} = \frac{X_2 - m_2}{l_2} = \dots = \frac{X_p - m_p}{l_p}, \quad \sum_{i=1}^p l_i^2 = 1 \quad (2.4)$$

さて、 n 個の点よりこの直線に至る距離の偏差平方和を nS とすると、

$$nS = \sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=1}^p (x_{ij} - m_i)^2 - \left\{ \sum_{i=1}^p l_i (x_{ij} - m_i) \right\}^2 \right] \quad (2.5)$$

であり、これを最小にするような直線、すなわち、最小 2 乗法で当てはめられる直線を好ましい代表として考え、式 (2.4) の m_i および l_i を求める。 nS が最小値をもつことは明らかで、まず m_i で偏微分し次式を得る。

$$-\sum_{j=1}^n (x_{ij} - m_i) + \sum_j l_i \sum_{i'=1}^p l_{i'} (x_{i'j} - m_{i'}) = 0, \quad i=1, 2, \dots, p \quad (2.6)$$

x_{ij} は基準化されているから、上式より $m_i/l_i = \text{一定}$ となり、直線は原点を通ることが知れる。したがって、直線が通る一点を原点として、一般性を失わず、 $m_1 = m_2 = \dots = m_p = 0$ とする。また $\sum l_i^2 = 1$ の条件下で S を最小にする l_i は、ラグランジュの乗数 (Lagrange's multiplier) λ を用い、 l_i で偏微分後、次式をうる。

$$\frac{1}{n} \sum_j x_{ij} \left(\sum_{i'} l_{i'} x_{i'j} \right) - \lambda l_i = 0, \quad i=1, 2, \dots, p \quad (2.7)$$

この p 個の連立方程式は、そのまま

$$(R - \lambda I)L = 0 \quad (2.8)$$

で示され、 \mathbf{R} に関して、 λ は固有値 ($\lambda \geq 0$)、 \mathbf{L} は対応する固有ベクトルとなっている。また、このような λ について、式 (2.5) と (2.7) の関係より nS の大きさは次式で示される。

$$nS = n(p - \lambda) \quad (2.9)$$

したがって、 λ に関する固有多項式の p 個の解の中より、 nS を最小ならしめる最大の解 λ_1 を選び、これに対応する基準化 $\left(\sum_{i=1}^p l_{1i}^2 = 1 \right)$ された固有ベクトルを \mathbf{L}_1 とし p 次元空間の原点を通り勾配係数を $\mathbf{L}'_1 = (l_{11}, l_{12}, \dots, l_{1p})$ とする1本の直線が確立する。このような直線 $\mathbf{L}'_1 \mathbf{x}$ で示される因子を S に関する主成因子 (principal component) といい、解析法を主成分分析法という。先述の \mathbf{A} の第1行は、この \mathbf{L}'_1 で示されるものである。

B. 成 因 分 析

\mathbf{C} の第1因子は、主成因子として求められたが、第2因子以下についても全く同様の考え方を適用する。すなわち、第1因子に1本の p 次元直線を当てはめた後、この直線の回りには、なお $p - \lambda_1$ だけの標本分散が第2因子以下未解釈の分として残っている。この残差分散を最小にしかつ先の直線に直交するような第2本目の p 次元直線を求める。この直線の勾配を \mathbf{A} の第2行とし、 \mathbf{C} の第2因子を考える。第3の因子は、第1、第2の直線を当てはめた後、なお残っている標本分散を最小ならしめ、かつこれまでのいずれの直線にも直交する第3の直線を求め、その勾配により決定する。このように逐次 p 本の直線を当てはめて、第 p 番目の因子まで、それぞれの直線の勾配係数ベクトルで考察する。

解析法は、 \mathbf{R} における固有値・固有ベクトル、式 (2.8) から直接考えられる。いま、 p 個の固有値を大きさの順に $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_p$ とおく。 \mathbf{R} のトレース (trace) は p であるから

$$p = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p \quad (2.10)$$

はすぐわかる。また $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ に対応する固有ベクトル $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \dots, \mathbf{L}_p$ は互いに直交している。すなわち、 $i \neq j$ として、 $(\mathbf{R} - \lambda_i \mathbf{I}) \mathbf{L}_i = \mathbf{O}$ および $(\mathbf{R} - \lambda_j \mathbf{I}) \mathbf{L}_j = \mathbf{O}$ の左辺からそれぞれ $\mathbf{L}'_j, \mathbf{L}'_i$ をかけスカラーをつくり、辺々相

引くと

$$(\lambda_i - \lambda_j) \mathbf{L}'_j \mathbf{L}_i = 0 \quad (2.11)$$

を得、 $\lambda_i \neq \lambda_j$ で各ベクトルは互いに直交していることがわかる。

まず、第2因子に関して、 λ_2, \mathbf{L}_2 も、式(2.5)を最小にするための、式(2.6)と(2.8)を満たし、原点を通過し、かつ \mathbf{L}_2 は \mathbf{L}_1 と直交する。すなわち、 \mathbf{L}_2 を係数とし原点を通る直線は、 λ_2 が λ_1 に次いで大きい固有値なので、 $p - \lambda_2$ は第2に小さい残差分散を示す。したがって、このような第2の直線を第1の直線の後に選ぶと、残差分散は $(p - \lambda_1) - \lambda_2$ となり、 \mathbf{L}_1 と直交する直線群の中で最も望ましいものとなる。同様に、第3の因子以降についても $\lambda_3, \mathbf{L}_3, \lambda_4, \mathbf{L}_4, \dots, \lambda_p, \mathbf{L}_p$ が、各段階で主成分因子となり、順次 ζ の要素を説明するものとして採択される。このようにして得られた ζ の各因子間の共分散は、 \mathbf{L} 間の直交性より、ゼロで統計的に無相関となっている。

相関行列 \mathbf{R} が非正則 (singular) で p より小さなランク q であるとき、 $p - q$ 個の λ はゼロとなるが、 ζ の中で対応する $p - q$ 個の固有ベクトルによる因子は、この分析で意味をもたず不要となる。また固有値が重根をもつ場合、 nS を最小に解釈する因子は不足となるが、各変量値の連続性のもとで、このような確率は理論的にはゼロである。また、行列 \mathbf{R} の非負定符号性 (non-negative definite) より、すべての固有値は非負の実数値である。

このように、ベクトル ζ の p 個の因子が算出され、データ全体の分散 p は p 個の因子による $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p$ でつぎてしまう。しかし、観測値ベクトルの次元 p を減ずる元来の目的からは、固有値の大きい因子から順に科学分野で意義の求めやすい若干 (q とする) 個をとりあげ、他は残差誤差のように取り扱う。また、 ε を 0.2 とか 0.25 のように 1 より小さい適度の正数として、形式的に当初の総分散の 75~80% の分散について解釈をくだせるように

$$\sum_{i=1}^q \frac{\lambda_i}{p} \doteq 1 - \varepsilon$$

となる q 個、または $\{\lambda_i\}$ の中で $+1$ より大きい q 個の因子だけをとりあげることが行なわれている。このようにして、因子の数 q を実質科学分野の意義

づけとともに考察するのが成因分析法である。

C. セントロイド法 (centroid method, 重心法)

因子分析法の起源で、心理学者は固有値・固有ベクトルの算出法を、数学的な手順のめんどうさを選んで直観的に追求し、セントロイド法を提唱した。現在でも、電子計算機を利用しない場合に、この方法が適用される所以である。したがってこの方法は厳密な妥当性を欠くので、条件が許せば、適用しないほうが望ましい。しかし、本節では、科学の諸分野でのかなりの頻用とある種の技巧および今後の開発に備え記述しておく。

前節 2.2 では、 x_{ij} について p 次元空間における n 個の点としたが、一方、 n 次元空間における p 個の点とも考えうる。事実、 p 個の点は n 次元空間の中に p 次元空間を、あたかも洋傘の骨のように張っていると考えると、骨の長さは各変量の分散に比例し、骨間の角度の cosine は相関係数に相当している。いま、 x_{ij} の分散を 1、平均を 0 としているから、 p 個の点は原点から放射している p 個の単位ベクトルの先端と考えうる。この p 個の点の、ある第 i 番めの先端 (点) の第 j 軸 (骨) 上の座標を y_{ij} とすると

$$\sum_{j=1}^p y_{ij}^2 = 1, \quad r_{ij} = \sum_{i=1}^p y_{i1} y_{ij} \quad (2.12)$$

であり、 p 個の点のセントロイド (centroid) は次式の $y_{\cdot j}$ で示される。

$$y_{\cdot j} = \sum_{i=1}^p \frac{y_{ij}}{p}, \quad (j=1, 2, \dots, p) \quad (2.13)$$

さらに、次の $r_{\cdot j}$, $a_j^{(k)}$ および $T^{(k)}$ を定義する。

$$r_{\cdot j} \equiv \sum_{i=1}^p \frac{r_{ij}}{p} = \sum_{i=1}^p y_{\cdot 1} y_{ij}, \quad a_j^{(k)} \equiv p \sum_{i=1}^p y_{\cdot 1} y_{ij} \quad (2.14)$$

$$T^{(k)} \equiv \sum_{j=1}^p a_j^{(k)} \quad (2.15)$$

さて、このセントロイドを通り、第 1 番 ($k=1$) 目の軸に平行な直線上では、 $k=2, 3, \dots, p$ の $y_{\cdot k}$ はゼロで

$$a_j^{(1)} = p y_{\cdot 1} y_{j1}, \quad T^{(1)} = p^2 y_{\cdot 1}^2 \quad (2.16)$$

と書ける。これは、また $y_{\cdot 1} = \sqrt{T^{(1)}}/p$ および $y_{j1} = a_j^{(1)}/\sqrt{T^{(1)}}$ と変形され

る。このようにして、第1因子は、相関行列 \mathbf{R} の中で、 $a_j^{(1)}/\sqrt{T^{(1)}}$ に比例する変量より成立していることがわかる。ここで主成分分析におけるように、各係数の2乗和を1に基準化すると、セントロイド法による第1因子は次式で示される。

$$\zeta_1 = (a_1^{(1)}, a_2^{(1)}, \dots, a_p^{(1)}) \cdot \frac{\mathbf{x}}{\sqrt{T^{(1)}}} \quad (2.17)$$

この一次式の分散は $\sum_{j,l=1}^p a_j^{(1)} a_l^{(1)} r_{jl} / T^{(1)}$ であることが容易にわかる。

同様の方法で第2因子を抽出するには、さきのセントロイドを計算し直すことから始めねばならない。ここに、主観的な判断が介入し、この改良はまだ決定的でない。通常、第2因子を求めるには、 $k=1$ として進められてきた上記の計算を $k=2, 3, \dots, p$ についても行ない、 $(a_j^{(k)})$ なる $p \times p$ 行列を準備する。そして \mathbf{R} の中から第1因子による寄与を除き、残差相関行列として

$$\mathbf{R} - (a_j^{(k)}) \equiv \mathbf{R}_1$$

をつくる。かつ、 \mathbf{R}_1 の中の負の要素については、その変量軸 (x) に関しベクトルを逆映 (reflect) し、行および列の符号を変え、 $pr_{.j}$ に相当する各列の和をできるだけ大きくしなければならない。すなわち、 \mathbf{R}_1 のままでは、すべての列の和はゼロとなっているので、新たなセントロイドをできるだけ原点から遠ざけて第2の一次式を求めようとする。これは、ちょうど、成囚分析法で λ_i を大きい順に算出するのに類似した発想である。この \mathbf{R}_1 を用いて、式 (2.14) から (2.17) を繰り返して適用し、式 (2.17) で得られるものを第2因子 ζ_2 とする。ただし、因子の抽出後は、符号変換した変量についてもとの符号にもどして $a_j^{(k)}$ の符号を定義する。以下、第3因子から第 p 因子まで、第2因子を求めたと全く同様の手順により、残差相関行列の中で符号をいかに変えても、各列和が誤差範囲でゼロとみなせるまで、因子抽出を行なう。このようにセントロイド法は、きわめて便宜的な方法であるが、一方、観測変量の分散に関しては、考慮を払わない。

2.3 因子分析 (factor analysis)

A. 因子分析の解法

成因分析では、観測値から出発し、変量の次元を減じ、いくつかの成因因子を求め、それに科学分野における意味づけを与えようとする。すなわち、データから仮説的な構造模型を探索する方向の仕事であった。本節の因子分析は、さきと逆方向で、仮説的な構造から出発し、データと合致しているか否か、合致していれば模型式の中の母数を推定するという解析法である。

実際的には、まずデータから出発して構造模型を調べ、構造が定まれば、これを別のデータについて因子分析して構造模型を比較する。通常は、当初の模型ではいくつかの因子について良く当てはまらず、異なった別の因子を含めるような修正がなされる。この模型をさらに他のデータと比較する。このように試行錯誤の反復は、単にこの分析法にとどまらず、一般の科学分野で広く行なわれていることである。

いま、 p 次の観測値ベクトル x_j が次の一般の構造模型

$$x_j = A f_j + b s_j + c e_j, \quad j=1, 2, \dots, n \quad (2.18)$$

をもつ場合について考察しよう。ここに f は、その要素が $(p \times 1)$ ベクトル x の二つ以上の要素に含まれる、共通因子 (common factor) から成る $(q \times 1)$ ベクトル、 A は $(p \times q)$ の因子負荷行列 (factor loading matrix, factor coefficient matrix, factor pattern)、 s は $(p \times 1)$ 特殊因子ベクトル (specific factor vector, unique factor vector)、 e は $(p \times 1)$ 不信頼因子ベクトル (unreliability factor vector) として誤差項 (error term) を示している。 $(q \leq p)$ とくに共通因子のうち、すべての変数に含まれるものを全般因子 (general factor)、変数のすべてではないが二つ以上に含まれるものを点在因子 (group factor) とよんでいる。また第 j 番めの λ について实际的に得られた f_j をその λ についての因子評点ベクトル (factor score vector) という。かつ f, s および e のすべての要素は、いずれも独立で平均がゼロ、分散が1に変換されているとする。かつ b と c は、それぞれ s と e に関する係数

だけを要素とする $(p \times p)$ 対角線行列を示している。このとき、 \mathbf{x} の分散共分散行列は

$$E(\mathbf{x}\mathbf{x}') = \mathbf{A}\mathbf{A}' + \mathbf{b}\mathbf{b}' + \mathbf{c}\mathbf{c}' \quad (2.19)$$

で示され、母相関行列の要素 ρ_{ij} として

$$\rho_{ij} = \sum_{k=1}^q a_{ik}a_{jk}, \quad i \neq j \quad (2.20)$$

$$= \sum_{k=1}^q a_{ik}^2 + b_i^2 + c_i^2 = 1, \quad i = j \quad (2.21)$$

が得られる。ここに c_i^2 を不信頼性 (unreliability) または誤差分散 (error variance), b_i^2 を特殊性 (specificity), $\sum_{k=1}^q a_{ik}^2$ を共有性 (communality), また

$$h_i^2 \equiv \sum_{k=1}^q a_{ik}^2 \quad (2.22)$$

とにおいて、 $1 - h_i^2$ を唯一性 (uniqueness), $h_i^2 + b_i^2$ を信頼性 (reliability) とよんでいる。

自然科学では繰り返し実験が多くの場合に可能で、誤差分散、すなわち不信頼性が得られて望ましい。しかし、社会科学の分野では不可能で、因子分析は共有性に関する因子を推測することが主目的となる。一般の構造模型から因子負荷行列を求めるのは困難であり、特殊因子を省いた次式

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{A}\mathbf{f}_j + \mathbf{c}\mathbf{e}_j \quad (2.23)$$

について考察する。

〔第1法〕 共有性 h_i^2 は、 \mathbf{x} の第 i 変量に寄与する共通因子 f_1, f_2, \dots, f_q の係数の平方和であるが、 a_{ik}^2 は h_i^2 における f_k の寄与を示している。そして全体の共有性 $\sum_{i=1}^p h_i^2$ に対する f_k の総寄与は $\sum_{i=1}^p a_{ik}^2$ である。いま、式 (2.20) の条件下で、この f_k の総寄与を最大ならしめる、すなわち、 \mathbf{a}_k を \mathbf{A} の第 k 列ベクトル、 μ_{ij} をラグランジュの乗数とすると、次式

$$2T_k \equiv \mathbf{a}_k' \mathbf{a}_k - \sum_{i,j=1}^p \mu_{ij} \rho_{ij}, \quad k=1, 2, \dots, q \quad (2.24)$$

を最大ならしめるような係数 a_{ik} を推定するのが妥当で望ましいと考える。こ

れは、すべての係数について $(p+1)p/2$ 個の、式 (2.20) の条件のもとで \mathbf{a}_k の各要素を求めることにはかならない。さて、 $2T_k$ を a_{ik} で偏微分した式をゼロとおくと、 $i=1, 2, \dots, p$ について

$$(\mathbf{I} - \boldsymbol{\mu})\mathbf{a}_k = \mathbf{0}, \quad k=1, 2, \dots, q \quad (2.25)$$

をうる。ここに \mathbf{I} は $p \times p$ 単位行列、 $\boldsymbol{\mu}$ は μ_{ij} から成る行列、 $\mathbf{0}$ は p 次のゼロベクトルである。式 (2.20) の ρ_{ij} を r_{ij} に置き替え、式 (2.25) を解く。 \mathbf{R} の固有値 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_p$ を対角線行列 \mathbf{A} 、対応する基準化した固有ベクトルから成る行列を \mathbf{L} とおくと

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{1/2} \mathbf{L} \quad (2.26)$$

が得られる。結果はあらかじめ $q (\leq p)$ を指定して \mathbf{R} を成因分析にかけ、 \mathbf{A} および \mathbf{L} を得れば、上式により因子分析における負荷因子行列が求められ、したがって h_i^2 も得られる。

[第2法] \mathbf{x} が p 次元正規分布することを仮定すると、標本分散共分散行列 \mathbf{D} の要素はウィシャート (Wishart) 分布する。このような尤度関数より \mathbf{A} の最尤推定を考えていく。

いま構造模型式 $\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{f} + \mathbf{c}$ で、 \mathbf{A} を $p \times q$ の因子負荷行列とすると、母分散共分散行列 \mathbf{B} は、

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{A}' + \mathbf{V} \quad (2.27)$$

で示され、 \mathbf{V} は p 個の変量の分散 v_i のみの対角線行列である。ここで v_i の値が既知なら $q < p$ 、未知なら $(p+q) < (p-q)^2$ が必要である。

さて最尤法により、母数 \mathbf{A} と \mathbf{V} の一致充足推定量をうるために、対数尤度関数 \mathcal{L} (観測値の関数部分を略し)

$$\mathcal{L} = -(n-1) \{ \log_e |\mathbf{B}| + \text{tr}(\mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}) \} / 2 \quad (2.28)$$

を \mathbf{A} と \mathbf{V} の要素で偏微分してゼロとおき、母数に関する連立正規方程式を解く。しかしこの解は \mathbf{A} 、 \mathbf{V} のあからさまな形にはならず

$$\mathbf{u}' \equiv \hat{\mathbf{A}}' \hat{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{D} - \hat{\mathbf{A}}' \quad (2.29)$$

とおくとき、次の \mathbf{J} は対角線行列で

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{u}' \hat{\mathbf{V}}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \quad (2.30)$$

$$\hat{\mathbf{A}}' = \mathbf{J}^{-1} \mathbf{u}' \quad (2.31)$$

を同時に満足する $\hat{\mathbf{A}}$ と $\hat{\mathbf{V}}$ が求める推定量である。数値解は、常法に従って、反復近似計算法による。まず第1近似の $\hat{\mathbf{A}}_{(1)}$, $\hat{\mathbf{V}}_{(1)}$ を与え、式(2.29)より $\mathbf{u}'_{(1)}$ を求め、式(2.30)より $\mathbf{J}^2_{(1)}$ を得、その後、式(2.31)より $\hat{\mathbf{A}}'_{(2)}$ を、また $\hat{\mathbf{V}}_{(2)}$ は対角線要素 $\hat{v}_i = d_{ii} - \sum_{r=1}^q a^2_{ir}$ によって、 $\hat{\mathbf{A}}_{(2)}$, $\hat{\mathbf{V}}_{(2)}$ を求める。ここに d_{ii} は \mathbf{D} の (i, i) 対角要素である。以下同様の手順を反復し、 $\hat{\mathbf{A}}_{(r)}$ と $\hat{\mathbf{V}}_{(r)}$ が十分小さな変動以下に収斂した段階で \mathbf{A} , \mathbf{V} の推定値を決定する。

B. 共通因子数に関する仮説検定

観測値の数 n が比較的大きいとき、共通因子数が q であるという仮説 H_0 の検定を考えよう。

もし、仮説 H_0 が真であれば、式(2.30), (2.31) から得られる、 $\hat{\mathbf{A}}$ と $\hat{\mathbf{V}}$ を式(2.27)に当てはめた $\hat{\mathbf{B}}$ は \mathbf{B} の最良推定量であり、対数尤度関数、式(2.28)は

$$L_0 = -(n-1) \{ \log_e |\hat{\mathbf{B}}| + \text{tr}(\mathbf{D}\hat{\mathbf{B}}^{-1}) \} / 2 \quad (2.32)$$

となる。他方、 \mathbf{x} の正規性以外に \mathbf{B} についていずれも仮説をたてない場合の対数尤度関数は

$$L_1 = -(n-1) \{ \log_e |\mathbf{D}| + p \} / 2 \quad (2.33)$$

である。ここで尤度比法によって、大標本論的に $2(L_1 - L_0)$ は、 H_0 の下で自由度 ϕ の χ^2 分布に従い、すなわち

$$\chi^2_0 = (n-1) \{ \log_e (|\hat{\mathbf{B}}|/|\mathbf{D}|) + \text{tr}(\mathbf{D}\hat{\mathbf{B}}^{-1}) - p \} \in \chi^2_\phi \quad (2.34)$$

ここに自由度 ϕ は、 $\phi = \{ (p-q)^2 - (p+q) \} / 2$ となる。その後パートレット (Bartlett) によると、式(2.34)の $(n-1)$ を次式の n'

$$n' = n - \frac{1}{6}(2p+5) - \frac{2}{3}q \quad (2.35)$$

で置き替えたほうが、よりいっそう χ^2_ϕ 分布に密接していることが提唱されている。

もし、 \hat{B} が正確に求められているなら、 $\text{tr}(\hat{D}\hat{B}^{-1}) = \text{tr}(\mathbf{I}_p) = p$ であるので、式 (2.34) は

$$\chi_0^2 = n' \log_e (|\hat{B}|/|D|) \quad (2.36)$$

と簡単な形に置き替えられる。

2.4 因子の解釈と因子軸回転 (factor rotation)

因子分析は通常二つの過程を経て行なわれる。先節のように参考軸 (reference axis) A を求める段階、および得られた A を科学分野の具体的な解釈のつけやすい単純な構造模型 G に変換する段階である。すなわち、 $G = AT$ なる因子軸の回転行列 T を施すことである。

元来、構造の簡素化という考え方の基準は、

- (1) G の各行は少なくとも一つのゼロを要素としてもつ。
- (2) q 個の共通因子の場合、 G の各列は少なくとも q 個のゼロを要素としてもつ。
- (3) G の任意の2列について、いくつかの变量はいずれか一方の列にのみ含まれ、他方には含まれていない。
- (4) 4個以上の共通因子をもつような場合、 G の任意の2列は、大半の变量を共有せず、ただ若干の变量のみを含む。

ということで、当初はグラフ上で直感的に回転法が考えられていた。しかし、その後種々の客観的な回転法が開発され、今日に及んでいる。

A. クァーチマックス法 (Quartimax method)

いま、 T を次式の関係を示す直交変換

$$G = AT \quad (2.37)$$

とすると、共有性 h_i^2 は、任意の i について不変で

$$\sum_{j=1}^q a_{ij}^2 = \sum_{j=1}^q g_{ij}^2 = h_i^2, \quad i=1, 2, \dots, p \quad (2.38)$$

$$\sum_i^p \left(\sum_j^q a_{ij}^2 \right)^2 = \sum_{ij} g_{ij}^4 + \sum_i^p \sum_{j \neq j'}^q g_{ij}^2 g_{ij'}^2 = \text{常数} \quad (2.39)$$

が成立している。

クアーチマックス法は、 A の要素をすべて2 乗し、その分散

$$\sigma^2_{a^2} \equiv \frac{1}{qp} \sum_i^p \sum_j^q (a_{ij}^2 - \bar{a}^2)^2, \quad (2.40)$$

$$\bar{a}^2 = \sum_{ij} a_{ij}^2 / qp$$

を最大にする直交変換 T を A に施し、 G を求めることである。なお、式 (2.40) は

$$M \equiv \frac{1}{pq} \sum_{ij} g_{ij}^4 - (\bar{g}^2)^2 \quad (2.41)$$

と変形され、 \bar{g}^2 は、式 (2.38) によって任意の直交変換で一定であるから、この回転法は

$$Q \equiv \sum_{ij} g_{ij}^4 \quad (2.42)$$

を最大にすることにほかならない。また

$$N \equiv \sum_i^p \sum_{j < j'}^q g_{ij}^2 g_{ij'}^2 \quad (2.43)$$

$$K \equiv \sum_{ij} g_{ij}^4 / (\sum_{ij} g_{ij})^2 \quad (2.44)$$

についても、直交変換のもとで N を最小、または k を最大にすることと同等である。

この回転法は具体的に次のようにして定まる。いま

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{4} \arctan \frac{4 \sum_{r=1}^p (g_{ri} g_{rj}) (g_{ri}^2 - g_{rj}^2)}{\sum_{r=1}^p \{(g_{ri}^2 - g_{rj}^2)^2 - (2g_{ri} g_{rj})^2\}}, \quad (2.45)$$

$$-\frac{\pi}{4} \leq \varphi_{ij} \leq \frac{\pi}{4}$$

$$T_{i,j} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (i) & (j) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (i) \\ (j) \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & 0 & & 0 & & 0 \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ & 0 & \cdots & 0 & \cos \varphi_{ij} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & 0 & 1 & & -\sin \varphi_{ij} & 0 \\ & 0 & & & & \ddots & & \\ & & & 0 & & & 1 & 0 \\ & 0 & \cdots & 0 & \sin \varphi_{ij} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & 0 & 0 & & 0 & \cos \varphi_{ij} \\ & & & & & & 0 & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$\left. \begin{matrix} i=1, 2, \dots, q-1 \\ j=i+1, i+2, \dots, q \end{matrix} \right\} \quad (2.46)$$

とすると

$$T = T_{1,2} T_{1,3} \cdots T_{i,j} \cdots T_{(q-1),q} \quad (2.47)$$

がクァーティマックス回転法による回転行列となる。

B. バリマックス法 (Varimax method)

クァーティマックス法は、因子負荷行列 A の各行、すなわち各変量の解釈を容易ならしめるための簡素化を特徴としているのに反し、このバリマックス回転法の特徴は A の各列、すなわち抽出した因子を容易に解釈づけるための簡素化を特徴としている。各変量（行）を簡素化すると、とにかく同一因子に多くの負荷をもたらしがちになるが、このような一般因子は、因子（列）の簡素化の強制によって、取り除かれる。

ある列について、意味する因子の簡素化は、次の分散

$$\sigma_j^2 = \left\{ \sum_{i=1}^p g_{ij}^4 - \left(\sum_{i=1}^p g_{ij}^2 \right)^2 / p \right\} / p, \quad j=1, 2, \dots, q \quad (2.48)$$

を最大にすることにより、各 g_{ij} を1またはゼロに向かわせようとしている。さて、因子負荷行列全体の簡素化は、各列についての式 (2.48) の合計を最大ならしめることとして、“素”バリマックス法 (raw varimax criterion) は、

$$\sigma^2 = \sum_j^q \sigma_j^2 = \sum_j^q \left\{ \sum_i^p g_{ij}^4 - \left(\sum_i^p g_{ij}^2 \right)^2 / p \right\} / p \quad (2.49)$$

を、また“規準”バリマックス法 (normal varimax criterion) は、

$$V = \sum_j^q \left\{ p \sum_i^p (g_{ij}/h_i)^4 - \left(\sum_i^p g_{ij}^2/h_i^2 \right)^2 \right\} \quad (2.50)$$

を最大ならしめる方法である。ここでは規準法についてのみ述べる。

この計算手法は、前のクァーティマックス法と全く同じであるが、式 (2.42) の代わりに式 (2.50) を最大にすることである。因子は、式 (2.46) で示されるように、二つずつ同時に回転され、 $q(q-1)/2$ 個の 2 因子組み合わせを 1 巡 (cycle) として、 V の値がすでに大きくならなくなるまで巡回を繰り返す。この手順は、次のように置き替えて考えるとわかりやすい。まず、

$$x_i \equiv \frac{a_{ij}}{h_i}, \quad y_i \equiv \frac{a_{ij'}}{h_i} \quad (2.51)$$

として

$$A \equiv \sum_i^p (x_i^2 - y_i^2), \quad B \equiv 2 \sum_i^p x_i y_i \quad (2.52)$$

$$C \equiv \sum_i^p \{(x_i^2 - y_i^2)^2 - 4x_i^2 y_i^2\}, \quad D \equiv 4 \sum_i^p x_i y_i (x_i^2 - y_i^2) \quad (2.53)$$

を定義すると、回転角 $\varphi_{jj'}$ は、 $-\pi/4$ と $\pi/4$ の間で

$$\varphi_{jj'} = \frac{1}{4} \arctan \frac{D - 2AB/p}{C - (A^2 - B^2)/p} \quad (2.54)$$

で求められる。ここに、さきのクァーティマックス法は、上式右辺が $\{\arctan(D/C)\}/4$ の場合となっている。このようにして、式 (2.51) の x_i, y_i は、容易に

$$(X_i Y_i) \equiv (x_i y_i) \begin{pmatrix} \cos \varphi_{jj'}, & -\sin \varphi_{jj'} \\ \sin \varphi_{jj'}, & \cos \varphi_{jj'} \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

で回転される。 X_i と Y_i を規準化するには、対応する h_i を乗じて、最終的に $g_{ij}, g_{ij'}$ を求めればよい。

2.5 因子軸の斜交回転 (oblique solutions)

因子分析法が考えられた比較的初期のころには、互いに無相関な因子のみが構造模型の中で許容されるものとして、暗黙のうちに仮定されていた。その後、相関性のある因子による表現も受け入れられるようになり、さらに無相関な因子のみを考えるよりも、むしろ好ましいとさえされてきている。もちろん、斜交解で規定する条件は、因子間の無相関性を妨げるものではなく、そのような因子が存在してもさしつかえない。

斜交単純化構造の解 (oblique simple-structure solutions) を求める基準と手順は、直交解の場合と同様である。次の表 2.1 に、直交解と斜交解についての比較を示す。

表 2.1 種々の回転法と基準

回 転 法	直 交 解	斜 交 解
ク ー テ ィ マ ッ ク ス	Q: 最大 M: 最大 N: 最小 K: 最大	同等
バ リ マ ッ ク ス	V: 最大	
オ ブ リ マ ッ ク ス		K: 最大
ク ー テ ィ ミ ン		N: 最小
コバリミン (オブリキュ・バリマックス)		C: 最小
オ ブ リ ミ ン		B: 最小
カイザー・ディックマン		D: 最小

A. オブリマックス法 (Oblimax method)

前節の直交変換では、 Q , M , K を最大、または N を最小とする変換はすべて同等の基準をもつものであったが、斜交回転の場合は、同等ではなく個々に考察を必要とする。オブリマックス法とは、式 (2.44) で示された K を最大ならしめる斜交参考軸に関する因子構造 $G=AT$ の斜交回転 T を行なうことである。すなわち、1 本の斜交軸 j の上への直交射影は、一つの平面で回転して次式の K_j

$$K_j = \frac{\sum_i g_{ij}^4}{(\sum_i g_{ij}^2)^2} \quad (2.56)$$

を最大ならしめるように定められる。このように j をかえて、計算を逐次繰り返すことにより G の要素が変わっていき、結局 K は最大値に到達する。

いま G の j 列について

$$g_{ij} = a_{ij}t_{jj} + a_{ij}'t_{jj}', \quad \sum_{j'}^q t_{j'j}^2 = 1 \quad (2.57)$$

$$= a_{ij} + a_{ij}'t_{j'j}', \quad t_{j'j}' \equiv t_{j'j}/t_{jj} \quad (2.58)$$

とおき、式 (2.56) に代入すると

$$K_j = \sum_i^p (a_{ij} + a_{ij}'t_{j'j}')^4 / \left\{ \left(\sum_i (a_{ij} + a_{ij}'t_{j'j}')^2 \right)^2 \right\} \equiv N/D^2 \quad (2.59)$$

を得、これを $t_{j'j}'$ で偏微分しゼロとおく。 $\partial D/\partial t \equiv D_t$, $\partial N/\partial t \equiv N_t$ としうると

$$\partial K/\partial t_{j'j}' = (DN_{t'j'j} - 2ND_{t'j'j})/D^3 \equiv f(t_{j'j}') = 0 \quad (2.60)$$

また K を 2 回偏微分したものの符号は、 $\partial f/\partial t_{j'j}'$ と同符号である。式 (2.60) は $t_{j'j}'$ の 4 次式で、四つの根のうち、実根かつ K を最大ならしめるものを探す。 $t_{j'j}'$ の 4 次の係数が負 (または正) なら、最大根は K_j を極大 (または極小) とし、次に大きな根は逆に K_j を極小 (または極大) にする。このように 4 実根を得、 K_j を極大にする 2 根が得られれば、式 (2.57) によって新しい 2 本の因子軸の方向余弦が与えられ、次いで G の j, j' 列について

$$(g_{ij}, g_{ij'}) = (a_{ij}, a_{ij'}) \begin{pmatrix} t_{jj} & t_{jj'} \\ t_{j'j} & t_{j'j'} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} j=1, 2, \dots, q-1 \\ j'=j+1, j+2, \dots, q \end{matrix} \quad (2.61)$$

が示され、 K が最大値付近で安定するまで、巡回して反復計算が行なわれる。もし、 $t_{j'j}'$ の根が 2 実根・2 虚根であれば、1 試案として、 $t_{j'j}'$ の 4 次の係数の符号により、正 (負) ならば 2 実根のうち小さいほう (大きいほう) の値およびその逆数の符号を変じた値を、それぞれ K_j を極大にする 2 根のごとく取り扱い、上記と同様の方法を適用することが勧められている。また、 $t_{j'j}'$ の 4 根がすべて虚根であれば、軸の回転は行なわず、 $t_{jj} = t_{j'j'} = 1$, $t_{j'j} = t_{jj'} = 0$ とおけばよい。

B. クァーティミン法 (Quartimin method)

この方法の根拠は、回転で因子の直交性を強制せず、式 (2.43) の N を最

小にすることである。いま $G=AT$ で、 T の j 列 T_j 以外を固定し、 T_j を変化させたときの N の最小値について考える。 W を $w_i = \sum_{j'} g_{ij'}^2$ の対角線行列、 $C=A'WA$ とおくと

$$G_j = AT_j, \quad T_j' T_j = 1 \quad (2.62)$$

$$N_j = T_j' C T_j \quad (2.63)$$

と書ける。ここに N_j は T_j によって定まる N の値である。式 (2.63) は、直ちに、 $(C - N_j I) T_j = O$ と変形され、最小の N_j を得ることは、最小固有値に対応する基準化された固有ベクトル T_j を求めることにほかならない。このように逐次 j をとりかえて、反復計算し、毎回の N_j の値が十分小さく安定化するまで巡回する。

この方法は、とくに相当多数回の反復計算の必要性があり、他の斜交法と同様に、電子計算機なしでは考えられない。

C. コバリミン法 (Covarimin method)、バイクォーティミン法 (Biquartimin method)、オブリミン法 (Oblimin method) およびカイザー・ティックマン法 (Kaiser-Dickman method)

これらの方法は、いずれも直交変換におけるバリマックスの考え方を斜交変換で、前述のクォーティミン法と同様の解法によって求めようとするものである。

まず、バリマックス法に対応する、最もわかりやすい回転法は、次式

$$C^* = \sum_{j=1}^q \left(p \sum_i g_{ij}^2 g_{ij'}^2 - \sum_i g_{ij}^2 \sum_i g_{ij'}^2 \right) \quad (2.64)$$

を最小にする斜交変換を行なうことである。すなわち、 C^* は G の要素の2乗に関する最小の共分散を示し、直交変換のもとでは、式 (2.49) と同等である。この C^* を基準とした斜交変換を“素”コバリミン法という。

また、前節で式 (2.49) の代わりに式 (2.50) を導入したように、 C^* の代わりに次式の C

$$C = \sum_{j=1}^q \left\{ p \sum_i (g_{ij}^2 / h_i^2) (g_{ij'}^2 / h_i^2) - \sum_i (g_{ij}^2 / h_i^2) \sum_i (g_{ij'}^2 / h_i^2) \right\} \quad (2.65)$$

を最小にする回転法を“規準”コバリミン法という。

経験的にクァーティミン法とコバリミン法のあまり満足ゆかぬ場合を考えてみると、コバリミン法はいつも因子軸が直交の場合に似すぎており、またクァーティミン法は逆に因子軸間にあまり相関性を強く出しすぎがちであることがいわれる。

これらの欠点を補う企図で、式 (2.43) の N および (2.64) の C^* を用い、次式の B^*

$$B^* = N + C^*/p \quad (2.66)$$

を最小にする回転法を考え、これをバイクァートミン法とよんでいる。 B^* は N と C^* の利点を含み、二つの妥当な基準の和を新たに基準としたものである。

さらに、コバリミンとクァーティミンの各基準の重みを変えた新基準が種々考えられる。

いま、二つの母数 α, β を導入して

$$B^* = \alpha N + \beta C^*/p \quad (2.67)$$

または、 $r \equiv \beta/(\alpha + \beta)$ として、一つの母数 r によって

$$B^* = N + r C^*/p \quad (2.68)$$

を最小にする変換を考え、これを一般“素”オブリンミン法という。また、 C^* と C の関係のように、共有度で割って規準化 (normal loading) したものと

$$B = \sum_{j < j'}^p \left\{ p \sum_i^p (g_{ij}^2/h_i^2)(g_{ij'}^2/h_i^2) - r \sum_i^p (g_{ij}^2/h_i^2) \sum_i^p (g_{ij'}^2/h_i^2) \right\} \quad (2.69)$$

を提唱し、これを最小にする変換法を一般規準オブリンミン法とよんでいる。この r の値の指定によって

$r=1$: コバリミン

$r=0$: クァーティミン

$r=0.5$: バイクァーティミン

と整理される。もちろん、式 (2.69) で r は 0 と 1 の間の任意の値をとりうる

が、実際的には γ の値として0.5のときが、通常最も満足される場合が多いようである。

一般規準オブリミン法の特殊な場合にはならないが、斜交回転法で上記の方法に準ずるものにカイザーとディックマンによる方法がある。この方法は、次の D を規準として

$$D = \sum_{j=1}^q \left\{ \sum_{i=1}^p (g_{ij}^2/h_i^2)(g_{ij}^2/h_i^2) \right\} / \left(\sum_{i=1}^p g_{ij}^2/h_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^p g_{ij}^2/h_i^2 \right) \quad (2.70)$$

を最小にする斜交変換である。この方法は、性格的に、一般オブリミン法では母数 γ の値をあらかじめ適当に決めねばならず、また基本的にクァーティミン法があまり強く斜交性を、コバリミン法が直交に近い性質を示す傾向があるという理由で開発されたのである。カイザー・ディックマンの方法は、これらの方法と、 $\gamma=0.5$ のバイクァーティミン法をも含めて、しばしば比較されている。カイザーとディックマンは、「どの方法が妥当かは、もちろんデータの意味する構造模型の性質によるが、データがとくに単純な場合または非常に複雑な性質の場合には、カイザー・ディックマン法がよく、データが適度に複雑な性質の場合には、式(2.69)によるのがよい」としている。

さて、一般規準オブリミン法による変換方式を計算するのは非常に困難である。しかし、クァーティミン法と同様に、行列が少々大きくとも、最も実用的に、 T の反復近似法によって実施できる。まず行列 G の一つの列 G_j を選び、他の列の要素は固定し、 G_j の要素を変えて、次の B_j

$$B_j = \sum_{i=1}^q \left\{ p \sum_{i=1}^p (g_{ij}^2/h_i^2)(g_{ij}^2/h_i^2) - \gamma \sum_{i=1}^p (g_{ij}^2/h_i^2) \sum_{i=1}^p (g_{ij}^2/h_i^2) \right\} \quad (2.71)$$

が最小になるまで小反復を繰り返す。この計算を G の q 個の列について行ない、これが主要1巡回(major cycle)となる。各 G_j の小反復には、式(2.52)と同様で、非対称行列の最小固有値と対応する固有ベクトルを求める計算が含まれる。このとき最小固有値が B_x の最小値に当たり、その固有ベクトルが変換行列の列となって、 G_j を形成することになる。巡回計算は、プログラム上で、式(2.69)の値の変化・量または割合で収斂の度合を判断し、反復計算の続行または計算打ち切りを定めるのがよい。

2.6 計算プログラミング

A. 成 因 分 析

Input		Output	
$R(I,J)$	分散共分散行列	II	巡回反復数
N	変数の数	ND	収斂のための反復回数
$IMAX$	収斂のための反復回数の限度	$A(I)$	固有ベクトルの第 i 要素
		RAM	固有値
		$B(I)$	固有ベクトル (基準化)
		SR	固有値の和
		P	残差分散
		T	算出した固有ベクトルの全分散に対する寄与率

```

C      PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS,
C      COMPONENT ANALYSIS,
C
C      THE LARGEST EIGENVALUE AND
C      THE ASSOCIATED EIGENVECTOR.      (ITERATED, OR POWER, METHOD)
C
C
C      N --- RANK OF MATRIX R
C      IMAX - MAXIMUM NO. TO CONVERGE TO A VECTOR
C
C
C      DIMENSION R(40,40),A(40),B(40)
1  READ 100,N,IMAX
  READ 101,((R(I,J),J=1,N),I=1,N)
  II=0
  SR=0.0
  P=N
  TYPE 200
  TYPE 201
2  DO 3 I=1,N
  A(I)=0.0
3  B(I)=0.0
  II=II+1
  TYPE 202,II
  ND=0
  DO 4 J=1,N
  DO 4 J=1,N
4  A(I)=A(I)+R(I,J)
5  AMAX=0.0
  DO 7 I=1,N
  T=ABSF(A(I))
  IF (T-AMAX) 7,7,6
6  AMAX=T
  RX=A(I)

```

```

7 CONTINUE
DO 8 I=1,N
8 A(I)=A(I)/RX
ND=ND+1
TYPE 203,ND,(A(I),I=1,N)
IF(IMAX-ND) 9,12,9
9 DO 10 I=1,N
DO 10 J=1,N
10 B(I)=B(I)+R(I,J)*A(J)
DO 11 I=1,N
A(I)=B(I)
11 B(I)=0.0
GO TO 5
12 AA=A(1)
DO 13 I=1,N
13 A(I)=A(I)/AA
C=0.0
RAM=0.0
DO 14 I=1,N
RAM=RAM+R(I,I)*A(I)
14 C=C+A(I)*A(I)
C=C*0.5
DO 15 I=1,N
15 B(I)=A(I)/C
TYPE 204,11,RAM,(B(I),I=1,N)
PUNCH 300,11,RAM
PUNCH 101,(B(I),I=1,N)
SR=SR+RAM
T=0.95*P
IF(T-SR)*18,18,16
16 DO 17 I=1,N
DO 17 J=1,N
17 R(I,J)=R(I,J)-RAM*B(I)*B(J)
GO TO 2
18 T=(100.0*SR)/P
P=P-SR
TYPE 205
TYPE 206,SR,P,T
TYPE 207
100 FORMAT(2I3)
101 FORMAT (5E12.5)
200 FORMAT (10X,18HCOMPONENT ANALYSIS,/)
201 FORMAT(/,2X,78HWE HAVE EFFECTED A GENUINE REDUCTION IN THE DIMENSI
IONS OF THE PRESENT PROBLEM.,/)
202 FORMAT (//,7X,20HITERATION OF CYCLE ,13,/)
203 FORMAT (10X,12,4F12.5/(12X,4F12.5))
204 FORMAT (/,7X,10HEIGENVALUE,13,F10.4//7X,16HEIGENVECTOR(STD)/(23X,5
1F11.5))
205 FORMAT (//,5X,51HSUM OF LAMBDAS RESIDUALS EFFECT FOR REDUCTI
ON,/)
206 FORMAT (5X,F8.3,9X,F8.3,11X,F7.3,2X,8H PERCENT,////)
207 FORMAT (50X,10HTHANK YOU.)
300 FORMAT (12,E12.5)
STOP
END

```

B. 因子分析 (因子負荷行列の推定と因子数の検定)

Input		Output	
IP	変数の数	ICYC	巡回回数
IK	共通因子の個数	U(I)	巡回前の共有度 $I=1, 2, \dots, IP$
IMAX	巡回回数の限度	V(I)	巡回における各因子の誤差分散
NUMBE	標本数	CNEW	各巡回後の基準値
IOUTS	ゼロならば最終結果のみ, 正なら小反復ごとに, 負ならば巡回ごとに結果を示す	CPRE	各巡回前の基準値
		TEMP	巡回後の共有度 $I=1, \dots, IP$
CONV	行列要素の置換基準となるごく小さな値, たとえば 1×10^{-8}	A(I, J)	残差行列 $I, J=1, 2, \dots, IP$
A(I, J)	標本分散共分散行列 $I, J=1, 2, \dots, IP$	XL(K, I)	因子負荷行列の最終解
		CHI	共通因子数の検定のための χ^2 -値
XL(K, I)	初期 (近似) の因子負荷行列 $K=1, 2, IK, I=1, 2, \dots, IP$	IDF	上記の自由度

FACTOR ANALYSIS

WITH TESTING NUMBER OF COMMON FACTORS
BY MAXIMUM LIKELIHOOD METHOD
AND CHE-SQUARE TEST

(INPUT) 1. CONTROL CARD

- COL. 1-3 RANK OF VARIANCE-COVARIANCE MATRIX
4-6 SPECIFIED NUMBER OF COMMON FACTORS
7-9 MAXIMUM NO FOR ITERATION CYCLE
10-12 SIZE OF SAMPLES
13-15 INTER-MEDIATE OUTPUT SPECIFICATION
(A) IF MINUS, CYCLIC OUT-PUT WITH MODULUS
(B) IF ZERO, NOT APPEARED
(C) IF PLUS, OUTPUT EVERY LOADING MATRIX
16-27 CRITERION TO CONVERGE, COMPARING WITH SUM
OF RESIDUAL VARIANCES

2. VARIANCE-COVARIANCE MATRIX (P*P)

3. PRELIMINARY LOADING MATRIX (K*P)

- *1. K IS NOT GREATER THAN 11
*2. READ MATRIX ROW-WISE

(OUTPUT) 1. CONTROL CARD (TYPE)

2. VARIANCE-COVARIANCE MATRIX (TYPE)

3. PRELIMINARY LOADING MATRIX (TYPE)

4. INTER-MEDIATE OUTPUT (TYPE) (IF SPECIFIED)

- A. CYCLE NUMBER
B. APPROXIMATE COMMUNALITIES
C. STATE OF CONVERGENCE
D. APPROXIMATE LOADINGS

5. FINAL OUTPUT

- A. FINAL COMMUNALITIES (TYPE)
B. FINAL LOADING MATRIX (TYPE AND PUNCH)
C. RESIDUAL VARIANCE-COVARIANCE MATRIX (TYPE)
D. OBSERVED VALUE OF CHI-SQUARE TO TEST NO. OF
COMMON FACTORS (TYPE)

C
C
C

```

DIMENSION A(40,40),XL(10,40),V(40),Y(10,40),XJ(39),U(40)
1 READ 100,IP,IK,IMAX,NUMBE,IOUTS,CONV
  TYPE 200
  TYPE 201,IP,IK,IMAX,NUMBE,IOUTS,CONV
  DO 2 I=1,IP
    READ 101,(A(I,J),J=1,IP)
2  TYPE 202,I,(A(I,J),J=1,IP)
  TYPE 203
  DO 3 K=1,IK
    READ 101,(XL(K,I),I=1,IP)
3  TYPE 202,K,(XL(K,I),I=1,IP)
  ICYC=0
  CPRE=0.0
4  CNEW=0.0
  DO 6 I=1,IP
    U(I)=0.0
  DO 5 K=1,IK
    U(I)=U(I)+XL(K,I)**2
    V(I)=A(I,I)-U(I)
5  CNEW=CNEW+V(I)
  ICYC=ICYC+1
  IF (ABSF(CPRE-CNEW)-CONV) 23,23,7
7  IF (IOUTS) 8,12,9
8  IF (ICYC+ICYC/ABSF(IOUTS)*IOUTS) 12,9,12
9  TYPE 204,ICYC
  DO 10 I=1,IP
10 TYPE 205,I,U(I),V(I)
  TEMP=CPRE-CNEW
  TYPE 206,CPRE,CNEW,TEMP
  DO 11 I=1,IP
11 TYPE 207,I,(XL(K,I),K=1,IK)
12 CPRE=CNEW
  IF (ICYC-IMAX) 13,13,23
13 DO 15 K=1,IK
  DO 15 I=1,IP
    Y(K,I)=0.0
  DO 15 J=1,IP
15 Y(K,I)=Y(K,I)+XL(K,J)*A(J,I)/V(J)
  DO 22 I=1,IK
  IF (I-1) 19,19,16
16 KK=I-1
  DO 17 K=1,KK
    XJ(K)=0.0
  DO 17 L=1,IP
17 XJ(K)=XJ(K)+XL(I,L)*XL(K,L)/V(L)
  DO 18 L=1,IP
  DO 18 K=1,KK
18 Y(I,L)=Y(I,L)-XJ(K)*XL(K,L)
19 H=0.0
  DO 20 L=1,IP
    U(L)=Y(I,L)-XL(I,L)
20 H=H+XL(I,L)*U(L)/V(L)
  DO 21 L=1,IP
21 XL(I,L)=U(L)/SQRTF(H)
22 CONTINUE
  GO TO 4
23 TYPE 209
  DO 24 I=1,IP
    U(I)=A(I,I)-V(I)
24 TYPE 205,I,U(I)
  TYPE 210
  DO 25 I=1,IP

```

```

25 TYPE 207,1,(XL(K,1),K=1,1K)
DO 26 K=1,1K
26 PUNCH 101,(XL(K,1),I=1,1P)
TYPE 211
IMP=1P-1
DO 28 I=1,1P
DO 28 J=1,1P
XJ(1)=0.0
DO 27 L=1,1K
27 XJ(1)=XJ(1)+XL(L,1)*XL(L,J)
28 A(I,J)=A(I,J)-XJ(1)
DO 29 I=1,1P
TYPE 202,1,(A(I,J),J=1,1P)
29 A(I,1)=A(I,1)-V(1)
DO 30 J=1,1P
DO 30 I=1,1P
30 A(I,J)=A(I,J)/V(1)
X=0.0
DO 31 I=1,IMP
K=I+1
DO 31 J=K,1P
31 X=X+A(I,J)*A(J,I)
XN=NUMBE
P=1P
XK=1K
CHI=(XN-(2.0*P+5.0+4.0*XK)/6.0)*X
IDF=0.5*((P-XK)**2-(P+XK)+1.0)
TYPE 212
TYPE 213,NUMBE,1P,1K,IDF,CHI
GO TO 1
100 FORMAT (5I3,E12.5)
101 FORMAT (5E12.5)
200 FORMAT (15X,48HFACTOR ANALYSIS BY THE MAXIMUM LIKELIHOOD METHOD//)
201 FORMAT (//1X,18HDIM. OF COV-MATRIX,10X,15//1X,18HNO. OF COM-FACTOR
1S,9X,16//1X,25HUPPER LIMIT FOR ITERATION,3X,15//1X,14HNO. OF SAMPL
2ES,14X,15//1X,23HINTER-MEDIATE I/O-SPEC.,5X,15//1X,21HCRTERION TO
3 CONVERGE,8X,E12.5//1X,33HSAMPLE VARIANCE-COVARIANCE MATRIX//)
202 FORMAT(/14,5(1X,E12.5)/,(5X,E12.5,1X,E12.5,1X,E12.5,1X,E12.5,1X,E1
12.5))
203 FORMAT (///1X,26HPRELIMINARY LOADING MATRIX//)
204 FORMAT (//1X,5HCYCLE,5X,15//1X,36HAPPROX. COMMUNALITIES VARIA
1NCES//)
205 FORMAT (4X,14,4X,E12.5,4X,E12.5//)
206 FORMAT (//1X,46HPRE. CRITERION NEW CRITERION DIFFERENCES/5X,
1E11.5,5X,E11.5,5X,E11.5//1X,27HAPPROXIMATE FACTOR LOADINGS//)
207 FORMAT (1X,13,10F7.4,/)
209 FORMAT (///1X,18HTHE LAST SOLUTIONS//1X,25H( 1) FINAL COMMUNALITI
1ES//)
210 FORMAT (//1X,27H( 2) FINAL FACTOR LOARINGS//)
211 FORMAT (//1X,41H( 3) RESIDUAL VARIANCE-COVARIANCE MATRIX//)
212 FORMAT (/1X,55HOBERVED VALUE OF CHI-SQUARE TO TEST THE NUMBER OF
1COMMON FACTORS//)
213 FORMAT(/15H NUMBER OF DATA,119/20H RANK OF COV. MATRIX,114/27H NO.
1 OF COM. FACTORS TESTED,17/20H DEGREES OF FREEDOM,114/21H OBSERV
2ED CHI-SQUARE,F13.5//)
END

```

C. クォーティマックス回転

Input		Output	
K	変数の数	LCY	巡回回数
NF	共通因子の数	$A(I, J)$	各巡回ごとの因子負荷行列, 共有度, 分散
IC	ゼロならば初期 (近似) の因子負荷行列と最終因子負荷行列, ゼロでなければ各巡回ごとの因子負荷行列を出す	QN	各巡回におけるクォーティマックス基準
$A(I, J)$	初期 (近似) の因子負荷行列 $I=1, 2, \dots, K \quad J=1, 2, \dots, NF$	DIF	巡回後におけるクォーティマックス基準の差

QUARTIMAX METHOD

K --- NO. OF VARIABLES
NF --- NO. OF FACTORS

```

DIMENSION A(30,30)
1 READ 100, K, NF, IC
DO 2 J=1, NF
2 READ 101, (A(I, J), I=1, K)
QP=0.
LCY=0
3 QN=0.
DO 4 I=1, K
4 A(I, NF+1)=0.
DO 5 J=1, NF
A(K+1, J)=0.
DO 5 I=1, K
A(I, NF+1)=A(I, NF+1)+A(I, J)**2
A(K+1, J)=A(K+1, J)+A(I, J)**2
5 QN=QN+A(I, J)**4
DIF=ABS(QN-QP)
IF(DIF-1.E-8)7,7,6
6 IF(1C*LCY)7,7,15
7 NF=NF+1
TYPE 200, LCY, NF
KS=1
KE=5
8 IF(NF-KE)9,9,10
9 KE=NF
10 TYPE 201, (J, J=KS, KE)
DO 11 I=1, K
11 TYPE 202, I, (A(I, J), J=KS, KE)
IF(NF-KE)12,12,13
12 KE=KE-1
TYPE 204, (A(K+1, J), J=KS, KE)
NF=NF-1
GO TO 14
13 TYPE 204, (A(K+1, J), J=KS, KE)
KS=KE+1
KE=KE+5
GO TO 8
14 TYPE 203, QN, DIF
IF(DIF-1.E-08)1,1,15
15 QP=QN
LCY=LCY+1

```

```

MM=NF-1
DO 29 J=1,MM
  I1=J+1
  DO 29 I=I1,NF
    V=0.
    D=0.
    DO 16 L=1,K
      V=V+4.*A(L,J)*A(L,I)*(A(L,J)**2-A(L,I)**2)
16  D=D+A(L,J)**2-A(L,I)**2**2-(2.*A(L,J)*A(L,I))**2
17  IF(D)17,29,17
18  IF(ABSF(D)+ABSF(V)-.000001)29,29,18
19  TAN=ABSF(V/D)
  IF(TAN-.001159)19,19,21
19  IF(D)20,29,29
20  SN=.707108
  CS=SN
  GO TO 25
21  IF(TAN-57.2899)23,22,22
22  SN=0.38019
  CS=0.92491
  GO TO 25
23  CS=1./SQRTF(1.+TAN*TAN)
  SN=CS*TAN
  CS=SQRTF((1.+CS)/2.)
  SN=SN/(2.*CS)
  CS=SQRTF((1.-CS)/2.)
  SN=SN/(2.*CS)
  IF(D)24,25,25
24  TEMP=CS
  CS=.707108*(CS+SN)
  SN=.707108*(TEMP-SN)
25  IF(V)26,27,27
26  SN=-SN
27  DO 28 L=1,K
    TEMP=A(L,J)
    A(L,J)=A(L,J)*CS+A(L,I)*SN
    A(L,I)=A(L,I)*CS-TEMP*SN
28  CONTINUE
  GO TO 3
100 FORMAT(3I2)
101 FORMAT(20F4.3)
200 FORMAT(/27HQURTMAX SOLUTION OF CYCLE,14,/,50X,4HCOL.,13,14H  CO
IMMUNALITY)
201 FORMAT(/10X,5I10)
202 FORMAT(/110,5F10.4)
203 FORMAT(/10X,19HQURTMAX CRITERION,F12.8,5X,11HDIFFERENCE ,F12.8//
1/)
204 FORMAT(/2X,8HVARIANC,5F10.4)
END

```

D. バリマックス回転

Input		Output	
<i>JOB</i>	整理番号	<i>INTERC</i>	巡回回数
<i>IVN</i>	変数の数	<i>VNEW</i>	各巡回におけるバリマックス基準
<i>IFN</i>	共通因子の個数	<i>FMX(I,J)</i>	各巡回および最終因子負荷行列
<i>MAXIC</i>	巡回回数の限度	<i>H(I)</i>	巡回前の共有度
<i>IOSPEC</i>	ゼロならば最終結果のみ, 1ならば中間の巡回結果も出す	<i>HN</i>	巡回後の共有度 $I=1, 2, \dots, IVN$
<i>CONV</i>	行列要素の置換基準となるごく小さな値, たとえば 1×10^{-5}	<i>HD</i>	$HN-H(I) \quad I=1, 2, \dots, INV$
<i>PMX(I,J)</i>	初期 (近似) の因子負荷行列 $I=1, 2, \dots, IVN \quad J=1, 2, \dots, IFN$		

VARIMAX ROTATION

(INPUT)

1. CONTROL CARD

COL. 1- 2 JOB. NO.
 COL. 3- 4 NO. OF VARIABLES
 COL. 5- 6 NO. OF FACTORS
 COL. 7- 8 UPPER LIMIT FOR ITERATION CYCLE
 COL. 9-10 0=DO NOT TYPE OUT INTERMEDIATE RESULTS
 1=TYPE OUT INTERMEDIATE RESULTS
 COL. 11-18 CRITERION TO CONVERGE (ITS FORMAT E8.1)

2. DATA

PRIMARY LOADING MATRIX ($V \cdot F$)
 (NOTE) V=NO. OF VARIABLES (ROW-WISE)
 F=NO. OF FACTORS (COLUMN-WISE)

(OUTPUT)

1 INTERMEDIATE RESULTS (TYPE) (IF SPECIFIED)
 2 FINAL LOADING MATRIX (TYPE AND PUNCH)

DIMENSION PMX(72,10), FMX(72,10), H(72), II(8)

1 READ 100, JOB, IVN, IFN, MAXIC, IOSPEC, CONV

TYPE 200

TYPE 201, JOB, IVN, IFN, MAXIC, IOSPEC, CONV

CONST=0.707108

RESID=0.001159

PRIMARY FACTOR PATTERN READ IN

DO 2 J=1, IFN

II(J)=J

2 READ 101, (PMX(I,J), I=1, IVN)

COMMUNALITIES

DO 4 I=1, IVN

H(I)=0.0

DO 3 J=1, IFN

3 H(I)=H(I)+PMX(I,J)*PMX(I,J)

H(I)=SQRTF(H(I))

DO 4 J=1, IFN

```

4 PMX(I,J)=PMX(I,J)/H(I)
  FN=IVN
  VPRE=0.0
  INTERC=1
  IFL=IFN-1
  VARIMAX CRITERION
5 VNEW=0.0
  DO 7 J=1, IFN
    S=0.0
    S2=0.0
    DO 6 I=1, IVN
      X=PMX(I,J)*PMX(I,J)
      S=S+X
    6 S2=S2+X*X
  7 VNEW=VNEW+(FN*S2-S*S)
  DO 8 I=1, IVN
    DO 8 J=1, IFN
      8 FMX(I,J)=PMX(I,J)*H(I)
      IF(10SPEC) 11,11,9
  9 TYPE 202, INTERC
    TYPE 203
    DO 10 I=1, IVN
      TYPE 204, I, (FMX(I,J), J=1, IFN)
  10 TYPE 205
    TYPE 212, VNEW
  11 IF(INTERC-MAXIC) 12,12,33
  12 IF(ABSF(VNEW-VPRE)-CONV)33,13,13
C ROTATION
  13 DO 32 J=1, IFL
    I1=J+1
    DO 32 K=I1, IFN
      A=0.0
      B=0.0
      C=0.0
      D=0.0
      DO 14 I=1, IVN
        PMXIJ=PMX(I,J)
        PMXIK=PMX(I,K)
        U=PMXIJ*PMXIJ-PMXIK*PMXIK
        V=2.0*PMXIJ*PMXIK
        C=C+U-U*V*V
        D=D+2.0*U*V
      A=A+U
  14 B=B+V
    D=D-2.0*A*B/FN
    B=C-(A*A-B*B)/FN
    IF(D-B) 15,20,22
  15 IF(B) 16,32,16
  16 TAN4P=ABSF(D/B)
    IF(TAN4P-RESID)17,19,19.
  17 IF(B) 18,32,32
  18 SINP=CONST
    COSP=CONST
    GO TO 30
  19 COS4P=1.0/SQRTF(1.0+TAN4P**2)
    SIN4P=COS4P*TAN4P
    GO TO 25
  20 IF(D+B-RESID) 32,21,21
  21 COS4P=CONST
    SIN4P=CONST
    GO TO 25
  22 TAN4P=ABSF(D/B)
    IF(TAN4P-RESID) 23,24,24

```

```

23 COS4P=0.0
   SIN4P=1.0
   GO TO 25
24 SIN4P=1.0/SQRTF(1.0+TAN4P**2)
   COS4P=TAN4P*SIN4P
25 COS2P=SQRTF((1.0+COS4P)/2.0)
   SIN2P=SIN4P/(2.0*COS2P)
   COSW=SQRTF((1.0+COS2P)/2.0)
   SINW=SIN2P/(2.0*COSW)
   IF(B) 26,26,27
26 COSP=(COSW+SINW)*CONST
   SINP=(COSW-SINW)*CONST
   GO TO 23
27 COSP=COSW
   SINP=SINW
28 IF(D) 29,29,30
29 SINP=-SINP
30 DO 31 I=1, IVN
   PMXIJ=PMX(I,J)*COSP+PMX(I,K)*SINP
   PMXIK=PMX(I,K)*COSP-PMX(I,J)*SINP
   PMX(I,J)=PMXIJ
31 PMX(I,K)=PMXIK
32 CONTINUE
   INTERC=INTERC+1
   VPRE=VNEW
   GO TO 5
33 TYPE 211
   DO 35 I=1, IVN
   H(I)=H(I)*H(I)
   HN=0.0
   DO 34 J=1, IFN
34 HN=HN+FMX(I,J)*FMX(I,J)
   HD=HN-H(I)
35 TYPE 206, I, H(I), HN, HD
   TYPE 207
   TYPE 208, (I(I), I=1, IFN)
   TYPE 209
   DO 39 I=1, IVH
   TYPE 204, I, (FMX(I,J), J=1, IFN)
   TYPE 209
   L=IFN/5
   IF(IFN-L*5) 36,37,36
36 L=L+1
37 DO 39 J=1, L
   K=J*5
   K1=K-1/2
   IF(K-IFN) 39,39,38
38 K=IFN
   K1=(J-1)*5+1
39 PUNCH 300, I, (FMX(I, KK), KK=K1, K), J
   TYPE 210, VNEW
   GO TO 1
100 FORMAT (5I2, E8.1)
101 FORMAT (5E12.5)
200 FORMAT (1X, 20HVARIMAX ANALYSIS///)
201 FORMAT(1X, 18HDESIGN OF ROTATION///4H JOB, 16//3X, 16HNO. OF VARIABLE
1S, 15, 5X, 21HNO. OF COMMON FACTORS, 15//3X, 15HMAX. ITERAT. C., 15//3X,
216HINTER. 1/0 SPEC., 14//3X, 16HCONST. FOR CONV., 1X, E11.5//)
202 FORMAT (3X, 9HCYCLE, 13//)
203 FORMAT (3X, 28HINTER MEDIATE FACTOR MATRIX //)
204 FORMAT ( 12, 8(3X, F7.4))
205 FORMAT (1X)
206 FORMAT (3X, 12, 5X, F10.5, 6X, F10.5, 6X, F10.5//)
207 FORMAT (//3X, 13HFACTOR MATRIX//)
208 FORMAT (2X, 8(3X, 3H F, 12, 2X))

```

```

209 FORMAT (//)
210 FORMAT (3X,14HTOTAL VARIANCE,5X,F15.4/)
211 FORMAT (//6X,47HPRE,COMMUNALITY NEW COMMUNALITY      DIFFERENCE//)
212 FORMAT (//3X,17HVARIMAX CRITERION,5X,F15.4//)
300 FORMAT (12,5E12.5,16X,12)
      END

```

E. オブリマックス回転

Input		Output	
<i>IVN</i>	変数の数	<i>LCYCL</i>	巡回回数
<i>IFN</i>	共通因子の個数	<i>VNEW</i>	巡回後におけるオブリマックス基準
<i>IOSP</i>	ゼロならば最終結果のみ, 正なら小反復ごとに, 負ならば巡回ごとに結果を示す	<i>VPRE</i>	巡回前におけるオブリマックス基準
<i>DIFFER</i>	行列要素の置換基準となるごく小さな値, たとえば 1×10^{-5}	<i>XY</i>	上記の差
<i>RS(I,J)</i>	初期 (近似) の因子負荷行列	<i>RS(I,L)</i>	巡回後における因子構造行列の近似解および最終的な因子負荷行列
		<i>XLAMB(I,J)</i>	因子構造行列に対する最終的な変換行列 $I, J=1, 2, \dots, IFN$
		<i>ABW(I)</i>	因子構造行列から因子負荷行列を求める変換行列の対角要素

OBLIMAX ROTATION

(INPUT)

1. CONTROL CARD

```

      COL. 1--3  NO. OF VARIABLES (P)
      COL. 4--6  NO. OF FACTORS (K)
      COL. 7--9  INTERMEDIATE I/O SPECIFICATION
                   PLUS   OUTPUT EVERY DETAIL
                   ZERO   FINAL RESULTS ONLY
                   MINUS  CYCLIC OUTPUT
2. PRELIMINARY STRUCTURE MATRIX (P*K)
      READ IN COLUMNWISE
      P IS LESS THAN OR EQUAL TO 72, AND
      K IS TO 10.

```

(OUTPUT)

1. INTERMEDIATE OUTPUT (TYPE)

2. FINAL SOLUTION (TYPE AND PUNCH)

```

      A. (TYPE) (1) REFERENCE FACTOR STRUCTURE MATRIX
                  (2) OBLIMAX CRITERION
                  (3) TRANSFORMATION MATRIX FROM THE PRELIMINARY
                      STRUCTURE MATRIX TO THE REFERENCE ONE
                  (4) TRANSFORMATION MATRIX FROM THE REFERENCE
                      STRUCTURE MATRIX TO THE PRIMARY PATTERN
                  (5) PRIMARY PATTERNS
      B. (PUNCH) (1) REFERENCE STRUCTURE MATRIX (P*K) (ROWWISE)
                  (ITS FORMAT 5E12.5)
                  (2) PRIMARY PATTERNS (P*K) (ROWWISE)
                  (ITS FORMAT 5E12.5)

```

SUBROUTINE FOFQ REQUIRED

C
C
C

```

      DIMENSION RS(72,10),XM(4,2),ALP(5),XLAMB(10,10),ABW(10),IJ(4),XLIN
1V(10,10)
1  READ 100, IVN, IFN, IOSP, DIFFER
   TYPE 200, IVN, IFN, IOSP, DIFFER
   DO 2 I=1, IFN
   DO 2 J=1, IFN
   XLINV(I,J)=0.0
   XLINV(J,J)=1.0
   XLAMB(I,J)=0.0
2  XLAMB(J,J)=1.0
   DO 3 J=1, IFN
3  READ 101, (RS(I,J), I=1, IVN)
   LCYCL=1
   ICYCL=1
   VPRE=0.0
4  J=0
   ICD:HVC=0
   K=0
   IFL=IFN-1
5  VNEW=0.0
   S2=0.0
   S4=0.0
   DO 11 I=1, IVN
   DO 11 L=1, IFN
   IF (L-K) 6,7,6
6  IF (L-J) 8,9,8
7  W=RS(I,J)*R11+RS(I,K)*R21
   GO TO 10
8  W=RS(I,L)
   GO TO 10
9  W=RS(I,J)*R12+RS(I,K)*R22
10 S2=S2+W**2
11 S4=S4+W**4
   VNEW=S4/(S2**2)
   XY=VNEW-VPRE
   IF (ICYCL-1) 13,12,13
12 VINIT=VNEW
13 IF (ICYCL-2) 14,37,14
14 IF (IOSP) 15,19,16
15 IF (ICYCL-3) 19,17,19
16 IF (ICYCL-3) 17,20,17
17 TYPE 201, J, K, LCYCL, VNEW, VPRE, XY
   TYPE 202
   DO 18 I=1, IVN
18 TYPE 203, I, (RS(I,L), L=1, IFN)
19 GO TO (20,37,20,46,42), ICYCL
20 DO 44 J=1, IFL
   I1=J+1
   DO 44 K=I1, IFN
   DO 21 I=1, 8
21 ABW(I)=0.0
   DO 22 I=1, IVN
   XY=RS(I,J)*RS(I,K)
   X2=RS(I,J)**2
   Y2=RS(I,K)**2
   ABW(1)=ABW(1)+X2**2
   ABW(2)=ABW(2)+XY*X2
   ABW(3)=ABW(3)+XY**2
   ABW(4)=ABW(4)+X2
   ABW(5)=ABW(5)+XY
   ABW(6)=ABW(6)+Y2

```

```

ABW(7)=ABW(7)+XY*Y2
22 ABW(8)=ABW(8)+Y2**2
   ALP(1)=ABW(5)*ABW(8)-ABW(6)*ABW(7)
   ALP(2)=ABW(4)*ABW(8)+2.0*ABW(5)*ABW(7)-3.0*ABW(6)*ABW(3)
   ALP(3)=3.0*(ABW(4)*ABW(7)-ABW(6)*ABW(2))
   ALP(4)=3.0*ABW(4)*ABW(3)-2.0*ABW(5)*ABW(2)-ABW(6)*ABW(1)
   ALP(5)=ABW(4)*ABW(2)-ABW(5)*ABW(1)
   IF (ABSF(ALP(1))-0.00001) 44,44,23
23 CALL FOFQ(ALP,XM)
   IMCO=0
   DO 26 I=1,3
   I1=I+1
   DO 26 L=I1,4
   IF (XM(I,1)-XM(L,1)) 24,26,26
24 DO 25 LL=1,2
   XY=XM(I,LL)
   XM(I,LL)=XM(L,LL)
25 XM(L,LL)=XY
26 CONTINUE
   DO 28 I=1,4
   IF (ABSF(XM(I,2))-0.00001) 27,27,28
27 IMCO=IMCO+1
   IJ(IMCO)=I
28 CONTINUE
29 IF (IMCO) 44,44,30
30 IF (IMCO-2) 44,31,34
31 IJ1=IJ(1)
   IJ2=IJ(2)
   IF (ALP(1)) 32,32,33
32 XM(1,1)=XM(IJ1,1)
   XM(3,1)=-1.0/XM(1,1)
   GO TO 36
33 XM(1,1)=XM(IJ2,1)
   XM(3,1)=-1.0/XM(1,1)
   GO TO 36
34 IF (ALP(1)) 36,35,35
35 XM(1,1)=XM(4,1)
   XM(3,1)=XM(2,1)
36 R11=1.0/SQRTF(1.0+XM(3,1)**2)
   R12=1.0/SQRTF(1.0+XM(1,1)**2)
   R21=XM(3,1)*R11
   R22=XM(1,1)*R12
   ICYCL=2
   VPRE=VNEW
   GO TO 5
37 IF (ABSF(VNEW-VPRE)-DIFFER) 39,39,38
38 IF (VNEW-VPRE) 39,39,40
39 VNEW=VPRE
   GO TO 44
40 ICONVC=ICONVC+1
   DO 41 I=1,IVN
   XIJ=RS(I,J)*R11+RS(I,K)*R21
   RS(I,K)=RS(I,J)*R12+RS(I,K)*R22
41 RS(I,J)=XIJ
   ICYCL=5
   GO TO 14
42 YY=R11*R22-R12*R21
   RINV11=R22/YY
   RINV12=-R12/YY
   RINV21=-R21/YY
   RINV22=R11/YY
   DO 43 IJ1=1,IFN
   XX=XLAMB(IJ1,J)*R11+XLAMB(IJ1,K)*R21
   XLAMB(IJ1,K)=XLAMB(IJ1,J)*R12+XLAMB(IJ1,K)*R22
   XLAMB(IJ1,J)=XX

```

```

XX=RINV11*XLINV(J,IJ1)+RINV12*XLINV(K,IJ1)
XLINV(K,IJ1)=RINV21*XLINV(J,IJ1)+RINV22*XLINV(K,IJ1)
43 XLINV(J,IJ1)=XX
44 CONTINUE
   ICYCL=3
   LCYCL=LCYCL+1
   IF (ICONVC) 45,45,4
45 VPRE=VINIT
   ICYCL=4
   GO TO 4
46 TYPE 204
   DO 47 I=1, IVN
47 TYPE 205, I, (RS(I,J), J=1, IFN)
   TYPE 206, VNEW, VPRE, XY
   TYPE 207
   DO 48 I=1, IFN
   PUNCH 101, (RS(J,I), J=1, IVN)
48 TYPE 205, I, (XLAMB(I,J), J=1, IFN)
   TYPE 208
   DO 50 I=1, IFN
   ABW(I)=0.0
   DO 49 J=1, IFN
49 ABW(I)=ABW(I)+XLINV(I,J)**2
   ABW(I)=SQRTF(ABW(I))
   DO 50 J=1, IFN
50 XLINV(I,J)=XLINV(I,J)*ABW(I)
   DO 52 I=1, IFN
   ABW(I)=0.0
   DO 51 J=1, IFN
51 ABW(I)=ABW(I)+XLINV(I,J)*XLAMB(J,I)
   TYPE 205, I, ABW(I)
   DO 52 J=1, IVN
52 RS(J,I)=ABW(I)*RS(J,I)
   TYPE 209
   DO 53 I=1, IVN
53 TYPE 205, I, (RS(I,J), J=1, IFN)
   DO 54 J=1, IFN
54 PUNCH 101, (RS(I,J), I=1, IVN)
   GO TO 1
100 FORMAT (3I3,E12.5)
101 FORMAT(5E12.5)
200 FORMAT (///1X,16HOBLIMAX ROTATION//1X,26HCONTROL CARD SPECIFICATIO
1N//5X,16HNO. OF VARIABLES,110//5X,14HNO. OF FACTORS,112//5X,17HI/O
2 SPECIFICATION,19//5X,61HPRE. ASSIGNED CONSTANTS TO JUDGE OBLIMAX
3CRITERION STABILIZED,5X,E12.5//)
201 FORMAT (///1X,7HCYCLE (,13,1H,13,2H ),5X,13///4X,45HNEW CRITERION
1 PRE.CRITERION DIFFERENCE//7X,3(F10.5,6X)//)
202 FORMAT (1X,29HAPPROXIMATE STRUCTURE MATRIX)
203 FORMAT (/12,10(8F10.5//))
204 FORMAT (///1X,15HFINAL SOLUTIONS////1X,27H REFERENCE STRUCTURE MA
1TRIX/)
205 FORMAT (///12,8F10.5/10(2X,8F10.5//))
206 FORMAT (///4X,53HFINAL CRITERION INITIAL CRITERION DIFFER
1ENCE//3(9X,F10.5//))
207 FORMAT (1X,61HTRANSFORMATION MATRIX (FROM PRE.STRUCTURE TO FINAL S
1TRUCTURE))
208 FORMAT (///1X,61HTRANSFORMATION MATRIX (FROM PRE.STRUCTURE TO PRIM
1ARY PATTERN)//)
209 FORMAT (///1X,37HPRIMARY PATTERN BY THE OBLIMAX METHOD)
END

```

[付] サブ・ルーティン (4次方程式の求根)

A(I)	I=1, 2, ..., 5 の順に 4 次の降幅の順に係数を入れておく
X(I, J)	4 個の根 (I=1, 2, 3, 4) を J=1 に実数部分 J=2 に虚数部分を示す

```

C      SUBROUTINE OF QUARTIC EQUATION
C      FERRARI METHOD
C
C      SUBROUTINE F0EQ(A,X)
C
      DIMENSION A(5),X(4,2)
      DO 1 I=1,4
      DO 1 J=1,2
1  X(I,J)=0.
      A1=A(2)/A(1)
      A2=A(3)/A(1)
      A3=A(4)/A(1)
      A4=A(5)/A(1)
      SK=-3.*A1**2/8.+A2
      SL=A1**3/8.-A1*A2/2.+A3
      SM=-3.*A1**4/256.+A1*A1*A2/16.-A1*A3/4.+A4
      SR=4.*SK*SM-SL**2
      SP=-4.*SM/3.-SK**2/9.
      SQ=SR-4.*SK*SM/3.-2.*SK**3/27.
      DD=SQ**2+4.*SP**3
      IF(DD)3,2,2
2  AA=(-SQ+SQRTF(DD))/2.
   BB=(-SQ-SQRTF(DD))/2.
   AAA=AA/ABSF(AA)
   BBB=BB/ABSF(BB)
   AA=ABSF(AA)**(1./3.)
   BB=ABSF(BB)**(1./3.)
   SU1=AAA*AA+BBB*BB+SK/3.
   GO TO 4
3  SITA=ATANF((-DD)**0.5/(-SQ))
   SU1=2.*SQRTF(-SP)*SINF(1.57079632-SITA/3.)+SK/3.
4  SA=-SU1-SK
   SB=2.*SL/(ABSF(SU1-SK))**0.5
   SC=(ABSF(SU1-SK))**0.5/2.0
   IF(SU1-SK)8,5,15
5  SX=SQRTF(ABSF(-SK/2.))
   IF(SK)6,6,7
6  X(1,1)=SX
   X(2,1)=-SX
   X(3,1)=SX
   X(4,1)=-SX
   GO TO 21
7  X(3,2)=SX
   X(4,2)=-SX
   X(1,2)=SX
   X(2,2)=-SX
   GO TO 21
8  SALPH=((SQRTF(SA**2+SB**2)+SA)/2.0)**0.5
   SBETA=((SQRTF(SA**2+SB**2)-SA)/2.0)**0.5
   IF(SL)14,9,13
9  IF(SA)10,11,11
10 X(1,2)=(-SQRTF(ABSF(SU1-SK))+SQRTF(-SA))/2.
   X(2,2)=-X(1,2)
   X(3,2)=X(2,2)+SQRTF(-SA)

```

```

      X(4,2)=-X(3,2)
      GO TO 21
11  X(1,1)=SQRTF(SA)/2.
      X(2,1)=-X(1,1)
      X(3,1)=X(2,1)
      X(4,1)=X(1,1)
      AAA=-1.
      BBB=-1.
      DOT2 =1,4
      AAA=AAA*BBB
12  X(1,2)=SQRTF(ABSF(SU1-SK))*AAA/2.
      GO TO 21
13  SC=-SC
14  X(1,1)=SALPH/2.-A(2)/4.
      X(1,2)=SBETA/2.+SC
      X(2,1)=X(1,1)
      X(2,2)=-X(1,2)
      X(3,1)=X(1,1)-SALPH
      X(3,2)=X(1,2)-SC*2.
      X(4,1)=X(3,1)
      X(4,2)=-X(3,2)
      GO TO 21
15  J=1
16  IF((SA-SB)/4.)17,18,18
17  X(J,1)=SC-A1/4.
      X(J+2,1)=X(J,1)
      X(J,2)=(ABSF((SA-SB)/4.))*0.5
      X(J+2,2)=-X(J,2)
      GO TO 19
18  X(J,1)=SC-A1/4.+SQRTF((SA-SB)/4.)
      X(J+2,1)=SC-A1/4.-SQRTF((SA-SB)/4.)
      X(J,2)=0.
      X(J+2,2)=0.
19  IF(J-2)20,21,21
20  J=J+1
      SC=-SC
      SB=-SB
      GO TO 16
21  RETURN
      END

```

F. その他 (固有値・固有ベクトル——ヤコビ法)

Input		Output	
<i>IDIM</i>	計算される行列の rank	$X(I, I)$	行列 $X(I, J)$ の固有値
$X(I, J)$	行列の I 行 J 列の要素 $I, J=1, 2, \dots, IDIM$	$U(I, J)$	固有値 $X(I, I)$ に対する固有ベクトル
<i>EPSI</i>	計算中に行列の非対角要素がゼロに十分近いかなかをテストするゼロに近いごく小さな数値	<i>IC</i>	計算の反復回数

C
C
C
C
C
C
C

EIGEN VALUE AND
EIGEN VECTOR FOR SYMMETRIC MATRIX (JACOBI METHOD)

IDIM --- RANK OF MATRIX $X(I, J)$
EPSI --- NEGLIGIBLE SMALL VALUE FOR NON-DIAGONAL ELEMENTS

C
C

```

      DIMENSION X(40,40),U(40,40)
1  READ 100, IDIM, EPSI
   TYPE 202, IDIM, EPSI
   DO 3 I=1, IDIM
     READ 101, (X(I,J), J=1, IDIM)
     TYPE 101, (X(I,J), J=1, IDIM)
     DO 2 J=1, IDIM
2    U(I,J)=0.0
3    U(I,I)=1.0
   IC=0
4  AB=0.0
   DO 7 I=1, IDIM
     IF(I-IDIM) 5,7,7
5    J=I+1
     DO 7 L=J, IDIM
       IF(AB-ABSF(X(I,L))) 6,6,7
6    AB=ABSF(X(I,L))
     M=I
     K=L
     AHK=X(I,L)
7  CONTINUE
   IF(AB-EPSI)13,8,8
8  C=X(K,K)-X(M,M)
   R=(C*AB+AHK*AHK*4.0)**0.5
   IF(C) 9,10,10
9  R=-R
10 COS=(0.5+0.5*C/R)**0.5
   SIN=-X(M,K)/(R*COS)
   DO 11 I=1, IDIM
     TEMP =COS*X(M,I)+SIN*X(K,I)
     X(K,I)=COS*X(K,I)-SIN*X(M,I)
11  X(M,I)=TEMP
   DO 12 I=1, IDIM
     TEMP =COS*X(I,M)+SIN*X(I,K)
     X(I,K)=COS*X(I,K)-SIN*X(I,M)
     X(I,M)=TEMP
     TEMP =U(I,M)*COS+U(I,K)*SIN
     U(I,K)=U(I,K)*COS-U(I,M)*SIN
12  U(I,M)=TEMP
   IC=IC+1
   GO TO 4
13 DO 15 I=1, IDIM
   TYPE 200, I, X(I,I)
   DO 14 J=1, IDIM
14  TYPE 201, I, J, U(J,I)
   TYPE 204
   PUNCH 300, I, X(I,I)
15  PUNCH 301, (U(I,J), J=1, IDIM), I
   TYPE 203, IC
   GO TO 1
100 FORMAT (12,F8.6)
101 FORMAT (4F14.11)
200 FORMAT (2X,6HLAMBDA,13,7X,F10.5,/)
201 FORMAT (10X,1HX,13,3X,F10.5)
202 FORMAT (4HRANK,110,31HNEG.SL.VALUE FOR NON-DIAG.ELEM.,E12.5,/,1X,10HINPUT DATA,/)
203 FORMAT (1X,27HITERATION CYCLE TO CONVERGE,14,/)
204 FORMAT (1X)
300 FORMAT (12,F10.5)
301 FORMAT (5E12.5,5X,15)
END

```

2.7 応 用 例

精神変調の治療には、患者の境遇・環境条件などの見地から病型分類、また別に精神面・行動面での症状から状態像（プロフィール）が分類され、治療指針をたてる際の情報として役だてられる。いまうつ病での症状評価法とその吟味の仕方を、因子分析法の一例として、ハミルトンの研究から紹介してみよう。彼は、抑うつ状態の主要症状を検討し、表 2.2 の 21 項目からなる評価表を作成した。

ここに各項目の評点は、表 2.3 のように 5 点法または 3 点法で、症状の重篤度により与えられる。この評価表で成年男子患者 49 例につき、2名の医師が全く別個に面接し、評価点を付した。この際評価者間の差異は、あらかじめ別の実験で、総点の相関性について検討し、10 症例ごとにデータを累積し、70 症例までに、0.84, 0.84, 0.88, 0.89, 0.89, 0.90, 0.90 と変化をみている。さて、観測項目間の相関行列は 49 症例について、表 2.4 のごとく計算された。ここに、第 18 項目の日内変動はうつ状態だけの尺度ではなく、また第 19 項目以降は観測例数が少なかったので除外し、患者の精神状態に関する 8 項目、身体状態に関する 4 項、精神身体に関する 5 項の計 17 項目について算出している。

この相関行列より、固有値、固有ベクトルを抽出し、因子分析した結果は、表 2.5 で示される。

この際、全分散 17 のうち、大きいほうから七つの固有値 3.44, 2.34, 1.75, 1.37, 1.28, 1.07, 0.99 で 72% を占めている。検討の結果、因子として最初の四つをとりあげ、これをより明確に意義づけるために参考軸の直交回転を行なった。回転は最初の 3 因子について実施し、この結果に、すでに単純な良い解釈を示している、第 4 列を付け加えることにした。直交変換行列および回転後の整理されたものを表 2.6 に示す。

直交回転後の因子負荷行列は、単純な形となり、しかも直交性を維持している。各因子に適切な名称をつけるのが通常であるから、次に各因子についての

表 2・2 ウツ症状のチェック表

項目 番号	評点	症 状	項目 番号	評点	症 状
1	0-4	抑ウツ気分 陰ウツな気分、将来に対して非 観的悲衰感 泣く傾向 悲しみなど……1 ときどき泣く……2 しばしば泣く……3 極度の症状……4	3	0-4	自殺 生きている価値がないと思う 死んだほうがよいと思う 自殺念慮 自殺企図
			4	0-2	不眠（入眠時の） 入眠困難
2	0-0	罪業感 ↓ 自己非難、人に悪いことをし たと思う罪業感 現在の病気は何かの罰である 罪業妄想 ↓ 罪業幻覚	5	0-2	不眠（夜中の） 夜中、休息できず睡眠を障害さ れる 夜中、目覚めている
6	0-2	不眠（夜明け方の） 朝非常に早く目覚めもう眠れな い	13	0-2	身体症状（全般的） 四肢、背部の倦怠感、頭重、広 範な背中痛
7	0-4	仕事と関心 能力がないという感じ 無精、決断困難、逡巡 趣味・娯楽に興味を失う 社会活動の低下 生産能力の低下 仕事ができない 現病気だけにより仕事を止め た……4 治療後または回復後も仕事を していないものには、低い点 をつける	14	0-2	性器症状 性欲消失、月経障害
			15	0-4	心気症 体のことばかり考える 健康状態に気をとられる 不平不満な態度 心気妄想
			16	0-2	体重減少
8	0-4	制止 思考・談話・動作が鈍い 無欲 昏迷 面接で軽い制止がある…… 1 面接で明らかな制止がある 2 面接困難……… 3 完全な昏迷……… 4	17	0-2	病識 病識欠如…………… 2 部分的欠如または疑わしい… 1 病識あり…………… 0 (病識は患者の理解力や背景) により解釈すること
9	0-2	焦躁 不安に基づく落ち着きのなさ	18	0-2	日内変動 症状が朝か夕方かにより悪くな る（いずれかを記載する）
10	0-4	不安（精神的） 緊張、易刺激性 細かいことにこだわる 不安そうな態度 恐怖	19	0-4	離人症と現実感消失 非現実感、明細にしるすこ 虚無的な考え」と
11	0-4	不安（身体的） 胃腸症状、ガス、消化不良、心 臓血管系、心悸亢進、頭痛、呼 吸器系、泌尿器系など	20	0-4	妄想症状 邪推 関係念慮 関係妄想、被害妄 想被害的な幻覚 } 抑ウツ的性 格を伴わぬ もの
12	0-2	身体症状（胃腸症状） 食欲減退、腹部の重苦しさ、便 秘	21	0-2	強迫症状 強迫観念（思う）と患者が闘っ ているその他の強迫症状

吟味を示す。ベクトルの要素が全変量（全項目）について正相関を示す場合は、項目全体にわたる一般因子とみなされるが、しかしいまの場合、一部に逆

表 2-3 評点のつけ方

0—4 評点	0—2 評点
0 なし	0 なし
1 わずかに	1 わずかに、疑わしい程度に
2 中程度に	2 明らかに
3 中程度に	
4 激しく	

相関を示している。このため、因

子負荷ベクトルの要素を調べ、第

1 因子を「制止性ウツ病」とよぶ。

すなわち、重要な順番に、抑うつ

気分 0.76, 罪業感 0.73, 制止

0.68, 病識欠如 0.60, 自殺 0.53,

性器症状 0.47, 仕事と関心 0.46, 不安（身体的）0.40, 不安（精神的）0.37,

体重減少 0.35, および不眠（夜明け方の）0.34 である。これらはこれまでの

診断カルテでの経験に非常に合致している。第2因子では、身体症状（胃腸症

状）0.67, 不眠（入眠時の）0.61, 焦躁 0.54, 体重減少 0.44, 制止 0.37,

不眠（入眠時の）0.37, 不眠（夜中の）0.36, 心気症 0.37, 不安（精神的）

0.33, および自殺 0.31 が特徴で、莫然と焦躁性ウツ病とよび、臨床的には不

安と焦躁が睡眠障害（とくに入眠障害）を伴って現われることを指摘している。

このようにして第2因子を「不安症状性」とよぶ。第3因子以降を臨床的にさ

らに明確に解釈するため斜交回転をも試行している。また、このような解析に

よる因子と臨床体験との差異および困難性は、現実の患者ではそのような諸因

子が、同時に高くなったり、低くなったり変化することに原因するからであろ

うと考えている。もし、諸検査項目から、いくつかの規定された臨床体験の範

疇に分類する方法を望むなら、むしろ判別関数法によるのが適切であろう。し

かし、この方法はあらかじめ診断され、分類されたデータの設定のもとに行な

われるので、ここでは適用できない。そこで、まずデータからいくつかの状態

像の群を分け、仮説検定によって確かめてから実施してゆかねばならないと論

じている。

さらに、このように諸因子の性質を明らかにしていくためには、高く負荷さ

れている因子別に、若干の患者を個々に選び、具体的な事象と考察を結びつけ

ている。本稿では第3因子についてのみあげておく。

表 2・4 ウツ状態の尺

	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
抑　　ウ　　ツ　　気　　分	1.0	0.491	0.373	0.082	0.236	0.140	0.362
罪　　業　　感		1.0	0.522	-0.049	-0.048	-0.121	0.358
自　　殺			1.0	0.043	0.098	-0.073	0.016
不　　眠（入眠時の）				1.0	0.199	0.309	0.130
不　　眠（夜中の）					1.0	0.054	0.035
不　　眠（夜明け方の）						1.0	0.17
仕　事　と　関　心							1.0
制　　止							
焦　　躁							
不　　安（精神的）							
不　　安（身体的）							
身体症状（胃腸症状）							
身体症状（全般的）							
性　　器　　症　　状							
心　　気　　症							
体　　重　　減　　少							
病　　識							

表 2・5 因子行列と固有値

症　　状	因子1	因子2	因子3	因子4
抑　　ウ　　ツ　　気　　分	0.763	-0.172	0.103	0.151
罪　　業　　感	0.728	-0.156	0.341	-0.138
自　　殺	0.531	-0.311	0.283	0.122
不　　眠（入眠時の）	0.207	0.614	-0.208	-0.025
不　　眠（夜中の）	0.284	0.363	-0.081	0.639
不　　眠（夜明け方の）	0.338	0.371	-0.304	-0.340
仕　事　と　関　心	0.458	0.275	0.043	-0.134
制　　止	0.683	-0.371	-0.253	0.224
焦　　躁	-0.034	0.539	0.503	-0.032
不　　安（精神的）	-0.373	0.326	0.557	0.072
不　　安（身体的）	-0.403	0.250	0.480	0.421
身　体　症　状（胃腸症状）	0.282	0.674	-0.395	-0.010
身　体　安（全般的）	0.087	0.245	-0.356	0.628
性　　器　　症　　状	0.474	-0.139	0.397	0.225
心　　気　　症	0.157	0.367	0.117	-0.144
体　　重　　減　　少	0.603	0.107	0.204	-0.173
病　　識	0.353	0.439	0.214	-0.192
固　　有　　値	3.4358	2.3439	1.7496	1.3658

度間相関行列

(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)	(14)	(15)	(16)	(17)
0.590	-0.055	-0.198	-0.224	-0.032	0.014	0.370	-0.024	0.341	0.192
0.370	0.027	-0.167	-0.151	0.071	-0.063	0.426	0.113	0.419	0.222
0.335	-0.068	-0.216	-0.065	-0.087	-0.115	0.304	-0.042	0.201	0.134
-0.115	0.191	-0.001	-0.036	0.438	0.169	-0.044	0.152	0.179	0.156
0.200	0.126	0.003	0.095	0.308	0.278	0.111	0.067	0.146	0.182
0.126	0.022	-0.180	-0.162	0.376	-0.038	0.142	0.171	0.012	0.243
0.230	0.183	0.017	-0.045	0.285	0.094	-0.058	-0.020	0.313	0.178
1.0	-0.305	-0.365	-0.356	0.067	0.127	0.269	-0.208	0.232	0.087
	1.0	0.274	0.329	0.199	-0.107	0.045	0.001	0.217	0.151
		1.0	0.370	-0.146	-0.058	-0.026	0.043	-0.159	0.245
			1.0	-0.082	0.060	0.033	-0.014	-0.310	-0.074
				1.0	0.248	-0.115	0.135	0.074	0.313
					1.0	0.048	0.137	-0.024	-0.070
						1.0	0.199	0.254	0.065
							1.0	0.275	0.235
								1.0	0.149
									1.0

表 2・6 回転後の因子行列

症 状	因子 1	因子 2	因子 3	因子 4
自殺	0.672	-0.009	-0.086	0.122
性器症	0.618	0.113	0.081	0.225
犯罪業感	0.783	0.224	-0.087	0.138
抑制止	0.525	0.014	-0.626	0.224
抑うつ気分	0.690	0.227	-0.309	0.151
身体症状(胃腸症状)	-0.283	0.725	-0.288	-0.010
身体重減少	0.508	0.401	-0.077	-0.173
不眠(入眠時の)	-0.214	0.637	-0.111	-0.025
不眠(夜中の)	0.015	0.456	-0.105	0.639
仕事と関心	0.245	0.466	-0.102	-0.134
心気症	0.024	0.397	0.123	-0.144
病識	0.190	0.556	0.133	-0.192
不眠(夜明け方の)	-0.067	0.490	-0.317	-0.340
焦躁	0.016	0.453	0.583	-0.032
不安(精神的)	-0.117	0.100	0.730	0.072
不安(身体的)	-0.148	-0.019	0.658	0.421
身体症状(全般的)	-0.227	0.256	-0.278	0.628

表 2.7 直交変換行列

因子	行 列		
F_1	0.7377	0.4932	-0.4610
F_2	-0.4182	0.8699	0.2614
F_3	0.5300	0.0000	0.8480

第3因子—— $F_1:41$, $F_2:38$, $F_3:63$, $F_4:44$ の因子負荷を有する 61 才の男子 (症例 No. 2)。この患者は過去に数回のうつ病歴を有し、今回の場合は、夫人と娘の死に

より誘発された。来診後の経過は大きな変動があり、電気ショック療法にはほとんど反応しなかった。彼の症状は、著しい気分の抑うつ、罪業感、自殺念慮、制止、関心の消失、および非常な睡眠障害であった。治療結果は快癒し、その後も正常である。

$F_1:60$, $F_2:55$, $F_3:78$, $F_4:52$ の 53 才男子 (症例 No. 45)。患者は、4 年前にいちどうつ病にかかっている。そして 2 年前から再びうつ病にかかり、その症状はかなり変化していた。入院中、彼は著明な気分の抑うつ、罪業感、関心の消失、非常な不安、焦躁、性欲消失および病識欠如を示した。彼は、むしろ不十分人格で、それまでよりも重い職責についたとき、現病にかかった。

これらの患者はいずれもうつ病歴があり、内向的性格の変調を有している。そして、両者とも現病の発生には心理的緊張があった。症状は、最初内向的 (制止型) であり、次に反応的 (焦躁型) であった。臨床的に、これらの患者は、非常に似通っているとはいえないが、因子負荷の上では類似性を指摘している。この因子が何であるか、したがって何と命名されるものか臨床的にまだ明らかでない。

このような詳しい解析と検討によって、うつ症状患者に適用する実用的な評価表について研究している。

Hamilton, M: "A rating scale for depression" *J. Neurosurg. Psychiat.* 23 (1960), 56-61.

参 考 文 献

- 1) Anderson, T. W. and Rubin, H.: Statistical inference in factor analysis,

- Proc. Third Berkeley Symposium*, 5 (1956), 111-150.
- 2) Anderson, T. W.: Some scaling models and estimation procedures in the latent class model, *Probability and Statistics*, ed. by Grenander, U. (1959), 9-38, Almqvist & Wiksell Co.
 - 3) Anderson, T. W.: Asymptotic theory for principal component analysis, *Ann. Math. Statist.*, 34 (1963), 122-148.
 - 4) Bartlett, M. S.: Internal and external factor analysis, *Brit. J. Psych. (Stat. Sect.)*, 1 (1948), 73.
 - 5) Bartlett, M. S.: Tests of significance in factor analysis, *Brit. J. Psychol., Statist. Sect.*, 3 (1950), 77-85.
 - 6) Bartlett, M. S.: A further note on tests of significance in factor analysis, *Brit. J. Psych. (Stat. Sect.)*, 4 (1951), 1.
 - 7) Bartlett, M. S.: The effect of standardization on an approximation in factor analysis. *Biometrika*, 38 (1951), 337.
 - 8) Bartlett, M. S.: A note on the multiplying factor for various χ^2 approximations, *J. Roy. Statist. Soc., B* 16, (1954), 293-298.
 - 9) Burt, C.: Alternative methods of factor analysis and their relations to Pearson's method of principal axes, *Brit. J. Psychol., Statist. Sect.* 2 (1949), 98-121.
 - 10) Burt, C.: Group factor analysis, *Brit. J. Psychol., Statist. Sect.* 3 (1950), 40-75.
 - 11) Burt, C.: Alternative methods of factor analysis. *Brit. J. Psych. (Stat. Sect.)*, 2 (1949), 93.
 - 12) Camp, B. H.: The converse of Spearman's two-factor theorem. *Biometrika*, 24 (1932), 418.
 - 13) Carroll, J. B.: An analytical solution for approximating simple structure in factor analysis, *Psychometrika*, 18 (1953), 23-38.
 - 14) Carroll, J. B.: Biquartimin criterion for rotation to oblique simple structure in factor analysis, *Science*, 126 (1957), 1114-1115.
 - 15) Cattell, R. B.: Factor Analysis. (1952), Harper and Bros.
 - 16) Creasy, M. A.: Analysis of variance as an alternative to factor analysis, *J. Roy. Statist. Soc.* 19 (1957), 313-325.
 - 17) Edward, A. L.: Techniques of Attitude Scale Construction, Appleton Century (1957).
 - 18) Elfving, G., Sitgraves, R. & Solomon, H.: Item selection procedures for item variables with a known factor structure, *Psychometrika*, 24 (1959), 189-

205.

- 19) Gibson, W.A.: An extension of Anderson's solution for the latent structure, *Psychometrika*, 20 (1955), 69-73.
- 20) Gullikson, H. & Messick, P (ed.): *Psychological scaling: Theory and Applications*, John Wiley (1960).
- 21) Guttman, L.: Some necessary conditions for common-factor analysis, *Psychometrika*, 19 (1954), 149-161.
- 22) Guttman, L.: The determinacy of factor score matrices with implications for five other basic problems of common-factor theory, *British and Journal of Statistical Psychology*, 8 (1955), 65-81.
- 23) Guttman, L.: Best possible systematic estimates of communalities. *Psychometrika*, 21 (1956), 273-285.
- 24) Guttman, L.: Successive approximations for communalities, *Research Report 12, University of California, Berkeley, California* (1957), 13.
- 25) Guttman, L.: To what extent can communalities reduce rank?, *Psychometrika*, 123 (1958), 297-308.
- 26) Hotelling, H.: The relation of the newer multivariate statistical methods to factor analysis, *Brit. J. Statist. Psychol*, 10 (1957), 69-79.
- 27) Joreskog, K.G.: *Statistical estimation on factor analysis*: Stockholm (1963), Almqvist & Wiksell Co.
- 28) Jowett, G.H.: Factor analysis, *Appl. Statistics*, 7 (1958), 114-125.
- 29) Kaiser, H.F.: The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis, *Psychometrika*, 23 (1958), 187-200.
- 30) Kaiser, H.F.: Computer program for varimax rotation in factor analysis, *Psychol. Meas.*, 19 (1959), 413-420.
- 31) Kaiser, H.F.: Comments on communalities and the number of factors. Read at an informal conference, "The communality problem in factor analysis", Washington Univ. St. Louis (dittoed), (1960).
- 32) Kaiser, H.F.: Formulas for component scores, *Psychometrika*, 27 (1962), 33-37.
- 33) Kendall, M.G.: Factor analysis as a statistical technique, *J. Roy. Statist. Soc*, B 12 (1950), 60-73.
- 34) Kendall, M.G. and Lawley, D.N.: The principles of factor analysis, *J. Roy. Statist. Soc.*, A 119 (1950), 60-73.
- 35) Kendall, M.G.: *A course in multivariate analysis*, (1957), London: Charles Griffin and Co.

- 36) Lawley, D.N.: Approximate methods in factor analysis, *Brit. J. Statist. Psychol.*, 13 (1960), 11-17.
- 37) Lawley, D.N.: The estimation of factor loadings by the method of maximum likelihood, *Proc. Roy. Soc. Edin.*, A 40 (1940), 64-82.
- 38) Lawley, D.N.: A modified method of estimation in factor analysis and some large sample results, *Uppsala Symposium on Psychological Factor Analysis, Nordisk Psykologi's on Monograph Series*, 3 (1953), 35-42.
- 39) Lawley, D.N.: A statistical examination of the centroid method, *Proc. Roy. Soc. Edin.*, A 65 (1955), 175-189.
- 40) Lawley, D.N.: Test of significance for the latent roots of covariance and correlation matrices. *Biometrika*, 43 (1956), 128.
- 41) Lawley, D.N.: Estimation in factor analysis under various initial assumptions, *Brit. J. Statist. Psychol.*, 11 (1958), 1-12.
- 42) Lawley, D.N.: Tests of significance for the latent roots of covariance and correlation matrices, *Biometrika*, 43 (1958), 123-138.
- 43) Lawley, D.N. and Maxwell, A.E.: Factor analysis as a statistical method. (1963), London: Butterworth and Co.
- 44) Lorr, M., Klett, C.J. and McNair, D.M.: Syndromes of psychosis (1963), London: Pergamon Press.
- 45) Madansky, A.: Determinantal methods in latent class analysis, *Psychometrika*, 25 (1960), 183-198.
- 46) Maxwell, A.E.: Statistical methods in factor analysis, *Psychol. Bull.* 56 (1959), 223-235.
- 47) Maxwell, A.E.: Recent trends in factor analysis, *J. Roy. Statist. Soc.*, A 124 (1961), 40-59.
- 48) Mood, A.M.: On the distribution of the characteristic roots of normal second-moment matrices. *Ann. Math. Statist.*, 22 (1951), 266.
- 49) Nanda, D.N.: Distribution of a root of a determinantal equation, *Ann. Math. Statist.*, 19 (1948), 47.
- 50) Nanda, D.N.: Limiting distribution of a root of a determinantal equation, *Ann. Math. Statist.*, 19 (1948), 340.
- 51) Neuhaus, J.O., and Wrigley, Chas.: The Quartimax method: An analytical approach to orthogonal simple structure, *Statist. Psych.*, 7 (1954), 81-91.
- 52) Nixon, W.L.B., Gallagher, G. and Maxwell, A.E.: Mercury programme for estimating factor loadings under various initial assumptions, *Laboratory Notes, University of London Computer Unit.* (1962).

- 53) Rao, C.R.: Estimation and tests of significance in factor analysis, *Psychometrika*, 20 (1955), 93-111.
- 54) Pillai, K. C. S.: On the distribution of the largest or the smallest root of a matrix in multivariate analysis, *Biometrika*, 43 (1956), 122.
- 55) Thurstone, L. L.: Multiple factor analysis, University of Chicago Press (1947).
- 56) Thurstone, L. L.: An analytical method of simple structure, *Psychometrika*, 19 (1954), 173-182.
- 57) Torgerson, W. S.: Theory and Methods of Scaling, John Wiley (1958).
- 58) Whittle, P.: A principal components and least squares method of factor analysis, *Skandinavisk Aktuaristidskrifts*, 35 (1953), 223-239.
- 59) Wilkinson, J. H.: Error analysis of eigenvalue techniques based on orthogonal transformations. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 10 (1962), 162-195.
- 60) Fruchter, B.: Introduction to Factor Analysis, D. Van Nostrand Co., Inc., (1967).
- 61) 浅野長一郎: 因子分析法の基礎と応用, 標準化誌, 19-20巻(1966-7)連載, 日本規格協会.
- 62) 浅野長一郎: 因子分析法通論, 共立出版 (1971)

第3章 判別関数法

3.1 概要

いま、 p 種の变量の上で規定される母集団が k 個あり、これら各母集団にはすでに n_1, n_2, \dots, n_k 個の過去の情報が存在している。これをもとに新たに得られた p 変数観測値が k 個の母集団のうちのどの一つに帰属していたものかを知りたい。これを客観的に判別 (classification, discrimination) する経験法則を与える方法が判別関数法 (discriminant analysis) である。

たとえば、ある種の内科領域の診断では、病巣は別でも似たような自覚症状・臨床検査成績を呈することがある。既往の剖検結果別に母集団をつくり、これら諸症候群・検査成績を多変数の観測値と考えるならば、新患の来診時に役だてられる判別関数法の問題となろう。

さて、状態を示す p 種の变量をもつ観測値が、 k ($p > k$) 個の母集団のどれかに属するとして、どのように一つの母集団と判別するのが自然であろうか、この種の問題を一般的に考えよう。ここで注意として、 k 個の母集団はあらかじめ設定されているのであって、過去の異質なデータをいくつかの母集団に分類する問題ではない。また判別は必ず一つの母集団に限られ、いずれにも属さない、または判別を保留するような結論には導かないことを付記しておく。

いま、 k 個の母集団 $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k$ が、それぞれ $p_1(x), p_2(x), \dots, p_k(x)$ なる密度関数を持ち、このおのおのに関し n_1, n_2, \dots, n_k 個のデータがあるとする。さらに、観測値のとりうる空間全体を k 個の互いに素な領域 R_1, R_2, \dots, R_k に分割し、もし新たに得られた観測値が領域 R_i にはいるなら、それは π_i からのものであると結論することにする。この判定で、真には π_i からの観測値が π_j からのものであると誤って判断される損失を $c(j|i)$ 、また π_i からの観測値であるらしい先験的確率 (a priori probability) を q_i とすると、誤った判断を下す確率 $P(j|i, R)$ およびそのような誤ちによる期待損失費用

$$P(j|i, R) = \int_{R_j} p_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.1)$$

$$\sum_i q_i \left\{ \sum_{j \neq i}^k c(j|i) P(j|i, R) \right\} \quad (3.2)$$

は当然であり、この総期待損失費用の式(3.2)を最小ならしめるように、 $R_1, R_2, \dots, R_l, \dots, R_k$ を設定するのが望ましい。このことは、もし

$$\sum_{i \neq l}^k q_i p_i(\mathbf{x}) c(l|i) < \sum_{i \neq j}^k q_i p_i(\mathbf{x}) c(j|i), \quad j=1, 2, \dots, k \quad j \neq l \quad (3.3)$$

すなわち、 i 以外のすべての j の中で、式(3.2)を最小とするような l なら、 \mathbf{x} を π_l からの観測値とみなすように R_l をとらえている。

3.2 2 個の母集団のいずれかに判別する場合

前節の $k=2$ の場合で、式(3.3)から直ちに R_1 および R_2 は次のように得られる。

$$\begin{aligned} R_1: p_1(\mathbf{x})/p_2(\mathbf{x}) &> c(1|2)q_2/c(2|1)q_1 \\ R_2: p_1(\mathbf{x})/p_2(\mathbf{x}) &< c(1|2)q_2/c(2|1)q_1 \end{aligned} \quad (3.4)$$

上式の例として、多次元正規分布の場合を適用してみよう。

A. 等分散共分散母数の値が既知の正規分布 $N(\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{\Sigma})$ の場合 ($i=1, 2$)
第 i 番目の密度関数は

$$p_i(\mathbf{x}) = \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}^{(i)})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}^{(i)}) \right] / (2\pi)^{p/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}, \quad i=1, 2 \quad (3.5)$$

であるから、判別関数は次の線型式で示される。

$$\left. \begin{aligned} R_1: \left[\mathbf{x} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \right]' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) &\geq \log a \\ R_2: \left[\mathbf{x} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \right]' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) &< \log a \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

$$\text{ここに} \quad a = q_2 c(1|2)/q_1 c(2|1) \quad (3.7)$$

この場合の吟味として、誤った判断を下す確率は容易に示され、それぞれ

$$P(2|1) = \Phi\left(\frac{\log a - \frac{d}{2}}{\sqrt{d}}\right), \quad P(1|2) = 1 - \Phi\left(\frac{\log a + \frac{d}{2}}{\sqrt{d}}\right) \quad (3.8)$$

ここに $d \equiv (\mu^{(1)} - \mu^{(2)})' \Sigma^{-1} (\mu^{(1)} - \mu^{(2)})$,

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy / \sqrt{2\pi} \quad (3.9)$$

となり, $q_2 c(1|2) = q_1 c(2|1)$ なら, $P(2|1) = P(1|2) = \Phi(-\sqrt{d}/2)$ となる。

また新たに得た m 個の観測値に関し, この集団全体として, 母集団の帰属を問題とする場合には, m 個による平均値ベクトル \bar{x} を上式の x に, また Σ/m を Σ の代わりに置き替えるとよい。

B. 等分散共分散母数の値が未知の正規分布の場合

いま, 既往情報として $N(\mu^{(i)}, \Sigma)$ からの観測値 $x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{n_i}^{(i)}$, $i = 1, 2$ があり, これをもとに新たな観測値 x が π_1 または π_2 のいずれに属するかを考える。このとき, $\mu^{(i)}$ および Σ の不偏推定量

$$\left. \begin{aligned} \bar{x}^{(i)} &= \sum_{\alpha=1}^{n_i} x_{\alpha}^{(i)} / n_i \\ \text{および} \quad S &= \sum_{i=1}^2 \sum_{\alpha}^{n_i} (x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x}^{(i)})(x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x}^{(i)})' / (n_1 + n_2 - 2) \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

を式 (3.6) 左辺の母数にそれぞれ代入して, この際の線型判別関数を得る。

また m 個の観測値 x_1, x_2, \dots, x_m に関する判別式は, $\bar{x} = \sum_{\alpha}^m x_{\alpha} / m$ として式 (3.10) の S の代わりに, 次式の

$$S = \frac{\left\{ \sum_i \sum_{\alpha}^{n_i} (x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x}^{(i)})(x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x}^{(i)})' + \sum_{\alpha}^m (x_{\alpha} - \bar{x})(x_{\alpha} - \bar{x})' \right\}}{(n_1 + n_2 + m - 3)} \quad (3.11)$$

を, また式 (3.6) の x には \bar{x} を用いればよい。

厳密にはこの母数を推定したときの判別関数は式 (3.2) を最小にするとはいえないが, 直観的に合理的なものとして, 広く応用されている。

3.3 $k(>2)$ 個の正規母集団のいずれかに判別する場合

この場合も、式 (3.3) から直接に判別関数を求めればよいが、簡単に $N(\mu^{(i)}, \Sigma)$ すなわち Σ を共通既知、すべての $c(j|i)$ が等しいとすると、判別関数は線型となり、

$$R_j: u_{ji} \equiv \left[\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mu^{(i)} + \mu^{(j)}) \right]' \Sigma^{-1}(\mu^{(j)} - \mu^{(i)}) > \log(q_i/q_j), \left. \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, k \\ i \neq j \end{array} \right\} \quad (3.12)$$

が得られる。ここに $u_{ji} = -u_{ij}$ であるから、 i と j の異なった組み合わせで、 $k(k-1)/2$ 個の線型判別関数を作ればよいことになる。また Σ が未知であれば、式 (3.10) と同様に Σ の代わりに

$$S = \sum_i^k \sum_a^{n_i} (\mathbf{x}_a^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})(\mathbf{x}_a^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})' / \left(\sum_i^k n_i - k \right)$$

を利用する。また、式 (3.11) の場合にも同様に適用すればよい。

3.4 計算プログラミング

数個の正規母集団のうちの一つに判別する場合

Input		Output	
NG	グループの数	$GM(I, J)$	第 I 群の平均値ベクトル $J=1, 2, \dots, K$
K	変数の数	$A(I, J)$	NG · (NG-1)/2 個の判別関数係数ベクトル $J=K+1, K+2, \dots,$ $\frac{NG \cdot (NG-1)}{2}; I=1, 2, \dots, K$
ND(I)	第 i 群に属する標本の大きさ(数) $I=1, 2, \dots, NG$		
X(I)	観測値ベクトル $I=1, 2, \dots, K$		
		CONS	判別関数の定数項
		DIST	Mahalanobis の距離
		E	判別を誤まる確率: $\{1 - \phi(E)\}$

$A(i, j)$ の内容

K		K+1	K+2					
K	total の 共分散行列	(1, 2)	(1, 3)	(1, 4)	(2, 3)	(2, 4)	

↑
1 群と 2 群の平均値の差のベクトル

上図のように $A(I, J)$ の $K+1$ 列から 1 群と 2 群の平均値の差のベクトル, 1 群と 3 群, ..., 1 群と NG 群, 2 群と 3 群, ..., 2 群と NG 群, ..., $(NG-1)$ 群と NG 群の順にそれぞれの差のベクトルが入っている。

これらの群の対に対する判別関数の係数は計算結果として上の群の対の位置に求まる。

C
C
C
C
C
C
C
C
C
C

DISCRIMINANT FUNCTIONS

CLASSIFICATION INTO ONE OF SEVERAL NORMAL POPULATIONS
WITH A COMMON COVARIANCE MATRIX

NG --- NO. OF GROUPS
ND --- SAMPLE SIZE
K --- NO. OF VARIABLES
SUBROUTINE ROOTS REQUIRED

```

DIMENSION A(20,65),GM(10,20),ND(10),X(20)
COMMON A
1 READ 100,NG,K,(ND(I),I=1,NG)
KK=(NG*NG-NG)/2+K
DO 3 I=1,K
DO 2 J=1,K
2 A(I,J)=0.
DO 3 J=1,NG
3 GM(J,I)=0.
L=0
4 L=L+1
NN=ND(L)
5 READ 101,(X(I),I=1,K)
NN=NN-1
DO 6 I=1,K
GM(L,I)=GM(L,I)+X(I)
DO 6 J=1,K
6 A(I,J)=A(I,J)+X(I)*X(J)
IF(NN)7,7,5
7 IF(L-NG)4,8,8
8 TYPE 200
TN=-NG
DO 11 L=1,NG
FN=ND(L)
TN=TN+FN
TYPE 201,L,ND(L)
DO 10 I=1,K
DO 9 J=1,K
9 A(I,J)=A(I,J)-GM(L,I)*GM(L,J)/FN
10 GM(L,I)=GM(L,I)/FN
11 TYPE 202,(GM(L,I),I=1,K)
DO 12 I=1,K
DO 12 J=1,K
A(I,J)=A(I,J)/TN
12 A(J,I)=A(I,J)
NGL=NG-1

```

```

DO 13 L=1, NGL
  NGF=L+1
  DO 13 I=NGF, NG
    NN=NG*(L-1)+I-(L*(L+1))/2
    II=NN+K
    DO 13 J=1, K
13  A(J, II)=GM(L, J)-GM(I, J)
    CALL ROOTS(K, KK)
    TYPE 203
    DO 15 L=1, NGL
      NGF=L+1
      DO 15 I=NGF, NG
        NN=NG*(L-1)+I-(L*(L+1))/2
        II=K+NN
        TYPE 204, L, I, (A(J, II), J, J=1, K)
        CONS=0.
        DIST=0.
        DO 14 J=1, K
          CONS=CONS-A(J, II)*(GM(L, J)+GM(I, J))/2.0
14  DIST=DIST+A(J, II)*(GM(L, J)-GM(I, J))
          E=0.5*SQRTF(DIST)
15  TYPE 205, CONS, I, L, L, I, L, DIST, E
        GO TO 1
100 FORMAT(2I2, 10I3)
101 FORMAT(2F2.0, F4.0)
200 FORMAT(//10X, 21HDISCRIMINANT FUNCTION///12HMEAN VECTORS)
201 FORMAT(//3X, 12HPOPULATION -, I3, 5X, 11HSAMPLE SIZE, I5/)
202 FORMAT(5(3X, E12.5))
203 FORMAT(//22HDISCRIMINANT FUNCTIONS//19X, 40HQ(I/J)      RATIO OF PRI
10R1 PROBABILITIES/19X, 34HC(I, J/J, I) RATIO OF LOSS FUNCTIONS)
204 FORMAT(/3X, 12HPOPULATION (, I3, 2H -, I3, 2H ), /5X, 12HCOEFFICIENTS, /
1(7X, E12.5, 3H X(, I3, 2H )))
205 FORMAT(7X, E12.5, 7H CONST.//5X, 8H= LOG(Q(, I3, 1H/, I3, 5H )*(, 2I3, 1H
1/, 2I3, 3H ))//5X, 20HMAHALANOBIS DISTANCE/7X, E12.5//5X, 22HE OF MISCL
2ASSIFICATION/7X, E12.5)
END

```

〔付〕 サブ・ルーティン（連立一次方程式の求根）

ROOTS (K, KK)	
$AX_i=B_i$	$i=1, 2, \dots, p$ A マトリックス（既知） B_i ベクトル（既知）において、 X_i ベクトル（未知）を求める
K	A の rank, B_i の要素の数
KK	B_i の数 + K
$A(I, J)$	A : $I=1, 2, \dots, K, J=1, 2, \dots, K$ B : $I=1, 2, \dots, K, J=K+1, \dots, KK$
$N(I)$	計算途中の列の入れ替えをチェックするため $I=1, 2, \dots, K$

K	A	B_1	B_2	B_3
K		KK			

〔解〕 X_i は B_i と同じ位置に求まっている。

C SUBROUTINE OF ROOTS OF SIMULTANEOUS LINEAR EQUATIONS

```

C      K --- RANK OF MATRIX A(I,J)
C      KK --- K + NO. OF CONST. COLUMN VECTOR
C      ROOTS GIVEN AT A(I,J) , I=1,...,K. J=K+1,...,KK.
C
C

```

```

SUBROUTINE ROOTS(K, KK)
DIMENSION A(20, 65), N(20)
COMMON A
DO 1 I=1, K
1  N(I)=1
   I=1
2  L=1
3  IF(A(I, L)) 7, 4, 7
4  IF(L-K) 5, 6, 6
5  L=L+1
   GO TO 3
6  TYPE 200
   STOP 9999
7  IF(I-L) 8, 10, 8
8  DO 9 M=1, K
   TEMP=A(M, I)
   A(M, I)=A(M, L)
9  A(M, L)=TEMP
   ITEMP=N(I)
   N(I)=N(L)
   N(L)=ITEMP
10 TEMP=A(I, I)
   DO 11 J=1, KK
11  A(I, J)=A(I, J)/TEMP
   DO 14 L=1, K
   IF(L-I) 12, 14, 12
12 TEMP=A(L, I)
   DO 13 J=1, KK
13  A(L, J)=A(L, J)-TEMP*A(I, J)
14 CONTINUE
   I=I+1
   IF(I-K-1) 2, 15, 15
15 KF=K+1
   DO 20 I=1, K
   IF(N(I)-1) 16, 20, 16
16 DO 20 J=1, K
   IF(N(J)-1) 19, 17, 19
17 DO 18 L=KF, KK
   TEMP=A(I, L)
   A(I, L)=A(J, L)
18 A(J, L)=TEMP
   GO TO 20
19 CONTINUE
20 CONTINUE
200 FORMAT(5X, 15HDETERMINANT = 0)
RETURN
END

```

3.5 応 用 例

本態性高血圧症の治療は、現在、降圧剤による治療法が中心となっている。そして薬種・薬量・血圧降下目標の設定、また腎・心・脳など臓器への影響が問題となっている。いま、判別関数法の応用例として戸山らの降圧剤の選択法について紹介しよう。このように患者の状態像から血圧降下に有効な薬剤の検討は、同時に薬剤の作用機序を知る手がかりとしても期待されている。

戸山らは、成人病センターで、初診時最高血圧値が 180mmHg 以上で、心電図、心正面 X 線、尿タンパク、PSP 試験 15 分値、眼底検査を受け、RH 系薬剤または TH 系薬剤を2箇月以上通院、服用した患者を選んだ。そして最高血圧が一定期間 159mmHg 以下の症例を有効とし、それ以外を無効例と分類した。このようにして、RH 有効 19 例、TH 有効 27 例、TH 無効 25 例を次の表 3・1 に示す重篤度で症状別に評価した。表 3・2 にこの分布を示す。

表 3・1 戸山らの高血圧重篤度の分類案

点 数 項 目	0	1	2	3	4
心 電 図	正 常	ST 軽度降下 またはT平低	ST 降下また はT陰性	ST 降下T平 低または冠性 T	ST 降下T陰 性または硬塞
心 血 管 肥 大	正 常	左第一弓拡大	SV ₁ +RV ₅ ≥35mm	左 第 四 弓 著 明 拡 大	
尿 タ ン パ ク	(-)	(±)	(+)	(++)	(+++)
PSP	25%以上	24%以下	19%以下	14%以下	9%以下
Scheic 高血圧	0	I	II	III	IV
Scheic動脈硬化	0	I	II	III	IV

ST 軽度降下は 0.5mm 未満降下。

ST 降下は 0.5mm 以上降下。

すなわち、RH 有効群では、心電図で3点以上が1例もなく、心血管肥大も2点以上なく、尿タンパクでは3点が2例、PSP 試験は2点以上がなく、眼底所見では Scheie 高血圧変化で1例、動脈硬化で2例が3点で4点以上は1例もない。また TH 有効群では、心電図で3点が5例、心血管肥大で2点が

表 3・2 治療効果別の重篤度分布

		0	1	2	3	4
心電図	RH (+)	47.4	26.3	26.3	0.0	0.0
	TH (+)	44.4	14.8	22.2	18.5	0.0
	TH (-)	12.0	16.0	20.0	24.0	28.0
心肥大 血管大	RH (+)	36.8	63.2	0.0	0.0	0.0
	TH (+)	33.3	55.6	11.1	0.0	0.0
	TH (-)	0.0	40.0	52.0	8.0	0.0
尿タンパク	RH (+)	36.8	26.3	26.3	10.6	0.0
	TH (+)	29.7	25.9	25.9	14.8	3.7
	TH (-)	16.0	16.0	44.0	20.0	4.0
P S P	RH (+)	84.2	15.8	0.0	0.0	0.0
	TH (+)	63.0	18.5	11.1	3.7	3.7
	TH (-)	32.0	20.0	16.0	20.0	12.0
高血圧	RH (+)	42.1	36.8	15.8	15.3	0.0
	TH (+)	29.6	40.8	14.8	14.8	0.0
	TH (-)	12.0	36.0	36.0	16.0	0.0
動脈硬化	RH (+)	47.4	26.3	15.8	10.6	0.0
	TH (+)	11.1	51.9	18.5	11.1	7.4
	TH (-)	12.0	32.0	24.0	28.0	4.0

3例, 尿タンパク・PSP 試験・Scheie 動脈硬化ではいずれも4点を少数みている。一方, TH 無効群では心電図で4点を7例, 心血管肥大で3点を2例, PSP 試験でも4点を3例, と他の2群に比べ点数の高いものがふえている。すなわち各項目別にみると, RH の有効群は点数の低いものが多く, TH 無効群ではこれに比し点数の高いものが多く, また TH 有効群はこの中間になり, 平均点数をみると RH 有効群で 4.4 点, TH 有効群 6.4 点, TH 無効群 10.4 点となっている。次に, 表 3・2 の分布を, 正規分布するよう重篤度の評価点を変換し, 新患について, TH 有効群と TH 無効群のいずれかに識別するため判別関数法を適用した。これを日常の使用に便利に, 判別係数と各集団の平均値ベクトルを各評価点ごとに翻訳し, 表 3・3 の読取り表を作成した。

この表より, 症例ごとに各項目の点数に相当する値を加え, もし和が負になれば TH 有効とし, 正になれば TH 無効と判定する。たとえばある症例で心電図は1点, 心血管肥大は2点, 尿タンパク1点, PSP 2点, 眼底高血圧2

表 3・3 判別計算の読み取り表

項 目 \ 点 数	0	1	2	3	4
心 A 電 図	-0.24	-0.10	0.06	0.20	0.34
心 B 血 管 肥 大	-0.70	-0.14	0.46	1.02	
尿 C タ ソ ノ バ ク	-0.15	-0.05	0.04	0.13	0.22
D P S P	-0.18	-0.02	0.16	0.32	0.48
E Scheie 高 血 圧	-0.14	-0.04	0.07	0.17	0.28
F Scheie 動 脈 硬 化	-0.08	-0.03	0.02	0.06	0.11

点、動脈硬化 2 点とすると、この症例の総和は $(-0.10) + (0.46) + (-0.05) + (0.16) + (0.07) + (0.02) = 0.56$ と正になるから、この症例は TH 無効であると判定する。これによると、TH 有効群 27 例中総和が負のものは 22 例、正は 5 例、一方 TH 無効群 25 例中総和が負のものは 5 例、正は 20 例となり、両群 52 例中 42 例がこの判別法で適中し、適中率は 80.77% になる。また推定された両集団間のマハラノビスの距離より、式 (3・8) から判別を誤る確率 (誤診率) を求めると、0.1782 となり、約 82% が適中する結果を予測している。

これらをさらに医学的に考察し、降圧作用を有効に示す薬剤の選択に、表 3・1 の分類が有用であり、また将来において、既往臨床検査所見をもとに、治療指針を予測する可能性を指摘している。

戸山、宮川、鈴木、中道：“高血圧症における降圧効果と重症度”，老年病誌，1964，8 巻 5 号，315-9 頁。

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W.: Classification by multivariate analysis, *Psychometrika*, 16 (1951), 31.
- 2) Anderson, T.W.: An introduction to multivariate statistical analysis (1958),

John Wiley & Sons.

- 3) Bartlett, M.S.: The standard errors of discriminant function coefficients, *J. Roy. Statist. Soc. Supp.*, 6 (1939), 169.
- 4) Brown, G.W.: Discriminant functions, *Ann. Math. Statist.*, 18 (1947), 514.
- 5) Bryan, J.G.: The generalized discriminant function: Mathematical foundation and computational routine, *Harvard Educ. Review*, 21 (1951), 90-95.
- 6) Cochran, W.G. and Bliss, C.I.: Discriminant functions with covariance, *Ann. Math. Statist.* 19 (1948), 151.
- 7) Fisher, R.A.: The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Ann. Eugen. Lond.*, 7 (1936), 179.
- 8) Fisher, R.A.: The precision of discriminant functions, *Ann. Eugen. Lond.*, 10 (1940), 422.
- 9) Kendall, M.G.: A course in multivariate analysis (1957), Charles Griffin & Co.
- 10) Lohnes, P.R.: Test space and discriminant space classification models and related significance tests, *Educ. Psych. Meas.*, 21 (1961), 559-574.
- 11) Mises, R. von : On the classification of observation data into distinct groups *Ann. Math. Statist.*, 16 (1945), 68.
- 12) Penrose, L.S.: Some notes on discrimination, *Ann. Eugen. Lond.*, 13 (1947), 228.
- 13) Rao, C.R.: Tests with discriminant functions in multivariate analysis, *Sankhya*, 7 (1946), 407.
- 14) Rao, C.R.: The utilization of multiple measurements in problems of biological classification, *J. Roy. Statist. Soc.*, B.10 (1948), 159.
- 15) Rao, C.R.: Tests of significance in multivariate analysis, *Biometrika*, 35 (1948), 58.
- 16) Rao, C.R.: On the distance between two populations, *Sankhya*, 9 (1948), 246.
- 17) Rao, C.R.: On some problems arising out of discrimination with multiple characters, *Sankhya*, 9 (1949), 343.
- 18) Rao, C.R.: Statistical inference applied to classification problems, *Sankhya*, 10 (1950), 229.
- 19) Rao, C.R.: Advanced statistical methods in biometric research (1952), John Wiley & Sons.
- 20) Rulon, P.J.: Distinctions between discriminant and regression analysis and

a geometric interpretation of the discriminant function : *Harvard Educ. Review*, 21 (1951), 80-90.

第4章 相 関 論

4.1 概 要

A. 相 関 の 立 場

本節の関連では、変量間の関係の深さを測ること、およびある変量の固定された値に対する他変量の平均的な値を評価することがある。すなわち前者は相関論 (theory of correlation) であり、後者は回帰論 (theory of regression) の役めである。これらの研究はすでに古く、17 世紀の初めより体系がきづかれた。回帰 (regression) ということばは、遺伝研究の中で、異常に身長の高い親または低い親の子孫の身長は普通の人の身長に帰る、またはもどる (regress or step back) からきたといわれる。

相関の度合を示すものに、単相関係数 (coefficient of simple correlation), 重相関係数 (coefficient of multiple correlation) および偏相関係数 (coefficient of partial correlation) の3種類が考えられる。概念的に、単相関係数は x と y というような二つの量が観測され、その間にどの程度の線型関係があるかを示し、重相関係数は、ある変量 x に影響する要因が、1 個ではなく、若干個ある場合にそれらが総合して x に及ぼす線型関連の深さをいう。したがって単相関係数は、他に変量があってもこれらの影響を無視して特定の2変量間の関係のみをとりあげた場合で、全相関係数ともよぶ。もし、他の変量は無視しえなければ、これらの値を固定して影響力を除き、特定の2変量間の相関の度合を考えると、これを偏相関係数という。偏相関係数の古典的な例として、父と子の身長間の相関において母の身長をある特定の値 (62 inch) としたときの相関係数があげられる。

変量 x と y の相関関係にも、次のような場合がある。

- i) 二つの品質特性が、製品の硬度と抗張力のように、製品ロットが同時に有する特性同志の場合：このようなときの相関関係は、両者が共通

の根拠（内因因子）による変動の影響を受けて、同時的に変動すると解される。

ii) (x, y) は同一製品のロットから観測される特性で、たとえば含湿度と呈色度のように、まず x が決まり、その影響を受けて y が決まる場合。

iii) x が外部からの加熱温度または気温のような場合：その無作為変動の影響を受けて製品ロットの品質特性 y が変動する場合であり、さらに、この場合次のように分類される。

(a) x は加熱温度のように人為的に制御できる場合。

(b) x は気温または湿度のように自然に変動し、人為的には制御不能範囲の変動の場合。

その他にもいろいろと特殊な場合があり、特性の選択、標本の不偏な抽出法および適切な統計的処理がたいせつである。たとえば、製品の含水率 (y) は乾燥前の含水率 (x) と深い相関関係があるにもかかわらず、 y を測定する際の室内湿度をとりあげ、これとの小さな相関のみを即断的に追求し深い検討を行なわないようなことがある。また解析方法でも y の値は、ある $x = x_i$ で不連続に上昇する性質のあるようなとき、 x_i の付近で観測された資料によって相関関係が有意と判定される場合がある。しかし実は x 値の増加に比例して y 値が増加するという線型の相関関係は存在しないのである。また、 x と y が十分広い範囲では相関関係がある場合でも、 x のごく狭い範囲では y はよい管理状態を示すのみで、真の相関性は認められない。反対に、 x の局所的な範囲では相関性が認められるが、 x の大きな範囲では他要因のため相関性が認められなくなる場合もある。したがって、変量間の相関を論ずる場合には、事象の科学的意義を裏づけながら、その変動域を考慮し解析せねばならない。このためには、あらかじめ散布図を作成し観測値の大局について観察する必要がある。

B. 単相関とその性質

まず古典的な単相関の概念から導入する。いま、二つの確率変数 X, Y があり、この n 個の観測値の組 $\{x_i, y_i\}$ を (x, y) 平面に打点し、散布図を作成する。このとき原点を各算術平均の点 (\bar{x}, \bar{y}) に移し、この新原点を通り、

もとの各軸に平行な軸を x', y' とする。ここで次の種の平均的傾向を考察する。

(1) \bar{x} より大きな x_i に対応する y_i は \bar{y} より大で, \bar{x} より小さな x_i に対応する y_i は \bar{y} より小, すなわち x が増すと y も増加する。

(2) \bar{x} より大きな x_i に対応する y_i は \bar{y} より小で, \bar{x} より小さな x_i に対応する y_i は \bar{y} より大, すなわち x が増すと y は減少する。

(3) \bar{x} より大きな x_i に対応する y_i は \bar{y} の上にも下にも, 大約同数ずつある。ここで (1) を正の相関, (2) を負の相関, (3) を無相関の性質をもつという。 x', y' 軸の象限で, 正の相関には I, III に, 負の相関には II, IV 象限に観測点が集中する。 x', y' 軸に関する点の座標を (x'_i, y'_i) とすると,

$$(1) \sum_{i=1}^n x'_i y'_i > 0 \quad (2) \sum_{i=1}^n x'_i y'_i < 0 \quad (3) \sum_{i=1}^n x'_i y'_i \doteq 0$$

である。ここで相関の目安を $x'_i y'_i$ の積和とし, これを普遍化するため観測数で除して平均化し, x', y' のそれぞれの標準偏差を単位にとり, 相関係数 r を定義する。すなわち,

$$r = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x'_i}{\sigma_x} \right) \left(\frac{y'_i}{\sigma_y} \right) \quad (4.1)$$

上式から, 直接 r に関し, $-1 \leq r \leq 1$ および r の値は原点にも尺度の単位にも無関係な性質が導かれる。

以上はすべて標本相関係数 r についての古典的な考察であるが, これを正規母集団相関係数 ρ と対応すると次のようになる。いま 1 対の変量 X および Y に関して, $x < X < x+dx$ かつ $y < Y < y+dy$ なる確率を次式の $p(x, y) dx dy$

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left[-\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left\{ \frac{(x-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(x-\mu_1)(y-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(y-\mu_2)^2}{\sigma_2^2} \right\} \right] \quad (4.2)$$

とすると, X, Y は 2 変量正規分布をなし, このような母集団を 2 変量正規母集団という。ここに μ_1, μ_2 はそれぞれ X, Y の母平均, $\sigma_1\sigma_2$ はそれぞれ X, Y の母標準偏差, ρ は母相関係数である。また ρ^2, r^2 をそれぞれ母寄与

率，標本寄与率ということがある。

n 組の観測値による相関係数 r の標本分布 $p(r|n, \rho)$ は次式で示される。

i) $\rho=0$ のとき

$$p(r|n, \rho=0) = I' \left(\frac{n-1}{2} \right) (1-r^2)^{n-4/2} / \sqrt{\pi} \Gamma \left(\frac{n-2}{2} \right) \quad (4.3)$$

ii) $\rho \neq 0$ のとき

$$p(r|n, \rho) = \frac{(1-\rho^2)^{n-1/2}}{\pi(n-3)!} (1-r^2)^{n-4/2} \frac{d^{n-2}}{d(r\rho)^{n-2}} \left(\frac{\cos^{-1}(-\rho r)}{\sqrt{1-\rho^2 r^2}} \right) \quad (4.4)$$

これで r の標本分布は完全に解けたわけであるが，これらの関数値とその積分を求めるには相当の労力を要する。これに関し，すでに数値表が数十頁にわたって作成されている。

次に r に関する諸性質をまとめておく。

a. $\rho=0$ の仮説検定

r としてゼロでない値が算出されたとしても， $\rho=0$ からの任意標本ならその程度の値はざらに出て来るかもしれない。そこで $\rho=0$ なる仮説を十分な信頼度（たとえば 95%）で棄却できるか否か検定しなければならない。すなわち $\rho=0$ の仮説の下で，上のような r の値が現われることがほとんどない，または当然起こりうる，というようなことを証明するわけである。検定法は次のようになる。 $\rho=0$ を仮説とする場合には

$$t_0 = r \sqrt{n-2} / (1-r^2) \quad (4.5)$$

とおき，式 (4.5) を r の式として式 (4.3) に代入すると， t_0 は自由度 $(n-2)$ の t 分布に従うことがわかる。ゆえに 2 変量母集団の $\rho=0$ に関する検定は， t 分布を利用する。または $t_0^2 = F_0$ として F 分布を利用してもよい。すなわち，自由度を $(n-2)$ の $t_{0.05}$ の値と比較して， $t_0 > t_{0.05}$ ならば，仮説 $\rho=0$ は棄却される。また，上の標本分布の式から， n が十分大なら

$$\sigma_r = \frac{1-\rho^2}{\sqrt{n-1}} \left\{ 1 + \frac{11\rho^2}{4(n-1)} + \dots \right\} \sim \frac{1-r^2}{\sqrt{n-1}} \quad (4.6)$$

が導かれ，大標本の場合の検定に利用されることもある。

b. ρ の信頼限界

いま, α が指定されたとき

$$\int_{r_1}^1 p(r|n, \rho) dr = \int_{-1}^{r_2} p(r|n, \rho) dr = \alpha \quad (4.7)$$

となる r_1, r_2 を各 n, ρ に関して求める。この r_1, r_2 はもちろん n と ρ の関数だから $r=r_1(n, \rho)$, $r=r_2(n, \rho)$ とし, それぞれの逆関数を $\rho=\rho_1(n, r)$, $\rho=\rho_2(n, r)$ とする。この定義より標本相関係数 r_0 が得られたとき, r_0 を上の関数 ρ_1, ρ_2 に入れると, 母相関係数 $\rho=\rho_1(n, r_0)$ のとき $r \geq r_0$ となる確率は, $\rho=\rho_2(n, r_0)$ のとき, $r \leq r_0$ となる確率と等しく, いずれも α になる。ここに ρ_1, ρ_2 は信頼限界とよばれる量で, ρ_1, ρ_2 で囲まれる部分を信頼区間, $(1-2\alpha)$ を信頼度 (または信頼係数) という。信頼区間を計算する代わりに, n, r_0 および α を与えて, ρ_1, ρ_2 を読み取る図表が得られている。また, この図表により一般の ρ 値に関する仮説検定も行なえる。

c. フィッシャー (Fisher) の Z 変換

r の分布が複雑な式で表現されるために, これを適当な変数変換によって, 取り扱いの容易な正規分布の型に近づける工夫がなされた。Fisher は漸近的に母分散を安定化するために,

$$Z = \frac{1}{2} \log_e \frac{1+r_0}{1-r_0} \quad (4.8)$$

なる変換を行なうと, Z の分布は母平均 ζ , 母標準偏差 $1/\sqrt{n-3}$ の正規分布で近似的に良く表わされることを提唱した。ここに $2\zeta \equiv \log(1+\rho/1-\rho)$ 。この変換を Z -変換とよぶ。この場合, n が 10 以上ならば正規分布と考えて支障なく

$$t_0 = (Z - \zeta) \sqrt{n-3} \quad (4.9)$$

は $N(0, 1)$ に従う。この性質によって信頼区間や ρ に関する検定がなされる。

d. 相関比 (correlation ratio)

相関論は, 変量間の関係を線型性でとらえようとするものであるが, 線型でない関連性を r で検討することは妥当でない。線型関係でないときには, 一元配置法 (統計的実験計画法) のように, 観測値の全分散を級間と級内の分散に

分けて考察する必要がある。いま σ^2_Y を変量 Y の分散, $\sigma^2_{Y(x)}$ を変量 X のある固定した値での Y の分散として,

$$\eta_{Y,X} = \sqrt{1 - \{\sigma^2_{Y(x)} / \sigma^2_Y\}} \quad (4.10)$$

で X の上の Y の母相関比を定義する。ここに, $\sigma^2_{Y(x)}$ は級内分散, $\sigma^2_Y - \sigma^2_{Y(x)}$ は級間分散に相当する。定義から, 直ちに $1 \geq \eta^2_{Y,X} \geq \rho^2$ が導かれる。 X と Y が一次性のときは X に対する係数が $\rho\sigma_Y/\sigma_X$ となるから, $\eta^2_{Y,X} = \rho^2$, すなわち, 母相関比と母相関係数は一致する。

X の上の Y の標本相関比は, X の上で観測値 x_i を 2 個以上含むよう適当に小さく級分けし, 各級の中で y_i の分散を求め, $\sigma^2_{Y(x)}$ の推定値 $s^2_{y(x)}$, また Y の全観測値 y_i から全分散 s_y^2 を求め, σ^2_Y の推定値として式 (4.10) に代入して得る。すなわち

$$\hat{\eta}_{y,x} = \sqrt{1 - \{s^2_{y(x)} / s_y^2\}} \quad (4.11)$$

を標本相関比とし, X と Y が線型に限らず, 一般に複雑な 1 価の関数関係をもつときの関連性の度合とする。したがって $(\hat{\eta}^2_{y,x} - r^2)$ は関連性が線型であるか否かの判定に利用される。

X, Y について, $\rho=0$ の正規分布を仮説とし, x_i の級数を k とおくと

$$F_0 = (n-k)\hat{\eta}^2_{y,x} / (k-1)(1-\hat{\eta}^2_{y,x}) \quad (4.12)$$

は自由度対 $(k-1, n-k)$ の F 分布に従い, $\hat{\eta}_{y,x}$ の有意性を検定しうる。

4.2 重 相 関 分 析

A. 重相関係数 (multiple correlation coefficient)

これまでの単相関係数は, 単に 2 変量間の相関性の度合を示したが, 一般に一つの変量に影響を与える $k-1$ 個 ($k>3$) の因子が存在するとき, 前者 x_1 と後者の群 (x_2, \dots, x_k) の間の相関の度合について考える。ある薬品の呈色度 (x_1) はその薬品に含まれるある不純物の量 (x_2) と含湿度 (x_3) の影響を受けるような場合である。

いま母単相関係数を要素とする相関行列を $P \equiv (\rho_{ij})$ とし, ρ_{11} の余因子を $|P_{11}|$ で定義する。このとき, 母重相関係数 $\rho_{1.23\dots k}$ を $\rho_{1.23\dots k} = \sqrt{1 - |P|/|P_{11}|}$

で定義すると、標本重相関係数 $r_{1.23\cdots k}$ は、最尤推定量として、上式 P のすべての ρ_{ij} を r_{ij} で置き換え次式で得られる。

$$r_{1.23\cdots k} = \sqrt{1 - |\mathbf{R}|/|\mathbf{R}_{11}|} \quad (4.13)$$

ここに重相関係数 $\rho_{1.23\cdots k}$ および $r_{1.23\cdots k}$ はそのまま、前節の2変量の際の相関比を k 変量に拡張したものである。また重相関係数の2乗を寄与率または関与率ともよんでいる。 k 個の変量が、 k 次元正規分布するとして、 x_1 と (x_2, x_3, \cdots, x_k) の母重相関係数がゼロの場合、標本重相関係数の分布は容易で $r_{1.23\cdots k}^2$ の確率密度関数は、 $r_{1.23\cdots k}^2 \equiv r_M^2$ と略記して

$$(r_M^2)^{k-3/2} (1-r_M^2)^{n-k-2/2} d(r_M^2) / B\left(\frac{k-1}{2}, \frac{n-k}{2}\right) \quad (4.14)$$

となり、不完全ベータ関数で検定ができる。すなわち、仮説 $H_0: \rho_{1.23\cdots k} = 0$ のもとで

$$F_0 = (n-k)r_M^2 / \{(k-1)(1-r_M^2)\} \quad (4.15)$$

なる F_0 を算出すれば、危険率 α の自由度対 $(k-1, n-k)$ の F 値と比較して、仮説 H_0 が検定できる。

B. 確率楕円 (棄却楕円, probable ellipse, toleranse ellipse)

k 個の変量を要素とするベクトル X が $N(\mu, \Sigma)$ に従い、この観測値として n 個のベクトル x_1, x_2, \cdots, x_n を得たとする。いま、新たな観測値 x がさきと同一母集団に属するものか否か、危険率 α で判定したい。これには Hotelling の T^2 統計量を適用し、 F 分布の自由度対 $(k, n-k)$ で確率 $1-\alpha$ の値 $F_{n-k}^k(\alpha)$ 値によって、次式

$$n(n-k)(X-\bar{x})'A^{-1}(X-\bar{x}) / \{k(n+1)F_{n-k}^k(\alpha)\} = 1 \quad (4.16)$$

で示される k 次元楕円を棄却限界とすればよい。ここに $\bar{x} \equiv \sum_{i=1}^n x_i / n$, $A \equiv \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})'$ 。

また、 Σ を共通とする、新たな m 個の観測値の集団について、上のような判定を行なうには

$$\frac{mn(m+n-k-1)(\bar{x}^{(1)} - \bar{x}^{(2)})'A_{1+2}^{-1}(\bar{x}^{(1)} - \bar{x}^{(2)})}{k(m+n)F_{m+n-k-1}^k(\alpha)} = 1 \quad (4.17)$$

を適用すればよい。ここに $A_{1+2} \equiv \sum_i^n (x_i^{(1)} - \bar{x}^{(1)})(x_i^{(1)} - \bar{x}^{(1)})' + \sum_i^m (x_i^{(2)} - \bar{x}^{(2)})(x_i^{(2)} - \bar{x}^{(2)})'$ 。

もし、 x_1, x_2, \dots, x_n からの \bar{x} について、信頼度 $1-\alpha$ の信頼限界を求めらば

$$n(n-k)(\bar{x} - \mu)' A^{-1} (\bar{x} - \mu) / k F_{n-k}^k(\alpha) = 1 \quad (4.18)$$

で与えられ、上式左辺は μ の要素 $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ についての正定値二次形式で信頼楕円体 (confidence ellipsoid) とよばれるものである。

秋山・岡本・坂本らは、本態性高血圧の収縮期圧と拡張期圧の分布がそれぞれ対数正規型であることから、 $k=2$ の式 (4.16) または (4.17) により、経年・季節・年令・病状などに層別した棄却楕円を種々作成している。そして、この血圧楕円により治療指針や血圧管理方式の検討を行なっている。

4.3 偏 相 関

A. 偏相関係数 (partial correlation)

k 種の変量 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_k$ のうち、たとえば、 $x_3 \dots x_k$ の値を一定に保ったときの x_1 と x_2 の相関係数を $r_{12.3 \dots k}$ で表わし、これを標本偏相関係数という。米の収獲量は、雨量、日照量、地味、施肥量、栽培法などに関係するが、これらの諸要因条件のうち、いくつかの要因は、任意に変えることができない。いま、米の収獲量と雨量だけの相関を知る場合、ただ記録された雨量と、米の収獲量との間の全相関をみたのでは、他の諸要因条件が一定していなければ両者間の相関は知られない。すなわち、一連の観察記録で地味や施肥量や栽培法を一定に保ったとしても、日照量が一定でないのが普通であり、また収獲量と雨量との間の相関性は、気温にも影響されていると考えられるからである。そこで他の諸要因条件が一定しているとき、収獲量と雨量との間にどの程度の相関があるかを知るための方法が必要になる。偏相関の考え方はこのような必要性から生じる。

ここで、 $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ を確率素分として、 x_1 および x_2 がそれぞれ $x_3,$

x_4, \dots, x_k から線型の影響を受けている分を

$$\tilde{x}_i(3, 4, \dots, k) = \sum_{t=3}^k B_{it} x_t = \int_{-\infty}^{\infty} x_i f(x_i | x_3, \dots, x_k) dx_i, \quad i=1, 2 \quad (4.19)$$

で示すと, x_i から $\tilde{x}_i(3, 4, \dots, k)$ を除去した残差の間についてのみ, 純粋に x_1 と x_2 だけの相関を考える。したがって, x_1 と x_2 の偏相関係数 $\rho_{12 \cdot 34 \dots k}$ は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \rho_{12 \cdot 34 \dots k} &\equiv \text{Cor.} \{ (x_1 - \tilde{x}_1(3, 4, \dots, k)) (x_2 - \tilde{x}_2(3, 4, \dots, k)) \} \\ &= \frac{E \{ (x_1 - \tilde{x}_1(3, 4, \dots, k)) (x_2 - \tilde{x}_2(3, 4, \dots, k)) \}}{\sqrt{V(x_1 - \tilde{x}_1(3, 4, \dots, k)) \cdot V(x_2 - \tilde{x}_2(3, 4, \dots, k))}} \quad (4.20) \end{aligned}$$

いま, 前節と同じ記号で, 母相関行列を P とし, P における ρ_{ij} の余因子を $|P_{ij}|$ とする。このとき x_3, x_4, \dots, x_k を一定にし, x_1 と x_2 の間の母偏相関係数 $\rho_{12 \cdot 34 \dots k}$ は $-|P_{12}| / \sqrt{|P_{11}| \cdot |P_{22}|}$ で定義され, この最尤法による標本偏相関係数, $r_{12 \cdot 34 \dots k}$ は次式で示される。

$$r_{12 \cdot 34 \dots k} = -|R_{12}| / \sqrt{|R_{11}| |R_{22}|} \quad (4.21)$$

ここに R_{12}, R_{11}, R_{22} は, P_{12}, P_{11}, P_{22} における ρ_{ij} を全相関 r_{ij} でおき替えたものである。

偏相関係数と重相関係数との関係は, $|R_{1122}|$ を R_{11} における r_{22} の余因子とすると,

$$\begin{aligned} 1 - r_{12 \cdot 34 \dots k}^2 &= |R| \cdot |R_{1122}| / |R_{11}| \cdot |R_{22}| \\ &= (1 - r_{1 \cdot 23 \dots k}^2) / (1 - r_{1 \cdot 34 \dots k}^2) \quad (4.22) \end{aligned}$$

母偏相関係数 $\rho_{12 \cdot 34 \dots k}$ がゼロであるという仮説 (H_0) を検定するには, 標本偏相関係数 $r_{12 \cdot 34 \dots k}$ を算出し, 次の統計量について t 検定すればよい。

$$t_0 = \sqrt{n-k} \cdot r_{12 \cdot 34 \dots k} / \sqrt{1 - r_{12 \cdot 34 \dots k}^2} \quad (4.23)$$

ここに t_0 の自由度は $n-k$ である。

B. 偏回帰係数 (partial regression coefficient)

いま, 変量 x_1 が変量 x_2, x_3, \dots, x_k から受ける影響が線型であるとして, 式 (4.19) の記法で

$$\tilde{x}_1(2, 3, \dots, k) = \sum_{t=2}^k B_{1t} x_t \quad (4.24)$$

とする。このとき、 B_{1t} はいかに推定されるであろうか。最小2乗法（最尤法でも同じ）によると、 \mathbf{R} の r_{ij} に関する余因子を $|R_{ij}|$ とすると

$$\hat{B}_{1t} = -\frac{s_1}{s_t} \frac{|R_{1t}|}{|R_{11}|}, \quad t=2, 3, \dots, k \quad (4.25)$$

で与えられる。これを偏回帰係数という。したがって、式 (4.24) は

$$\tilde{x}_{1(2,3,\dots,k)} = -s_1 \sum_{t=2}^k \frac{|R_{1t}|}{|R_{11}|} \frac{x_t}{s_t} \quad (4.26)$$

で示され、この分散は次式で与えられる。

$$V(\tilde{x}_{1(2,3,\dots,k)}) = |\mathbf{P}| \sigma^2_1 / |\mathbf{P}_{11}| \quad (4.27)$$

ここで、元来 x_1 の分散は σ^2_1 であり、式 (4.27) との差は

$$(1 - |\mathbf{P}| / |\mathbf{P}_{11}|) \sigma^2_1 = \rho^2_{1,23\dots k} \sigma^2_1 \quad (4.28)$$

となり、重相関係数はこのように定義されているのである。

以上では原点の座標をすべてゼロと考えたが、一般の回帰平面では $\tilde{x}_{1(2,3,\dots,k)}$, x_2, \dots, x_k を $\bar{x}_{1.}$, $\bar{x}_{2.}$, \dots , $\bar{x}_{k.}$ だけ移動して式 (4.26) は次式に整理される。

$$\sum_{i=1}^k \frac{(x_i - \bar{x}_{i.}) |R_{1i}|}{s_i} = 0, \quad \bar{x}_{i.} \equiv \frac{\sum_{\alpha} x_{i\alpha}}{n} \quad (4.29)$$

4.4 計算プログラミング

A. 相関行列と分散共分散行列

Input		Output	
IRANK	分散共分散行列のランク	SS(I, J)	対角線より上は相関行列 対角線を含めてそれより下は分散共分散行列
X(I)	観測値ベクトル $I=1, 2, \dots, \text{IRANK}$		
ENDC	全観測値ベクトルの読み取り終了を示す値。最終カードの X(1) に相当する列にこの値を入れる	S(I)	平均値ベクトル $I=1, 2, \dots, \text{IRANK}$
		SD(I)	標準偏差ベクトル $I=1, 2, \dots, \text{IRANK}$
		CV(I)	変動係数ベクトル $I=1, 2, \dots, \text{IRANK}$

C
C
C
C
C
C
C
C
C
C
C

CORRELATION MATRIX AND
COVARIANCE MATRIX
WITH MEAN, S.D. AND C.V.

IRANK --- NO. OF VARIABLES
ENDC --- END MARK IN LAST CARD
MATRICES SHOWN WITH TRIANGLE FORM IN A SQUARE
CORRL. MATRIX SHOWN UPSIDE RIGHT.
VAR-COV MATRIX SHOWN DIAGONAL AND DOWNSIDE LEFT.

```

DIMENSION S(30), SS(30,30), X(30), NV(30), SD(30), CV(30)
1 READ 100, IRANK
  READ 101, ENDC
  IR=IRANK-1
2 DO 3 I=1, IRANK
  NV(I)=1
  S(I)=0.0
  DO 3 J=1, IRANK
3 SS(I,J)=0.0
  N=0
4 READ 101, (X(I), I=1, IRANK)
  IF(X(1)-ENDC) 5,7,5
5 DO 6 I=1, IRANK
  S(I)=S(I)+X(I)
  DO 6 J=1, IRANK
6 SS(I,J)=SS(I,J)+X(I)*X(J)
  N=N+1
  GO TO 4
7 AN=N
  DO 8 I=1, IRANK
  DO 8 J=1, IRANK
  SS(I,J)=(SS(I,J)-S(I)*S(J)/AN)/AN
8 SS(J,I)=SS(I,J)
  DO 9 I=1, IRANK
  SD(I)=SS(I,I)**0.5
  S(I)=S(I)/AN
9 CV(I)=SD(I)/S(I)
  DO 10 I=1, IR
  DO 10 J=1, IR
10 SS(I,J+1)=SS(I,J+1)/(SS(I,I)*SS(J+1,J+1))**0.5
  KS=1
  KE=5
  TYPE 205
11 IF(IRANK-KE) 12,12,13
12 KE=IRANK
13 TYPE 200, (NV(I), I=KS, KE)
  DO 14 I=1, IRANK
14 TYPE 201, I, (SS(I,J), J=KS, KE)
  IF(IRANK-KE) 16,16,15
15 KS=KE+1
  KE=KE+5
  GO TO 11
16 TYPE 202
  TYPE 203
  DO 17 I=1, IRANK
17 TYPE 204, I, S(I), SD(I), CV(I)
  DO 18 I=1, IRANK
  DO 18 J=1, IRANK
  SS(J,I)=SS(I,J)
18 SS(I,I)=1.0
  DO 19 I=1, IRANK

```

```

19 PUNCH 300, (SS(I, J), J=1, IRANK)
GO TO 1
100 FORMAT (15)
101 FORMAT (13F6.4)
200 FORMAT (/ , 5(9X, 15))
201 FORMAT (/ , 13, 3X, 5(2X, E12.5))
202 FORMAT(10X, 25HVAR-COV TRIANGULAR MATRIX, /)
203 FORMAT(10X, 4HMEAN, 9X, 4HS.D., 9X, 4HC.V., /)
204 FORMAT(13, 3X, 3(E12.5, 1X), /)
205 FORMAT(42X, 26HCORRELATION TRIANG. MATRIX, /)
300 FORMAT(6E12.5)
END

```

B. 単相関行列・偏相関行列および重相関係数

Input		Output	
K	変数の数	R(I, J)	第 I, J 変量間の単純相関係数 第 I, J 変量に関する偏相関係数 I, J=1, 2, ..., K
X(I)	観測値ベクトル		
		X(I)	第 I 変量に関する重相関係数

C SIMPLE CORRELATION MATRIX,
C PARTIAL CORRELATION MATRIX AND
C MULTIPLE CORRELATION MATRIX

K --- NO. OF VARIABLES
SUBROUTINE MATINV REQUIRED

C
C
C
C
C
C
C
C

```

DIMENSION R(30, 31), S(30), X(30)
COMMON R
1 READ 100, K
DO 2 I=1, K
S(I)=0.0
DO 2 J=1, K
2 R(I, J)=0.0
N=0
3 READ 101, (X(I), I=1, K)
IF(X(1)-99999.0) 4, 6, 6
4 N=N+1
DO 5 I=1, K
S(I)=S(I)+X(I)
DO 5 J=1, K
5 R(I, J)=R(I, J)+X(I)*X(J)
GO TO 3
6 FN=N
DO 7 I=1, K
TMP1=FN*R(I, I)-S(I)*S(I)
DO 7 J=1, K
TMP2=FN*R(I, J)-S(I)*S(J)
TMP3=FN*R(J, J)-S(J)*S(J)
R(I, J)=TMP2/SQRTF(TMP1*TMP3)
7 R(J, I)=R(I, J)
TYPE 200
DO 8 I=1, K
TYPE 201, I, (R(I, J), J=1, K)
8 PUNCH 300, (R(I, J), J=1, K)
CALL MATINV(K, R)
TYPE 202

```

```

DO 9 I=1,K
X(I)=SQRTF(1.0-1.0/R(I,I))
9 TYPE 203,I,X(I)
TYPE 204
KP=K-1
DO 11 I=1,KP
L=I+1
DO 10 J=L,K
R(I,J)=-R(I,J)/SQRTF(R(I,I)*R(J,J))
DO 11 J=L,K
11 TYPE 205,I,J,R(I,J)
GO TO 1
100 FORMAT(15)
101 FORMAT(10F5.0)
200 FORMAT(/,18HCORRELATION MATRIX,/)
201 FORMAT(7X,12/5(2X,E12.5))
202 FORMAT(/,33HMULTIPLE CORRELATION COEFFICIENTS,/)
203 FORMAT(10X,2HR(,12,1H-,7HOTHERS),2X,E12.5)
204 FORMAT(/,26HPARTIAL CORRELATION MATRIX,/)
205 FORMAT(10X,2H(R,12,1H-,12,1H),6X,E12.5)
300 FORMAT(5E12.5)
END

```

[付] サブ・ルーティン (逆行列算出)

MATINV(K)	
K	行列のランク
A(I,J)	行列は A(I,J) I=1,...,K+1: J=2,...,K+1
N(I)	計算途中に列を入れ替えたときにそれを check するため

C SUBROUTINE OF MATRIX INVERSION

C
C
C
C
C
C
C

K —— RANK OF MATRIX

```

SUBROUTINE MATINV(K,A)
DIMENSION A(30,31),N(30)
COMMON A
KK=K+1
DO 2 I=1,K
DO 1 J=1,K
JJ=K+1-J
1 A(I,JJ+1)=A(I,JJ)
A(I,1)=0.
2 N(I)=1
A(1,1)=1.
I=1
3 L=I+1
4 IF(A(I,L))8,5,8
5 IF(KK-L)6,7,6
6 L=L+1
GO TO 4
7 TYPE 200
STOP9999
8 IF(1-L+1)9,11,9
9 DO 10 M=1,K
TEMP=A(M,I+1)
A(M,I+1)=A(M,L)

```

```

10 A(M,L)=TEMP
   ITEMP=N(I)
   N(I)=N(L-1)
   N(L-1)=ITEMP
11 TEMP=A(I,I+1)
   DO 12 J=1,KK
12 A(I,J)=A(I,J)/TEMP
   DO 15 L=1,K
   IF(L-1)13,15,13
13 TEMP=A(L,I+1)
   DO 14 J=1,KK
14 A(L,J)=A(L,J)-TEMP*A(I,J)
15 CONTINUE
   A(I,I+1)=0.
   A(I+1,I+1)=1.
   I=I+1
   IF(I-K-1)3,16,16
16 DO 21 I=1,K
   IF(N(I)-1)17,21,17
17 DO 20 J=1,K
   IF(N(J)-1)20,18,20
18 DO 19 L=1,K
   TEMP=A(I,L)
   A(I,L)=A(J,L)
19 A(J,L)=TEMP
   GO TO 21
20 CONTINUE
21 CONTINUE
   RETURN
200 FORMAT(5X,15HDETERMINANT = 0)
   END

```

C. 2次元棄却楕円の作図

Input		Output	
<i>XMIN</i> <i>XMAX</i>	<i>X</i> の観測値の最小値と最大値	<i>MB</i>	作図 (順) 番号
<i>YMIN</i> <i>YMAX</i>	<i>Y</i> の観測値の最小値と最大値		
<i>XD</i> <i>YD</i>	グラフの一目盛の値	<i>SS2, S12</i> <i>SS1, CONS</i>	楕円の式における X^2, XY, Y^2 の係数と定数項を示す
<i>XL</i> <i>YL</i>	グラフの <i>X</i> 軸, <i>Y</i> 軸の実際上の長さ (inch 単位)	<i>A1, A2</i>	楕円の中心で変量 <i>X, Y</i> の平均値
<i>NPC</i>	1枚のカードにある観測値対 (<i>X, Y</i>) の数	<i>TAN</i>	楕円の傾斜を示す $\tan 2\theta$ の値
<i>PRC</i>	棄却楕円を書くときの <i>Y</i> 軸方向の1単位の歩み		
<i>RISK</i>	棄却楕円の危険率	<i>N</i>	標本の大きさ
<i>F</i>	上記の危険率における <i>F</i> -分布の値		
<i>IND</i>	整理番号	<i>SCX</i> <i>SCY</i>	$\frac{XMAX + XMIN}{2},$ $\frac{YMAX + YMIN}{2}$ の値
<i>X1(I)</i> <i>X2(I)</i>	第 <i>I</i> 観測値の <i>X, Y</i> 値		

```

C      TOLERANCE ELLIPSE,
C      DRAWING TWO DIMENSIONAL CASE
C
C      XMIN,XMAX,YMIN,YMAX --- FRAME OF FIGURE
C      XL,YL --- SCALE INTERVAL OF LINES DRAWN IN FRAME
C      XD,YD --- INCHES OF SCALE INTERVAL
C      IND --- STUDY CASE NO.
C      IK --- SAMPLE NO.
C      X(1),X(2) --- TWO DIMENSIONAL VARIABLE
C      PLOTTER AND CALL PLOT-,CALL CHAR- SUBROUTINES REQUIRED
C
C
C      DIMENSION X1(10),X2(10),EY(50),EXL(50),EXU(50)
C      ICC=7
C      ICC=99
C      IA=90
C      IB=0
C      MB=1
1 READ 100,XMIN,XMAX,XL,XD,YMIN,YMAX,YL,YD
  YDEL=(YMAX-YMIN)/50.0
  SCX=(XMAX+XMIN)/2.0
  SCY=(YMAX+YMIN)/2.0
  READ 101,NPC,PRC,F,RISK
  IC=101
  CALL PLOT (IC,XMIN,XMAX,XL,XD,YMIN,YMAX,YL,YD)
  READ 102,IND
  T1=0.
  T2=0.
  T12=0.
  T21=0.
  T22=0.
  N=0
2 READ 103,IK,(X1(1),X2(1),I=1,NPC)
  IF(X1(1)-999.)3,7,3
3 DO 6 I=1,NPC
  IF(X1(I))5,4,5
4 IF(X2(I))5,6,5
5 T1=T1+X1(I)
  T2=T2+X2(I)
  T12=T12+X1(I)*X2(I)
  T21=T21+X1(I)*X1(I)
  T22=T22+X2(I)*X2(I)
  N=N+1
6 CONTINUE
  GO TO 2
7 DD=N
8 A1=T1/DD
  A2=T2/DD
  SS1=T21-(T1*T1)/DD
  SS2=T22-(T2*T2)/DD
  S12=T12-(T1*T2)/DD
  DET=(SS1*SS2)-(S12*S12)
  CONS=2.*F*DET*(DD+1.)/(DD*(DD-2.))
  CALL PLOT (IB,A1,A2)
  CALL PLOT (ICC)
  FK=0.
  ME=0
9 FK=FK+PRC
  IF(FK-41.0) 10,10,13
10 Y=(YMAX-(FK-PRC)*YDEL)-A2
  IF(Y)13,11,11
11 SIGN=S12*S12*Y*Y-SS2*(SS1*Y*Y-CONS)
  IF(SIGN) 9,12,12

```

```

12 S=SQRTF(SIGN)
   ME=ME+1
   EY(ME)=Y
   EXL(ME)=(S12*Y-S)/SS2+A1
   EXU(ME)=EXL(ME)+(2.*S)/SS2
   GO TO 9
13 IRE=0
   A3=2.0*A1
   IC=90
14 DO 15 I=1,ME
   J=ME-I+1
   X=EXL(J)
   EXL(J)=A3-X
   Y=EY(J)+A2
15 CALL PLOT (IC,X,Y)
   DO 16 I=1,ME
   X=EXU(I)
   Y=EY(I)+A2
   EXU(I)=A3-X
   EY(I)=-EY(I)
16 CALL PLOT (IC,X,Y)
   IRE=IRE+1
   IF(IRE-1) 19,14,17
17 TAN=(-2.*S12)/(SS2-SS1)
   X=EXL(ME)
   Y=EY(ME)+A2
   CALL PLOT (IC,X,Y)
   CALL PLOT (ICC)
   YPI=0.1*(YMAX-YMIN)/YL
   XPI=0.1*(XMAX-XMIN)/XL
   X=XMIN-5.0*XPI
   Y=YMAX+30.0*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (0,0.1,0)
200 FORMAT (53HTOLERANCE ELLIPSE FOR ---- INSERT SUBJECT HERE ----)
   Y=Y-4.0*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,MB)
201 FORMAT (41H
   Y=Y-4.0*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,IND)
202 FORMAT (9HCASE NO. ,13)
   Y=Y-3.5*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   S12=2.*S12
   CALL CHAR (4,0.1,0,SS2,S12,SS1,CONS)
203 FORMAT (E9.2,4HV*V ,E9.2,4HV*U ,E9.2,6HU*U = ,E9.2)
   Y=Y-2.0*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (2,0.1,0,A1,A2)
204 FORMAT (14HCENTER POINT (,F8.1,2H ,,F8.1,2H ),20HWHERE V=Y-A2, U=X
1-A1)
   Y=Y-2.0*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (3,0.1,0,TAN,RISK,N)
205 FORMAT (8HTAN2Q = ,E11.4,2H ,,9H RISK = ,F5.3,7H, ND = ,14)
C TO INDICATE SCALES FOR GRAPH
   Y=YMAX-0.5*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,YMAX)
206 FORMAT (F5.0)
   Y=SCY-0.5*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,SCY)

```

```

207 FORMAT (F5.0)
   Y=YMIN-0.5*YPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,YMIN)
208 FORMAT (F5.0)
   Y=Y-2.0*YPI
   X=XMIN-3.5*XPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,XMIN)
209 FORMAT (F5.0)
   X=SCX-2.5*XPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,SCX)
210 FORMAT (F5.0)
   X=XMAX-2.5*XPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (1,0.1,0,XMAX)
211 FORMAT (F5.0)
   X=SCX+0.45*(XMAX-SCX)
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (0,0.1,0)
212 FORMAT (1HX)
   Y=SCY+0.45*(YMAX-SCY)
   X=XMIN-4.0*XPI
   CALL PLOT (IA,X,Y)
   CALL CHAR (0,0.1,0)
213 FORMAT (1HY)
   MB=MB+1
   CALL PLOT (ICCC)
   IF (XL-3.5) 18,1,1
18 CALL PLOT (ICCC)
   GO TO 1
100 FORMAT (8F5.1)
101 FORMAT (12,F3.1,F4.2,F5.3)
102 FORMAT (13)
103 FORMAT (13,20F3.0)
19 STOP
END

```

4.5 応 用 例

工場の品質管理部門で、ある化学薬品の精製工程における呈色度 x_1 は、その薬品に含まれるある微量不純物質の量 x_2 と含湿度 x_3 によって近似的に線型の影響を受けると考えられていた。このことを現在の改良された反応条件下で検討するため、15 ロットからサンプルを無作為抽出し、 (x_1, x_2, x_3) を測定した。この観測値は、定数倍され、表 4-1 に示されている。このデータに基づき、管理上の問題を調査する。各変量間の相関行列を算出すると、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.199 & 0.616 \\ 0.199 & 1 & -0.187 \\ 0.616 & -0.187 & 1 \end{pmatrix}$$

表 4.1 観 測 値

ロット 番 号	x_1	x_2	x_3	ロット 番 号	x_1	x_2	x_3
1	53	50	130	9	53	10	130
2	33	60	77	10	23	37	100
3	27	10	90	11	13	7	87
4	63	53	110	12	40	6	127
5	23	13	73	13	30	40	133
6	43	57	97	14	43	53	93
7	63	7	137	15	40	23	123
8	43	20	113				

を得る。また、 x_1 に対する x_2 および x_3 の偏回帰係数は式 (4.25) よりそれぞれ 0.230 および 0.467 と得られる。したがって 3 次元空間における (x_1 , x_2 , x_3) の関係式は、式 (4.26) より

$$x_1 = -17.897 + 0.230 x_2 + 0.467 x_3$$

となる。また、この 3 次元空間における各観測点の x_1 の分散のうち、上式で説明される部分の割合は、 $R^2 \doteq 0.482$ すなわち 48.2% であることが知れる。重相関係数 R は、 $R \doteq 0.69$ となる。ここで当然 R^2 は r_{12}^2 , r_{13}^2 のいずれよりも大きいはずであり、 $r_{12}^2 \doteq 0.0396$, $r_{13}^2 \doteq 0.3795$, すなわち x_1 と x_3 だけの関係でも呈色度の変動をかなり説明できる。しかし、さらに不純物質の含有量を考慮に入れると、約 10% だけ多く解釈がついている。次にこの R によって、母重相関係数がゼロであるという帰無仮説を検定する。ここで、自由度は $15-3=12$ であり、この自由度の R の分布で 5% 危険率の値は 0.627 で、明らかに有意性を示し、帰無仮説は棄却される。また説明のつかない変動の大きさ、すなわち上の 1 次式からのはずれの分散は、 $(1-R^2) \sum_{\alpha}^{15} (x_{1\alpha} - \bar{x}_1)^2 / 12$ で、この例の場合、標準偏差 11.4 を得、なおかなり大きい。これは工程中のその他の要因およびサンプリング誤差・測定誤差などを含めて、なお検討する余地を示している。また偏回帰係数に関し、それぞれの母数をゼロとする帰無仮説の検定を自由度 12 の t 分布で行なうと、 β_3 について危険率 5% で有意性を示し、また β_2 は危険率 7% 程度で有意となる。このことはさらに観測数を増し、検討を必要と考えさせる。次に、 r_{12} , r_{13} および R の値から、 r_{12} が低

いのはより影響力の強い x_2 の変動によると考え、偏相関係数を検討する。このとき $r_{12.3}=0.407$, $r_{13.2}=0.679$ となり、 $r_{12.3}$ は 95% より若干小さい信頼度で有意性が認められる。

この結果より、呈色度の管理には含湿度を十分管理すべきはもちろん、依然として微量含有量をもよく管理する必要が認められるとされた。

参 考 文 献

- 1) Anderson, T. W.: An introduction to multivariate statistical analysis (1958), John Wiley & Sons.
- 2) Bartlett, M. S.: The statistical significance of canonical correlations, *Biometrika*, 32 (1941), 29-38.
- 3) Bartlett, M. S.: The general canonical correlation distribution, *Ann. Math. Statist.*, 18 (1947), 1.
- 4) Cramér, H.: Mathematical methods of statistics, Princeton Univ. Press (1940).
- 5) David, F. N.: Tables of the Ordinates and Probability Integral of the Distribution of the Correlation Coefficient in Small Samples, Cambridge Univ. Press, (1938).
- 6) Dubois, Philip H.: Multivariate correlational analysis (1957), Harper and Brothers.
- 7) Horst, Paul : Relations among m sets of measures, *Psychometrika*, 26 (1961), 129-149.
- 8) Hotelling, H.: The most predictable criterion, *J. Educ. Psych.*, 26 (1935), 139-142.
- 9) Hotelling, H.: Rotations between two sets of variates, *Biometrika*, 28 (1936), 321-377.
- 10) Hoyt, C.: Test reliability estimated by analysis of variance, *Psychometrika*, 15 (1941), 153-160.
- 11) Hoyt, C. and Stunkard, C. L.: Estimation of test reliability for unrestricted item scoring methods, *Educ. Psychol. Meas.*, 12 (1952), 756-758.
- 12) Lawley, D. N.: A generalization of Fisher's Z-test. *Biometrika*, 30 (1938), 180.
- 13) Pearson, K.: On the general theory of the influence of selection on correlation and variation, *Biometrika*, 8 (1912), 437-443.

- 14) Plumlee, L.B.: The effect of difficulty and chance success on item-test correlation and test reliability, *Psychometrika*, 17 (1952), 69-86.
- 15) Plumlee, L. B.: The predicted and observed effect of chance success on multiple choice test validity, *Psychometrika*, 19 (1954), 65-70.
- 16) Roy, S.N.: p-statistics, or some generalizations in analysis of variance appropriate multivariate problems, *Sankhya*, 4 (1939), 381.
- 17) Roy, S.N.: Analysis of variance for multiple populations: the sampling distribution of the requisite p-statistics on the null and non-null hypothesis, *Sankhya*, 6 (1941), 35.
- 18) Thomson, G.: The maximum correlation of two weighted batteries, *Brit. J. Psych., Stat. Sec.*, 1 (1947), 27-34.
- 19) Tucker, L.R.: A note on the estimation of test reliability by the Kuder-Richardson formula (20), *Psychometrika*, 14 (1949), 117-119.

第5章 回 帰 論

5.1 概 要

前章までは、主として、変量と変量の関係の深さを測る“相関”という立場で考察を行なってきた。本節ではある変量の定まった値に対する他変量の期待値を積極的に評価する立場について考える。したがって、この“回帰論”(regression theory)の立場は、与えられたデータから変量間の関数関係を具体的に解明し、もしこれから実験で観測値をうるのであれば変量間の関係を効率よく知りうるための“実験計画法”の問題としても理論の根拠となっている。

このように回帰論は統計解析の上で重要なまた適用の広いものであるが、通常データの構造模型としては“線型回帰模型”が最もよく採用されている。もちろん、正規方程式を解く労をいとわねば、電子計算機による反復求値計算法などにより相当に複雑な構造模型の母数まで推測しうる。しかし、“線型回帰模型”が頻繁に用いられるのは、おもに次の理由による。

i) 各変量間であらかじめ適当な変数変換を行なっておくと、線型式が成立する場合が多い。

ii) 観測値が得られる範囲の平均(効果)値を中心として、ある限られた条件範囲内で局所的に線型式の近似が考えうる。

iii) 複雑な関数式でも、ある値の回りに多項式展開による近似を考え、次数を実験誤差の大きさに比し有意性が認めうる限度で決定すれば十分であること。すなわち、次の式(5.2)で、たとえば $k=1$ の場合でも $x_1=1, x_2=t, x_3=t^2, \dots, x_k=t^{k-1}$ とおくと、 $\sum_j \beta_{1j} x_j$ は $\sum_j \beta_{1j} t^{j-1}$ となり、多項式展開した場合の係数 \hat{B}_{1j} を推定することになる。

iv) 上記 iii) のように、各 x_i に対し、より広範に必要な関数型を定義づけることができる。 $k=1$ の場合でも、たとえば $x_1=1, x_2=\sin t, x_3=\cos t, x_4=\sin 2t, \dots, x_{2m+1}=\cos mt$ とおくと、線型式は p を奇数として $\beta_1 + \sum_{j=1}^{(p-1)/2}$

$(\beta_{2i}\sin it + \beta_{2i+1}\cos it)$ なる調和関数をあてはめることに帰する。このように線型回帰 βx の型自身は、見かけよりもずっと一般的な性質をもつものである。

また観測値を得る過程で、逐次、構造模型式を修正しながら選択・決定していく立場は、情報を選択しかつ蓄積していく、経験的にごく自然な推測の過程である。推測過程論は、これらの思想を含め、今日各方面に展開され吟味されているが、ここでは触れない。

5.2 正規線型回帰論 (normal linear regression theory)

いま、 y_α を $N(\beta x_\alpha, \Sigma)$ からの観測値とし、

$$\left. \begin{aligned} y_\alpha' &= (y_{1\alpha}, y_{2\alpha}, \dots, y_{k\alpha}), \quad x_\alpha' = (x_{1\alpha}, x_{2\alpha}, \dots, x_{p\alpha}), \quad \alpha = 1, 2, \dots, n \\ \beta &= (\beta_{ij}), \quad \Sigma = (\sigma_{ii'}), \quad i, i' = 1, 2, \dots, k, \quad j = 1, 2, \dots, p \end{aligned} \right\} \quad (5.1)$$

とし、 β は一定の未知の母数行列、 x_α は指定変数ベクトルで、各 α について誤差なく指定しうる既知の値をもつ。すなわち、この p 個の指定変数を定めると、 y_α が互いに独立な観測誤差 e_α を伴って観測されるような次の構造模型を考えている。

$$y_\alpha = \beta x_\alpha + e_\alpha, \quad e_\alpha \in N(O, \Sigma) \quad (5.2)$$

指定変数 x_α は、第 α 番めの観測値を得る際の条件を示すもので、 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ をデザイン行列 (design matrix) ともよんでいる。とくに要因効果を検討する実験計画法の立場では、要因条件をいかに選び効果を観測し解析するかという上で、デザイン行列の定め方は重要となる。しかし、ここでの主目的は、与えられた $\{x_\alpha\}$ と $\{y_\alpha\}$ をもとに、 β の値を推定することである。

この解は最尤推定法によって、 β および Σ の推定量として、

$$A \equiv \left(\sum_{\alpha} x_{j\alpha} x_{j'\alpha} \right), \quad C \equiv \left(\sum_{\alpha} y_{i\alpha} x_{j\alpha} \right) \text{ とおくと}$$

$$\beta = CA^{-1}, \quad \hat{\Sigma} = \sum_{\alpha} (y_\alpha - \hat{\beta} x_\alpha)(y_\alpha - \hat{\beta} x_\alpha)' / n \quad (5.3)$$

で得られる。もちろん、上式では $|A| \neq 0$ を仮定しているが、もし $|A| = 0$ ならば、 p よりも小さな数を改めて p とおいて、すなわち構造模型式の次元を

減じ、式 (5.3) を適用せねばならない。また、理論の見地から $|A| \neq 0$ であっても、数値計算上、 $|A|$ の値が、累積した計算誤差に比し、かなり近いような小さな値であれば、推定される β の値は全く疑わしいものになっている。とくに電子計算機などによる実用上、 A のランクの大きいとき注意を要する。

また、本節では、一般の場合として y_{α} をベクトルで記述したが、実際の場合には、 y_{α} の各要素ごとに、 x との線型変換を考察する必要性が介入するため、 $k=1$ として y_{α} の要素ごとに回帰分析することが多いようである。

このように推定される $\hat{\beta}$ は、また正規分布に従い、 β の第 i 行ベクトルを β_i とおくと、

$$E(\hat{\beta}) = \beta, \quad E\{(\hat{\beta}_i - \beta_i)'(\hat{\beta}_i - \beta_i)\} = \sigma_{ii}' A^{-1} \quad (5.4)$$

かつ $n\hat{\Sigma}$ は、母分散共分散行列 Σ をもつ自由度 $(n-p)$ のウィシャート (Wishart) 分布に従うことが知られている。とくに、 $k=1$ ならば、 $\hat{\beta}$ の分布は $N(\beta, \sigma^2 A^{-1})$ 、また $\hat{\sigma}^2 = (\sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \hat{\beta}' C') / (n-p)$ は $E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$ となり、自由度 $(n-p)$ の χ^2 分布に従う。

次に β に関する若干の検定法についてまとめておこう。

i) $k=1$ のとき、仮説 $H: \beta = \beta_0$ について、尤度比検定するには、

$$F_0 = \frac{n-p}{p} \frac{(\hat{\beta} - \beta_0)' A (\hat{\beta} - \beta_0)'}{\sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \hat{\beta}' C'} \quad (5.5)$$

が自由度対 $(p, n-p)$ の F 分布に従うことから、危険率 α の F_{α} 値により $F_0 \geq F_{\alpha}$ なら仮説 H を棄却し、 $F_0 < F_{\alpha}$ なら H を棄却しない。

ii) $k=1$, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_q, \beta_{q+1}, \dots, \beta_p) \equiv (\beta_1, \beta_2)$ とおいて、仮説 $H: \beta_1 = \beta_{10}$, すなわち、 $H: \beta_1 = \beta_{10}, \beta_2 = \beta_{20}, \dots, \beta_q = \beta_{q0}$ を検定する場合：簡単に

$$X' = (x_{\alpha j}) = (\underbrace{X_1'}_q, \underbrace{X_2'}_{p-q}), \quad y' = (y_1, y_2, \dots, y_n) \quad \text{とおくと, } H \text{ の下で } \beta_2 \text{ の}$$

推定量は

$$\hat{\beta}_2 = (X_2 X_2')^{-1} X_2 (y - X_1' \beta_{10}') \quad (5.6)$$

で示される。この $\hat{\beta}_2$ および式 (5.3) による $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ を用いて

$$F_0 = \frac{n-p}{q} \left\{ \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}_1' \hat{\beta}_{10} - \mathbf{X}_2' \hat{\beta}_2)(\mathbf{y} - \mathbf{X}_1' \hat{\beta}_{10} - \mathbf{X}_2' \hat{\beta}_2)}{(\mathbf{y} - \mathbf{X}_1' \hat{\beta}_1 - \mathbf{X}_2' \hat{\beta}_2)'(\mathbf{y} - \mathbf{X}_1' \hat{\beta}_1 - \mathbf{X}_2' \hat{\beta}_2)} - 1 \right\} \quad (5.7)$$

が自由度対 $(q, n-p)$ の F 分布することにより仮説 H を検定できる。

iii) k の一般の場合, $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ として仮説 $H: \beta_1 = \beta_{10}$ の漸近検定の
場合: まず, 次の U_0 を定義する。

$$U_0 = \frac{|n\hat{\Sigma}|}{|\sum_{\alpha} (\mathbf{y}_{\alpha} - \hat{\beta}_2 \mathbf{x}_{\alpha}^{(2)}) (\mathbf{y}_{\alpha} - \hat{\beta}_2 \mathbf{x}_{\alpha}^{(2)})'|} \quad (5.8)$$

ここに $\hat{\Sigma}$ は式 (5.3) で示され, $\hat{\beta}_2$ は仮説 H の下での β_2 の推定として

$$\hat{\beta}_2 = (C_2 - \beta_{10} A_{12}) A_{22}^{-1} \quad (5.9)$$

で与えられ, C_2, A_{12}, A_{22} は式 (5.3) の C, A を β の分割に対応して $(C_1,$

$C_2), \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ とおいている。

このとき, U_0 は $U_{k,q,u}$ -分布に従い,

$$\begin{aligned} \Pr\{-m \log U_{k,q,u} \leq z\} &= \Pr(x_{kq}^2 \leq z) + \frac{r_2}{m^2} \{\Pr(x_{kq+4}^2 \leq z) \\ &\quad - \Pr(x_{kq}^2 \leq z)\} + \frac{1}{m^4} [\gamma_4 \{\Pr(x_{kq+8}^2 \leq z) - \Pr(x_{kq}^2 \leq z)\} \\ &\quad - \gamma_2^2 \{\Pr(x_{kq+4}^2 \leq z) - \Pr(x_{kq}^2 \leq z)\} \\ &\quad - \gamma_2^2 \{\Pr(x_{kq+4}^2 \leq z) - \Pr(x_{kq}^2 \leq z)\}] + O(n^{-6}) \end{aligned} \quad (5.10)$$

ここに

$$m = n - p - (k - q + 1)/2, \quad u = n - p, \quad r_2 = kq(k^2 + q^2 - 5)/48$$

$$r_4 = \frac{r_2^2}{2} + \frac{kq}{1920} \{3k^4 + 3q^4 + 10k^2q^2 - 50(k^2 + q^2) + 159\}$$

が成立する。式 (5.10) の右辺第一項だけを利用するなら残差項は $O(n^{-2})$,
第二項までなら $O(n^{-4})$ である。このようにして

$$\alpha = \Pr\{U_{k,q,u}(\alpha) \leq U\} \quad (5.11)$$

なる $U_{k,q,u}(\alpha)$ と U_0 を比較して, 仮説 $H: \beta_1 = \beta_{10}$ が漸近的に検定できる。

5.3 計算プログラミング

A. 一般(多変量観測値)の回帰分析

Input		Output	
ND	標本の大きさ(数)	A(I, J)	第 j 従属変数に対する係数 定数項がある場合は、これが最初に出る $J=k+1, \dots, k+NDV; I=1, 2, \dots, k$
NV	独立変数の数		
NDV	従属変数の数		
NCONS	直線が $NCONS=0$ であれば、原点を通りそれ以外の場合は1	XM(I)	誤差項の平均値ベクトル $I=1, 2, \dots, k$
X(I)	観測値ベクトルで $I=1, \dots, k$ までは独立変数, $k+1, \dots, k+k$ までは従属変数	Y(I, J)	誤差項の共分散行列 $I=1, \dots, k; J=1, 2, \dots, k$

[注] サブ・ルーティン ROOTS は 3.4 節 [付] を参照.

REGRESSION ANALYSIS

C
C
C
C
C
C
C
C
C
C
C

ND SAMPLE SIZE
NV NO. OF VARIABLES
NDV NO. OF DEPENDENT VARIABLES
NCONS 0 --- TO PASS AN ORIGIN
 1 --- OTHERWISE
SUBROUTINE ROOTS REQUIRED

```

DIMENSION A(25,65),B(20,20),Y(10,10),X(30),XM(30)
COMMON A
1 READ 100,ND,NV,NDV,NCONS
K=NV+NCONS
KK=K+NDV
NF=1+NCONS
DO 2 I=1,K
  XM(I)=0.
DO 2 J=1,KK
2 A(I,J)=0.
DO 3 I=1,NDV
  I1=I+K
  XM(I1)=0.
DO 3 J=1,NDV
3 Y(I,J)=0.
NN=ND
4 X(1)=1.
READ 101,{X(I),I=NF,KK}
NN=NN-1
DO 5 I=1,K
  XM(I)=XM(I)+X(I)
DO 5 J=1,KK
5 A(I,J)=A(I,J)+X(I)*X(J)
DO 6 I=1,NDV
  I1=I+K
  XM(I1)=XM(I1)+X(I1)
DO 6 J=1,NDV
  JJ=J+K

```

```

6  Y(I,J)=Y(I,J)+X(I)*X(JJ)
   IF(NN)7,7,4
7  DO 8  I=1,K
   DO 8  J=1,K
   A(J,I)=A(I,J)
   B(I,J)=A(I,J)
8  B(J,I)=A(I,J)
   CALL ROOTS(K, KK)
   TYPE 200
   NK=K+1
   DO 9  J=1,NDV
   KJ=J+K
9  TYPE 201,J,(A(I,KJ),I=1,K)
   TYPE 202,ND
   FND=ND
   DO 11 I=HK, KK
   DO 10 J=1,K
10  XM(I)=XM(I)-A(J,I)*XM(J)
   XM(I)=XM(I)/FND
   L=I-K
11  TYPE 205,L,XM(I)
   DO 14 I=1,NDV
   II=I+K
   DO 12 J=1,K
   X(J)=0.
   DO 12 L=1,K
12  X(J)=X(J)+A(L,II)*B(L,J)
   DO 14 J=1,NDV
   T=0.
   JJ=J+K
   DO 13 L=1,K
13  T=X(L)*A(L,JJ)
14  Y(I,J)=(Y(I,J)-T)/(FND-1.)
   TYPE 203
   DO 15 I=1,NDV
15  TYPE 204,(I,J,Y(J,I),J=1,I)
   DO 16 J=HK, KK
16  PUNCH 300,(A(I,J),I=1,K)
   GO TO 1
100 FORMAT(4I5)
101 FORMAT(7X,F2.0,17X,24F1.0)
200 FORMAT(19HREGRESSION ANALYSIS//10X,54HREGRESSION COEFFICIENT VECTOR
1RS FOR DEPENDENT VARIABLES/)
201 FORMAT(/20HCOEFFICIENT VECTOR -,13/(5(3X,E12.5)))
202 FORMAT(/24HESTIMATION OF ERROR TERM//11HSAMPLE SIZE,15//11HMEAN V
1ECTOR/)
203 FORMAT(/31HCOVARIANCE MATRIX COV(E(I,J))/)
204 FORMAT(4(1X,2I3,1X,E12.5))
205 FORMAT(3X,12HEXPECT(ERR Z,13,2H)=,1X,E12.5)
300 FORMAT(5E12.5)
END

```

B. その他

- a. 逆行列 (サブ・ルーティン MATINV を使用。4・4 B. 項の [付] を参照。)

```

C  MATRIX INVERSION
C
C
C
C  K — RANK OF MATRIX
C  SUBROUTINE MATINV REQUIRED

```

C
C

```

      DIMENSION A(30,31)
      COMMON A
1     READ 100,K
      READ 101,((A(I,J),J=1,K),I=1,K)
      TYPE 200
      DO 2 I=1,K
2     TYPE 201,(A(I,J),J=1,K)
      CALL MATINV(K,A)
      TYPE 202
      DO 3 I=1,K
      TYPE 201,(A(I,J),J=1,K)
3     PUNCH 300,(A(I,J),J=1,K)
      GO TO 1
100  FORMAT(12)
101  FORMAT(9F1.0)
200  FORMAT(6HMATRIX/)
201  FORMAT(5(2X,E12.5))
202  FORMAT(//16HMATRIX INVERSION/)
300  FORMAT(5E12.5)
      END

```

b. 行列式・固有多項式・余因子行列および逆行列 (Frame 法)

Input		Output	
N	行列のランク	$D(I)$	$I=1, 2, \dots, N$ の順に固有多項式の高次の係数が求められ $D(N)$ は行列式を示す
$A(I, J)$	計算される原始行列 $i=1, \dots, N; j=1, \dots, N$	$B(I, J)$	$A(I, J)$ の余因子行列, その後 $A(I, J)$ の逆行列を示す

C DETERMINANT,
C CHARACTERISTIC POLYNOMIAL,
C ADJUGATE MATRIX AND
C INVERSE MATRIX ARE SIMULTANEOUSLY OBTAINED. (FRAME METHOD)
C
C
C

```

      DIMENSION A(30,31),B(30,31),C(30),D(30)
1     READ 100,N
      DO 2 I=1,N
      DO 2 J=1,N
      A(I,J)=0.0
2     B(I,J)=0.0
      DO 3 I=1,N
3     READ 101,(A(I,J),J=1,N)
      T=0.0
      DO 4 I=1,N
      T=T+A(I,1)
4     A(I,N+1)=A(I,1)
      D(1)=T
      DO 6 I=1,N
      DO 5 J=1,N
5     B(J,1)=A(I,J)
6     B(I,1)=A(I,1)-D(1)
      DO 13 L=2,N
      T=0.0
      DO 7 I=1,N
      B(I,N+1)=0.0
      DO 7 J=1,N
      B(I,N+1)=B(I,N+1)+A(I,J)*B(J,1)

```

```

7  T=T+A(I,J)*B(I,J)
   AN=L
   D(L)=T/AN
   IF(L-N)8,14,14
8  DO 13 J=1,N
   DO 12 I=1,N
   T=0.0
   DO 9 M=1,N
9  T=T+A(I,M)*B(J,M)
   IF(I-J)10,11,10
10 C(I)=T
   GO TO 12
11 C(I)=B(I,N+1)-D(L)
12 CONTINUE
   DO 13 K=1,N
13 B(J,K)=C(K)
14 T=(-1)**(N-1)
   DO 15 I=1,N
   D(I)=T*D(I)
   DO 15 J=1,N
15 B(I,J)=T*B(I,J)
   T=-T
   TYPE 200,D(N)
   TYPE 201,T,(D(I),I=1,N)
   TYPE 202
   DO 16 J=1,N
16 TYPE 203,(B(I,J),I=1,N)
   TYPE 204
   DO 17 I=1,N
   DO 17 J=1,N
17 B(I,J)=B(I,J)/D(N)
   DO 18 J=1,N
18 TYPE 203,(B(I,J),I=1,N)
   GO TO 1
100 FORMAT(12)
101 FORMAT(6E12.5)
200 FORMAT(//11HDETERMINANT,//4X,E12.5)
201 FORMAT(//41HCHARACT.POLYNOMIAL COEFF.(FROM HI POWER),//2X,5(2X,E12
1.5))
202 FORMAT(//30HADJUGATE MATRIX ,/)
203 FORMAT(2X,5(2X,E12.5))
204 FORMAT(//30HINVERSE MATRIX ,/)
END

```

5.4 応 用 例

甲状腺機能亢進症のアイソトープ療法は、最近 10 数年来すぐれた治療法として認められてきている。三宅・鳥塚らはこれらの治療体験を総合検討することを考え、まず、アイソトープ 131 の標準投与量 (mc) の算定方式を検討した。すなわち、全国主要病院のカルテ約 3,500 症例より、既往治療歴 x_1 、アイソトープ初回投与年令 x_2 、眼球突出の度合 x_3 、甲状腺重量 x_4 、BMR (%) x_5 および現病でのアイソトープ投与初回量を y として、治療効果の明確な症例から各症状 x_i について検討し、表 5.1 のように患者の条件・重篤度を定めた。

この x_1 については、直接病歴を指すのではなく、先験的に患者の現病の重篤度または今回治療の難易を示す尺度と考えている。

表 5-1 観測項目と評点

	0	1	2	3	4
既往治療歴 x_1	なし	その他	抗甲状腺剤	手術	手術と抗甲状腺剤の併用
初回投与年令 x_2	(実 年 令)				
眼 球 突 出 x_3	-	±	+		
甲状腺重量 x_4	(実 重 量)				
BMR x_5	(実 百 分 率)				

まず、医学的厳密さで正確な治癒症例群を集め、これを母集団からの観測値として、 (x_1, x_2, \dots, x_5) を与えたとき、いかにどのアイソトープ 131 量を投与しているか、各 x_i の係数を推定している。このとき、各 x_i および y 間の線型関係の成立を検討し x_4 および y を対数変換し、線型回帰式をあてはめた。この結果は、 $y = 3.45 x_4^{0.118} \exp(0.037 x_1 + 0.005 x_2 + 0.118 x_3 + 0.001 x_5)$ と示され、日常使用に便利なモノグラフも作成されている。これらは、重篤度条件や母集団規定の変更や種々のあと知恵の追加など、各段階で現実適合する定義条件を探しながら数度の試行解析の結果であった。この意味で情報解析は実験科学の性格をもっている。こうして初診時新患の症状重篤度条件 x_1, x_2, \dots, x_5 に対し、推定されるアイソトープ mc 量を投与指針に役だたせる。

三宅他6氏，“わが国における 131 I 治療成績”，日本内分泌学会誌，1963，39 巻，9 号，およびその後の論文。

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W. and Rubin, H.: Estimation of parameters of a single equation. *Ann. Math. Statist.*, 20 (1949), 46.
- 2) Anderson, T.W. and Rubin, H.: The asymptotic properties of estimates of the parameters of a single equation in a complete system of stochastic equations, *Ann. Math. Statist.*, 21 (1950), 570.
- 3) Anderson, T.W.: Estimating linear restrictions on regression coefficient for multivariate normal distributions, *Ann. Math. Statist.*, 22 (1951), 327.
- 4) Bartlett, M.S.: Further aspects of the theory of multiple regression, *Proc.*

Camb. Phil. Soc., 34 (1938), 33.

- 5) Berkson, J.: Are there two regressions? *J. Am. Stat. Ass.*, 45 (1950), 65.
- 6) Fisher, R.A.: The sampling distribution of some statistics obtained from non-linear regression. *Ann. Eugen. Lond.*, 9 (1939), 238.
- 7) Hsu, P.L.: Canonical reduction of the general regression problem, *Ann. Eugen. Lond.*, 11 (1941), 42.
- 8) James, G.S.: Test of linear hypotheses in univariate and multivariate analysis when the ratios of the population variances are unknown, *Biometrika*, 41 (1954), 19.
- 9) Jones, K.J.: The multivariate statistical analysis (1964), Harvard Cooperative Society.
- 10) Kendall, M.G.: A course in multivariate analysis. (1957), Charles Griffin and Co.
- 11) McNemar, Quinn: Psychological statistics (1962), John Wiley and Sons.
- 12) Scheffé, H.: The analysis of variance (1963), John Wiley and Sons.
- 13) Seal, H.L.: Multivariate statistical analysis for biologists (1964), Methuen & Co.
- 14) Williams, E.J.: Regression analysis (1959), John Wiley and Sons.

第6章 推定・検定論

これまで多変量解析の応用面について、特徴的に最も頻繁に適用される幾つかの方法を誘導的に解説してきた。そしてこれらの解析の過程の各段階で、いつも多変量観測値が整頓され、その際に必要な平均ベクトルや分散共分散行列に関して、当然、科学分野から種々の吟味がなされるはずである。本章では、この立場から標準的な推定・検定の方法を記述する。しかし、ここの紙数で理論的根拠を、誘導的に解説することは困難である。したがって、ここでは読者の応用上の必要を満たす上で、普遍的な正規分布に関する諸法をまとめるにとどめる。

6.1 Σ 既知のときの等平均の仮説検定

A. 1 標本の場合

いま Σ 既知の p 変量正規分布 $N(\mu, \Sigma)$ からの $\{x_\alpha\}$, $\alpha=1, 2, \dots, n$ より、 μ が既知の値 μ_0 に等しいか否かという、仮説 $H_1: \mu = \mu_0$ を検定する。対立仮説 H_2 は $\mu \neq \mu_0$ である。一般に、 x が Σ 既知の $N(O, \Sigma)$ からの確率変数のとき、 $T\Sigma T' = I$ なる正則な変換行列 T が存在し、このような変換を x に施して $Tx = z$ とすると、 $x'\Sigma^{-1}x = z'z$ は自由度 p の χ^2 分布することは明らかである。この性質により、 Σ 既知の場合の検定は、容易に χ^2 分布に帰せられる。

さて、 H_1 の下では

$$n(\bar{x} - \mu_0)' \Sigma^{-1} (\bar{x} - \mu_0) \equiv \chi_0^2 \quad (6.1)$$

は自由度 p の χ^2 分布し、 $\chi_0^2 \geq \chi_p^2(\alpha)$ によって H_1 は棄却され、不等号が逆ならば H_1 は棄却されない。すなわち、 $H_1: \mu = \mu_0$ を採択し、 H_2 を棄却する。

B. 2 標本の場合

二つの観測値群 $\{x_\alpha^{(i)}\}$, $\alpha=1, 2, \dots, n_i$, $i=1, 2$, が共通な既知の Σ をもつ $N(\mu^{(i)}, \Sigma)$ からのものとする。このとき帰無仮説 $H_0: \mu^{(1)} = \mu^{(2)}$ を $H_1:$

$\mu^{(1)} \neq \mu^{(2)}$ に対して検定する。A. 項の一般性によって

$$n_1 n_2 (\bar{\mathbf{x}}^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(2)})' \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{x}}^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(2)}) / (n_1 + n_2) \equiv \chi_0^2 \quad (6.2)$$

が自由度 p の χ^2 分布する。したがって χ_0^2 と $\chi_p^2(\alpha)$ の大小により容易に検定できる。

ちなみに、 $(\mu^{(1)} - \mu^{(2)})' \Sigma^{-1} (\mu^{(1)} - \mu^{(2)})$ を 2 母集団間の Mahalanobis の距離という。

6.2 Σ 未知のときの等平均の仮説検定

A. 1 標本の場合

母数未知の p 変量正規分布 $N(\mu, \Sigma)$ からの観測値 $\{x_\alpha\}$, $\alpha=1, 2, \dots, n$, によって、既知の値 μ_0 について仮説 $H_1: \mu = \mu_0$ を検定する。対立仮説 H_2 は $\mu \neq \mu_0$ である。

この際の尤度比 λ は、 $\lambda = \{1 + T_0^2 / (n-1)\}^{-N/2}$ となり、ここに

$$T_0^2 = n(\bar{\mathbf{x}} - \mu_0)' \mathbf{s}^{-1} (\bar{\mathbf{x}} - \mu_0) \quad (6.3)$$

で、 $\bar{\mathbf{x}} \equiv \sum_{\alpha} \mathbf{x}_\alpha / n$, $\mathbf{s} \equiv \sum_{\alpha} (\mathbf{x}_\alpha - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_\alpha - \bar{\mathbf{x}})' / (n-1)$ は、それぞれ μ , Σ の対応する要素同志で最良（最小分散不偏）推定となっている。したがって、 λ の代わりに T_0^2 を統計量として用い、この分布が H_1 の下で、

$$(n-p) T_0^2 / p(n-1) \equiv F_0 \quad (6.4)$$

とすると、自由度対 $(p, n-p)$ の F 分布に従う。すなわち、 $F_0 \geq F_{p, n-p}(\alpha)$ ならば H_1 を棄却し、しからざれば H_1 を棄却しない。ここに T_0^2 を Hotelling の自由度 p の T^2 統計量という。

B. 2 標本の場合

二つの観測値群、 $\{x_\alpha^{(i)}\}$, $\alpha=1, 2, \dots, n_i$, $i=1, 2$ がともに未知な Σ をもつ $N(\mu^{(i)}, \Sigma)$ からのものとする。このとき帰無仮説 $H_0: \mu^{(1)} = \mu^{(2)}$ を、 $H_1: \mu^{(1)} \neq \mu^{(2)}$ に対して検定する。式の誘導は A. 項と全く同様で、

$$\bar{\mathbf{x}}^{(i)} = \sum_{\alpha} \mathbf{x}_\alpha^{(i)} / n_i, \quad \mathbf{s} = \left\{ \sum_{i=1}^2 \sum_{\alpha} (\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})(\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})' \right\} / (n_1 + n_2 - 2) \quad (6.5)$$

は $\mu^{(i)}$, Σ の推定量で、

$$T_0^2 = n_1 n_2 (\bar{\mathbf{x}}^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(2)})' \mathbf{s}^{-1} (\bar{\mathbf{x}}^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(2)}) / (n_1 + n_2) \quad (6.6)$$

とおくと,

$$(n_1 + n_2 - p - 1) T_0^2 / p (n_1 + n_2 - 2) \equiv F_0 \quad (6.7)$$

は, 自由度対 $(p, n_1 + n_2 - p - 1)$ の F 分布する。したがって, 危険率 α で, $F_0 \geq F_{p, n_1 + n_2 - p - 1}(\alpha)$ なら H_0 を棄却して H_1 を採択し, 不等号の逆のとき H_1 を棄却し H_0 をとる。

C. k 標本の場合

前項の拡張で, k 個の観測値群があるとき, $N(\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{\Sigma})$, $i=1, 2, \dots, k$ の $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ に関し任意の線型式で仮説検定を考える。すなわち, 仮説 $H: \sum_{i=1}^k c_i \boldsymbol{\mu}^{(i)} = \boldsymbol{\mu}$ の採否を検定する。ここに c_i はある定値で, ちょうど実験計画法の対比 (contrast) のような係数を定め, $\boldsymbol{\mu}$ は与えられたベクトルである。このとき,

$$\bar{\mathbf{x}}^{(i)} = \sum \mathbf{x}_a^{(i)} / n_i, \quad \mathbf{s} = \sum_i \sum_a^{n_i} (\mathbf{x}_a^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)}) (\mathbf{x}_a^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})' / \left(\sum_i n_i - k \right) \quad (6.8)$$

$$T_0^2 = \left(\sum_i c_i \bar{\mathbf{x}}^{(i)} - \boldsymbol{\mu} \right)' \mathbf{s}^{-1} \left(\sum_i c_i \bar{\mathbf{x}}^{(i)} - \boldsymbol{\mu} \right) / \left(\sum_i \frac{c_i^2}{n_i} \right) \quad (6.9)$$

$$\left(\sum_i n_i - p - k + 1 \right) T_0^2 / p \left(\sum_i n_i - k \right) \equiv F_0 \quad (6.10)$$

として, 上式の統計量 F_0 を自由度対 $(p, \sum n_i - p - k + 1)$ の F 分布によって検定できる。

D. 2 標本で $\boldsymbol{\Sigma}$ が異なる場合

未知 $\boldsymbol{\Sigma}$ が異なる場合の $H_0: \boldsymbol{\mu}^{(1)} = \boldsymbol{\mu}^{(2)}$ の仮説検定は, 多変量パーレンス・フィッシャー問題として k 標本の場合まで拡張されている。2 標本の場合は, 次のように得られる。

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mathbf{y}} &= \bar{\mathbf{x}}^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(2)}, \quad \mathbf{u}_a = \mathbf{x}_a^{(1)} - \sqrt{n_1/n_2} \mathbf{x}_a^{(2)}, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, n_1, \quad \bar{\mathbf{u}} = \sum_a^{n_1} \mathbf{u}_a / n_1 \\ \mathbf{s} &= \sum_a^{n_1} (\mathbf{u}_a - \bar{\mathbf{u}}) (\mathbf{u}_a - \bar{\mathbf{u}})' / (n_1 - 1) \end{aligned} \right\} \quad (6.11)$$

とするとき,

$$T_0^2 = n_1 \bar{\mathbf{y}}' \mathbf{s}^{-1} \bar{\mathbf{y}} \quad (6.12)$$

とおくと, H_0 のもとで

$$(n_1 - p) T_0^2 / p(n_1 - 1) \equiv F_0 \quad (6.13)$$

は自由度対 $(p, n_1 - p)$ の F 分布に従う。これより H_0 について F 検定できる。

6.3 等分散共分散行列の仮説検定

$\{\mathbf{x}_\alpha^{(i)}\}$, $\alpha=1, 2, \dots, n_i$, $i=1, 2, \dots, k$ を $N(\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ からの観測値群とする。いま, 仮説 H_1 として $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \dots = \boldsymbol{\Sigma}_k \equiv \boldsymbol{\Sigma}$ を, すべての $\boldsymbol{\Sigma}_i$ が同時に等しくはないという対立仮説 H_2 に関して検定する場合を考える。 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ の最尤推定は, $\boldsymbol{\Sigma}_i$ の仮説いかに関係せず, $\bar{\mathbf{x}}^{(i)} = \sum_{\alpha} \mathbf{x}_\alpha^{(i)} / n_i$ であり, $\boldsymbol{\Sigma}_i$ に関しては, H_1 の下で $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \sum_i \sum_{\alpha} (\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)}) (\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})' / n$, また何の仮説もない一般の場合は $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i = \sum_{\alpha} (\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)}) (\mathbf{x}_\alpha^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}^{(i)})' / n_i$ で推定される。ここに $n = \sum_{i=1}^k n_i$ 。

さて, H_1 に対する H_2 の尤度比 λ_1 を計算すると,

$$\lambda_1 = \prod_{i=1}^k |\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i|^{n_i/2} / |\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|^{n/2} = c \prod_{i=1}^k |A_i|^{n_i/2} / |A|^{n/2} \quad (6.14)$$

と容易に求められ, ここに λ_1 の分布について, 知る必要がある。ここに $c \equiv \left\{ n^n / \prod_i n_i^{n_i} \right\}^{p/2}$, $A \equiv n \hat{\boldsymbol{\Sigma}}$, $A_i \equiv n_i \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i$ とおいている。また観測数 n_i , $\sum_i n_i$ の代わりにそれぞれ $\phi_i = n_i - 1$, $\phi = n - k$ を用い, 定数 c を除き,

$$V_1 \equiv \prod_i |A_i|^{\phi_i/2} / |A|^{\phi/2} \quad (6.15)$$

の分布について考えてもよい。式 (6.15) は $p=1$ とした一変数の場合, 通常の $V_1 = s_1^2 / s_2^2$ となり, 自由度対 (ϕ_1, ϕ_2) で F 検定できる式に相対している。

また仮説 H として, $\boldsymbol{\mu}^{(1)} = \boldsymbol{\mu}^{(2)} = \dots = \boldsymbol{\mu}^{(k)} \equiv \boldsymbol{\mu}$ かつ $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \dots = \boldsymbol{\Sigma}_k$, すなわち正規母集団がすべて全く同一のものであるという仮説検定の場合を考えてみよう。このときの尤度比 λ は, 式 (6.14) の c を用い

$$\lambda = c \prod_i |A_i|^{n_i/2} / |B|^{n/2} \quad (6.16)$$

と得られる。ここに $B \equiv \sum_i^k \sum_{\alpha}^{n_i} (\mathbf{x}_{\alpha}^{(i)} - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{\alpha}^{(i)} - \bar{\mathbf{x}})'$, $\bar{\mathbf{x}} \equiv \sum_i \sum_{\alpha} \mathbf{x}_{\alpha}^{(i)} / \sum_i n_i$,
ここでさきの式 (6.14) と (6.15) の関係のように

$$V = \prod_i |A_i|^{\phi_i/2} / |B|^{\phi/2} \quad (6.17)$$

で検定を考えてもよい。

このようにして誘導された検定のための基準統計量 λ_1 または V_1 , λ または V の分布はきわめて複雑で、それらの積率 (moments) を求め、漸近的になんらかの通常の分布に帰属せしめる努力がなされている。事実、2母集団 ($k=2$) の場合で変量数 p を $2, 3, \dots$ としても、 $\Pr\{V_1 \leq v_1\}$, $\Pr\{V \leq v\}$ への近似は非常に複雑になり、それほど、通常の応用に適しているとは思われない。ここでは、むしろ観測数がかかなり大きいとして、一般の場合の漸近的な結果を日常のものとして紹介しておく。

i) V_1 の場合、いま f, ρ, ω_2 および V_1 の代わりに、 W_1 を

$$\left. \begin{aligned} f &\equiv (k-1)p(p+1)/2, \quad \rho \equiv 1 - \left(\sum_i \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right) \frac{2p^2 + 3p - 1}{6(p+1)(k-1)} \\ \omega_2 &\equiv p(p+1) \left\{ (p-1)(p+2) \left(\sum_i \frac{1}{\phi_i^2} - \frac{1}{\phi^2} \right) - 6(k-1)(-1-\rho)^2 \right\} / 48\rho^2 \\ \text{および } W_1 &\equiv c_1 V_1, \quad c_1 \equiv \prod_i^k (\phi/\phi_i)^{p\phi_i/2} \end{aligned} \right\} \quad (6.18)$$

と定義すると、

$$\begin{aligned} \Pr\{-\rho \log W_1 \leq z\} &= \Pr(\chi^2_{f \leq z}) + \omega_2 \{\Pr(\chi^2_{f+4 \leq z}) \\ &\quad - \Pr(\chi^2_{f \leq z})\} + O(\phi^{-3}) \end{aligned} \quad (6.19)$$

が得られる。すなわち χ^2 分布の値を利用し、 W_1 の観測値と比較し、仮説 H_1 が検定される。

ii) V の場合、新たに f, ρ, ω_2 および V の代わりに W を

$$\left. \begin{aligned} f &\equiv (k-1)p(p+3)/2 \\ \rho &\equiv 1 - \left(\sum_i \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right) \frac{2p^2 + 3p - 1}{6(k-1)(p+3)} - \frac{1}{\phi} \frac{p-k+2}{p+3} \end{aligned} \right\}$$

$$\omega_2 \equiv \frac{p}{288\rho^2} \left\{ 6 \left(\sum \frac{1}{\phi_i^2} - \frac{1}{\phi^2} \right) (p^2 - 1)(p + 2) \right. \\
- \left(\sum \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right)^2 \frac{(2p^2 + 3p - 1)^2}{(k - 1) \cdot (p + 3)} \\
- 12 \left(\sum \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right) \frac{(2p^2 + 3p - 1)(p - k + 2)}{\phi(p + 3)} \\
- 36 \frac{(k - 1)(p - k + 2)^2}{\phi^2(p + 3)} \\
\left. - \frac{12(k - 1)}{\phi^2} (-2k^2 + 7k + 3kp - 2p^2 - 6p - 4) \right\} \quad (6.20)$$

および $W \equiv c_1 V$ と定義すると

$$\Pr \{-2\rho \log W \leq z\} = \Pr \{\chi^2_f \leq z\} + \omega_2 \{\Pr \{\chi^2_{f+4} \leq z\} \\
- \Pr \{\chi^2_f \leq z\}\} + O(\phi^{-3}) \quad (6.21)$$

が得られる。すなわち、 χ^2 分布の理論値と観測 W 値により、仮説 H の検定ができる。

6.4 計算プログラミング

A. 多変量観測値に関する棄却限界

Input		Output	
K	変数の数	$XM(I)$	平均値ベクトル $I=1, 2, \dots, K$
N	標本の大きさ (数)	$A(I, J)$	分散共分散行列 $I=1, 2, \dots, K, J=1, 2, \dots, K$ 2 次の係数として使用
$X(I)$	観測値ベクトル $I=1, 2, \dots, K$		
$P005$ $P001$	危険率たとえば 0.05 と 0.01 のように大きいものの順に	$B(I)$	1 次の係数
$F005$ $F001$	危険率 $P005, P001$ に対する F の値	C	定数項
NOC	標本の番号	N K	検定の際の F -分布の自由度
$X(I)$	観測値ベクトル $I=1, 2, \dots, K$	F	F の値

TOLERANCE LIMIT FOR A MULTIDIMENSIONAL SAMPLE

K --- NO. OF VARIABLES
SUBROUTINE MATINV REQUIRED

C
C
C
C
C
C

```

DIMENSION A(30,31),XM(30),B(30),X(30)
COMMON A
1 READ 100,K,N
DO 2 I=1,K
  XM(I)=0.
DO 2 J=1,K
2 A(I,J)=0.
  NN=N
3 READ 101,NOC,{X(I),I=1,K}
  NN=NN-1
DO 4 I=1,K
  XM(I)=XM(I)+X(I)
DO 4 J=1,I
4 A(I,J)=A(I,J)+X(I)*X(J)
  IF(NN)5,5,3
5 FK=K
  FN=N
DO 6 I=1,K
  XM(I)=XM(I)/FN
DO 6 J=1,I
  A(I,J)=A(I,J)/(FN-1.)-FN*XM(I)*XM(J)/(FN-1.)
6 A(J,I)=A(I,J)
  TYPE 200,N,K
  TYPE 201
  TYPE 202,{I,XM(I),I=1,K}
  TYPE 203
DO 7 I=1,K
7 TYPE 204,{I,J,A(I,J),J=1,I}
  CALL MATINV(K,A)
  C=0.
DO 9 J=1,K
  B(J)=0.
DO 8 L=1,K
  A(J,L)=A(J,L)*(FN-FK)*FN/(FK*(FN+1.)*(FN-1.))
8 B(J)=B(J)+A(J,L)*XM(L)
  C=C+B(J)*XM(J)
9 B(J)=-2.*B(J)
DO 10 I=2,K
  L=I-1
DO 10 J=1,L
10 A(I,J)=2.*A(I,J)
  TYPE 205
DO 11 I=1,K
11 TYPE 204,{I,J,A(I,J),J=1,I}
  TYPE 206
  TYPE 202,{I,B(I),I=1,K}
  TYPE 207,C
12 READ 102,P005,F005,P001,F001
  N=N-K
  TYPE 208,P005,F005,P001,F001,K,N
13 READ 101,NOC,{X(I),I=1,K}
  F=C
DO 14 I=1,K
  F=F+B(I)*X(I)
DO 14 J=1,I
14 F=F+A(I,J)*X(I)*X(J)
  TYPE 209,NOC,{I,X(I),I=1,K}
  IF(F-F001)15,18,18
15 IF(F-F005)16,17,17
16 TYPE 210,F
  GO TO 13
17 TYPE 211,F
  GO TO 13
18 TYPE 212,F
  GO TO 13

```



```

4 READ 101,N(L)
  NN=N(L)
5 READ 102,(R(I),I=1,K)
  NN=NN-1
  DO 6 I=1,K
    X(L,I)=X(L,I)+R(I)
  DO 6 J=1,K
6 A(I,J)=A(I,J)+R(I)*R(J)
  IF(NN)7,7,5
7 L=L+1
  IF(L-2)4,4,8
8 SN1=N(1)
  SN2=N(2)
  DO 10 I=1,K
    DO 9 J=1,K
      A(I,J)=(A(I,J)-X(1,I)*X(1,J)/SN1-X(2,I)*X(2,J)/SN2)/{SN1+SN2-2.}
9 A(J,I)=A(I,J)
  X(1,I)=X(1,I)/SN1
  X(2,I)=X(2,I)/SN2
10 A(I,K+1)=X(1,I)-X(2,I)
  TYPE 200,N(1),N(2)
  TYPE 201,(I,X(1,I),X(2,I),I=1,K)
  TYPE 202
  DO 11 I=1,K
11 TYPE 203,(I,J,A(I,J),J=1,I)
  HOTELLINGS T SQUARE
  CALL SLROOT(K,R)
  T=0.
  DO 12 I=1,K
12 T=T+R(I)*(X(1,I)-X(2,I))
  SN=SN1+SN2
  SSN=N(1)*N(2)
  T=SSN/SN*T
  SK=K
  F=T*(SN-SK-1.)/((SN-2.)*SK)
  TYPE 204,T
  IF(F-F2)14,13,13
13 TYPE 205,F
  GO TO 17
14 IF(F-F1)16,15,15
15 TYPE 206,F
  GO TO 17
16 TYPE 207,F
17 N1=K
  N2=N(1)+N(2)-K-1
  TYPE 208,SLV1,F1,N1,N2,SLV2,F2
  GO TO 1
100 FORMAT(12,2(F4.2,F8.2))
101 FORMAT(14)
102 FORMAT(30F2.0)
200 FORMAT(5X,13HSAMPLE GROUPS,9X,1HX,13X,1HY//5X,12HSAMPLE SIZES,7X,
115,9X,15/)
201 FORMAT(5X,12HMEAN VECTORS/(12X,13,2X,E12.5,2X,E12.5))
202 FORMAT(//24HCOMMON COVARIANCE MATRIX,/)
203 FORMAT(4(13,13,1X,E12.5))
204 FORMAT(///5X,22HHOTELLINGS T SQUARE =,E12.5,/)
205 FORMAT(5X,3HF =,F9.2,1X,15H** SIGNIFICANT,/)
206 FORMAT(5X,3HF =,F9.2,1X,15H* SIGNIFICANT,/)
207 FORMAT(5X,3HF =,F9.2,5X,15HNON-SIGNIFICANT,/)
208 FORMAT(5X,2HF(,F5.2,3H) =,F8.2,5X,4HN1 =,15,7H N2 =,15,/,5X,2HF(
1,F5.2,3H) =,F8.2)
END

```

[付] サブ・ルーティン SLROOT

```

C      SUBROUTINE OF SIMULTANEOUS LINEAR EQUATION
C
C
C      K --- RANK OF MATRIX
C      ROOTS GIVEN AT R(1)
C
      SUBROUTINE SLROOT(K,R)
      DIMENSION A(30,31),N(30),R(30)
      COMMON A
      KK=K+1
      DO 1 I=1,K
1      N(I)=I
      I=1
2      L=1
3      IF(A(I,L))7,4,7
4      IF(L-K)5,6,6
5      L=L+1
      GO TO 3
6      TYPE 200
      STOP9999
7      IF(I-L)8,10,8
8      DO 9 M=1,K
      TEMP=A(M,I)
      A(M,I)=A(M,L)
9      A(M,L)=TEMP
      ITEMP=N(I)
      N(I)=N(L)
      N(L)=ITEMP
10     TEMP=A(I,I)
      DO 11 J=1,KK
11     A(I,J)=A(I,J)/TEMP
      DO 14 L=1,K
      IF(L-I)12,14,12
12     TEMP=A(L,I)
      DO 13 J=1,KK
13     A(L,J)=A(L,J)-TEMP*A(I,J)
14     CONTINUE
      I=I+1
      IF(I-K-1)2,15,15
15     DO 16 L=1,K
      M=N(L)
16     R(L)=A(M,KK)
      RETURN
200    FORMAT(5X,15HDETERMINANT = 0)
      END

```

C. 数個の多変量正規母集団が同等であるか否かの検定

Input		Output	
NG	群の数	I	群の番号
K	変数の数	N	上記の群の標本の大きさ
SG(I)	第 I 群の標本の大きさ		
CH1	自由度 $(NG-1)K(K+3)/2$ の χ^2 分布の値	SX(I,J)	上記の群の平均ベクトル $J=1, \dots, K$
X(L)	観測値ベクトル $L=1, 2, \dots, K$	A(I,J)	上記の群の分散共分散行列 $I, J=1, \dots, K$

		V	$\prod_i A_i ^{1/2} / B ^{1/2}$ $A_i = \sum_{\alpha} (x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x})(x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x})'$ $B = \sum_i \sum_{\alpha} (x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x})(x_{\alpha}^{(i)} - \bar{x})'$ $i=1, \dots, NG, \alpha=1, \dots, SG(i)$ $\phi_i = SG(i) - 1$ $\phi = \sum_i^{NG} SG(i) - NG$
		C	$[\phi \phi / \prod_i \phi_i \phi_i]^{1/2}$
		P	$1 - \left(\sum \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right)$ $\times \frac{(2K^2 + 3K - 1)}{6(NG - 1)(K + 3)}$ $- \frac{1}{\phi} \frac{K - NG + 2}{K + 3}$
		$W2$	$\frac{K}{288P^2} \left\{ 6 \left(\sum \frac{1}{\phi_i^2} - \frac{1}{\phi^2} \right) \right.$ $\times (K^2 - 1)(K - 2)$ $- \left(\sum \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right)^2$ $\times \frac{(2K^2 + 3K - 1)^2}{(NG - 1)(K + 3)}$ $- 12 \left(\sum \frac{1}{\phi_i} - \frac{1}{\phi} \right)$ $\times \frac{(2K^2 + 3K - 1)(K - NG + 2)}{\phi(K + 3)}$ $- 36 \frac{(NG - 1)(K - NG + 2)^2}{\phi^2(K + 3)}$ $- \frac{12(NG - 1)}{\phi^2} (-2NG^2$ $+ 7NG + 3NG \cdot K$ $- 2K^2 - 6K - 4) \left. \right\}$
		W	$C \times V$
		Z	$-2 P \log W$
		f	χ^2 -分布の自由度

C TEST OF SEVERAL MULTIVARIATE NORMAL DISTRIBUTIONS ARE IDENTICAL

C
C
C
C
C
C
C
C
C

NG --- NO. OF GROUPS
K --- NO. OF VARIABLES
SG(I) --- SAMPLE SIZE OF I-TH GROUP
SUBROUTINE DETER IS REQUIRED

```

DIMENSION A(30,30),B(30,30),SX(2,30),X(30),SG(20)
COMMON A
1 READ 100,K,NG,(SG(I),I=1,NG)
  READ 101,CH1
  DO 2 I=1,K
    SX(2,I)=0.
  DO 2 J=1,K
2 B(I,J)=0.
  V=0.
  TN=0.
  DO 8 I=1,NG
    TN=TN+SG(I)
    DO 3 J=1,K
      SX(1,J)=0.
      DO 3 L=J,K
3 A(J,L)=0.
  N=SG(1)
  DO 4 J=1,N
    READ 102,(X(L),L=1,K)
    DO 4 L=1,K
      SX(1,L)=SX(1,L)+X(L)
    DO 4 M=L,K
4 A(L,M)=A(L,M)+X(L)*X(M)
  DO 6 J=1,K
    SX(2,J)=SX(2,J)+SX(1,J)
  DO 5 L=J,K
    B(J,L)=B(J,L)+A(J,L)
    A(J,L)=A(J,L)-SX(1,J)*SX(1,L)/SG(1)
5 A(L,J)=A(J,L)
6 SX(1,J)=SX(1,J)/SG(1)
  TYPE 200,I,N,(J,SX(1,J),J=1,K)
  TYPE 201
  DO 7 J=1,K
7 TYPE 202,(J,L,A(J,L),L=1,K)
  CALL DETER(K,T)
  SG(1)=SG(1)-1.
8 V=V+SG(1)*LOGF(T)/2.
  DO 9 I=1,K
    DO 9 J=1,K
      A(I,J)=B(I,J)-SX(2,I)*SX(2,J)/TN
9 A(J,I)=A(I,J)
  CALL DETER(K,T)
  SNG=NG
  TN=TN-SNG
  V=EXP(V-TN*LOGF(T)/2.)
  SN=-1./TN
  SNN=-SN*SN
  C=TN*LOGF(TN)
  DO 10 I=1,NG
    SN=SN+1./SG(I)
    SNN=SNN+1./(SG(I)*SG(I))
10 C=C-SG(I)*LOGF(SG(I))
  SK=K
  F=(SNG-1.)*SK*(SK+3.)/2.

```

```

R=1.-SN*(2.*SK*SK+3.*SK-1.)/(6.*SNG-6.)*(SK+3.)-(SK-SNG+2.)/(TN*
1(SK+3.))
Y= (6.*SNN*(SK*SK-1.)*(SK+2.)-SN*SN*(2.*SK*SK+3.*SK-1.))*2/((SNG-
11.)*(SK+3.))-12.*SN*(2.*SK*SK+3.*SK-1.)*(SK-SNG+2.)/(TN*(SK+3.))-3
26.*(SNG-1.)*(SK-SNG+2.))*2/(TN*TN*(SK+3.))-12.*(SNG-1.)*(-2.*SNG*S
3NG+7.*SNG+3.*SNG*SK-2.*SK*SK-6.*SK-4.)/(TN*TN))*SK/(288.*R)
C=EXP(SK/2.*C)
W=C*V
Z=-2.*R*LOGF(W)
CR=CHI
TYPE 203,V,C,R,Y,W
IF(Z-CR)11,11,12
11 TYPE 204,Z
GO TO 13
12 TYPE 205,Z
13 KF=F
TYPE 206,KF
TYPE 207
GO TO 1
100 FORMAT(2I2,20F3.0)
101 FORMAT(F6.0)
102 FORMAT(18X,2F3.0)
200 FORMAT(/10HPOPULATION,5X,13,1X,E12.5,/)
1TOR,1/4(5X,13,1X,E12.5,/)
201 FORMAT(/18H VAR.-COV. MATRIX)
202 FORMAT(/4(2X,2I3,1X,E12.5))
203 FORMAT(/9H V =,E12.5,/9H C =,E12.5,/9H P =,E12.5,
1/9H W2 =,E12.5,/9H W =,E12.5,/)
204 FORMAT(15H -2P*LOG(W) =,F9.3,6X,15HNON-SIGNIFICANT,/)
205 FORMAT(15H -2P*LOG(W) =,F9.3,6X,15HSIGNIFICANT,/)
206 FORMAT(70H PR(-2P*LOG(W) / = 2) IS APPROXIMATELY PR(CHI-SQ(F) / =
1Z) WHERE (F) =,I4)
207 FORMAT(/40X,30H/= MEANS EQUAL OR SMALLER THAN)
END

```

[付] サブ・ルーティン DETER (行列式の求値)

```

C      SUBROUTINE OF DETERMINANT
C
C      SUBROUTINE DETER(K,T)
C
      DIMENSION A(30,30)
      COMMON A
      T=1.
      TT=0.
      KK=K-1
      DO 7 I=1, KK
        IF(A(I,I))5,1,5
      1 DO 2 J=1, K
        IF(A(I,J))3,2,3
      2 CONTINUE
      T=0.
      GO TO 8
      DO 4 L=1, K
        TT=A(L,J)
        A(L,J)=A(L,I)
      4 A(L,I)=TT
      T=-T
      5 T=A(I,I)*T
      U=A(I,I)
      DO 6 J=1, K
      6 A(I,J)=A(I,J)/U
      DO 7 J=1, KK
      TT=A(J+1,I)

```

```

DO 7 L=1,K
7 A(J+1,L)=A(J+1,L)-A(1,L)*TT
T=A(K,K)*T
8 RETURN
END

```

6.5 応 用 例

高血圧症患者の健康管理には、基礎的に血圧値自体がきわめて動揺しやすく、その要因として、気候、季節、労働、体位変換、精神緊張、食塩、アルコール、喫煙、遺伝、年齢など、可避的因子、不可避的因子ときわめて多くの変動要因が日常に作用していると考えられている。血圧値には収縮期血圧、拡張期血圧の2種類があり、しかもおのおのそれ自体意味をもつと同時に、互いに関連を有しても意味があり血圧測定値を二次元的にとらえる方法が種々試みられて

いる。

秋山、岡本、坂本・後藤・牡丹は対数血圧値が正規分布することから、2次元正規分布の棄却限界を求め、これを血圧楕円とよび、血圧の測定方法・血圧の季節変動、血圧の老化経過・薬剤効力の判定・病因別比較・患者の状態像別類型化など多くの考察を提唱している（岡本敏男：“高血圧管理について（第3報）”，老人病誌，1964，8巻6号，369-78頁）。たとえば、後藤は、浴風会老人ホームの長年月の健康管理において、脳出血で死亡した85症例の死亡前1年（ X ）と2年（ Y ）の平均血圧値（収縮期、拡張期）の有意検定を Hotelling の T^2 により行なっている。両群の対数血圧値の分散共分散行列は共通で、その成績は

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} 5.170 \\ 4.564 \end{pmatrix}, \quad \bar{y} = \begin{pmatrix} 5.108 \\ 4.492 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0.034969 & 0.030074 \\ 0.030074 & 0.033062 \end{pmatrix}$$

である。このとき T^2 統計量は 6.8659、したがって $F_0 = 3.41$ を得る。 F 分布表より、自由度対 (2, 167) の危険率 5% の F 値は 3.91 で有意性は認められない。しかし、かなり近接していることは今後の検討でなされるべきであろう。

参 考 文 献

- 1) Anderson, T.W. and Girschik, M.A.: Some extensions of the Wishart distribution, *Ann. Math. Statist.*, 15 (1944), 345.
- 2) Anderson, T.W.: The noncentral Wishart distribution and certain problems of multivariate statistics, *Ann. Math. Statist.*, 17 (1946), 409.
- 3) Anderson, T.W.: The asymptotic distributions of certain determinantal equations, *J.R. Statist. Soc.*, B 10 (1948), 132.
- 4) Anderson, T.W.: The asymptotic distribution of certain characteristic vectors, *Proc. Second Berkeley Symposium* (1951), Univ. of California Press.
- 5) Anderson, T.W.: An introduction to multivariate statistical analysis (1958), John Wiley and Sons.
- 6) Bartlett, M.S.: Properties of sufficiency and statistical tests, *Proc. Roy. Soc.*, A 160 (1937), 268-282.
- 7) Bartlett, M.S.: A note on tests of significance in multivariate analysis, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 35 (1939), 180.
- 8) Bishop, D.T.: On a comprehensive test of the homogeneity of variances and covariances in multivariate problems, *Biometrika*, 31 (1939), 31.
- 9) Bose, R.C.: On the exact distribution and moment coefficients of the D^2 -statistic. *Sankhya*, 2 (1936), 143.
- 10) Bose, R.C. and Roy, S.N.: The distribution of the Studentized D^2 -statistic, *Sankhya*, 4 (1938), 19.
- 11) Box, G.E.P.: A general distribution theory for a class of likelihood criteria, *Biometrika*, 36 (1949), 317-346.
- 12) Hotelling, H.: The generalization of Student's ratio, *Ann. Math. Statist.*, 2 (1931), 360-378.
- 13) Hsu, P.L.: Note on Hotelling's generalized T, *Ann. Math. Statist.*, 9 (1938), 231.
- 14) Hsu, P.L.: On generalized analysis of variance. I., *Biometrika*, 31 (1940), 221.
- 15) Kullback, S.: Information theory and statistics (1959), John Wiley and Sons.
- 16) Lawley, D.N.: A general method for approximating to the distribution of likelihood ratio criteria, 43 (1956), *Biometrika*, 295.
- 17) Lohnes, P.R.: Test space and discriminant space classification models and related significance test, 21 (1961), *Educ. Psychol. Meas.*, 559-574.

- 18) Mahalanobis, P. C.: Historical note on the D^2 -statistic, 9 (1948), *Sankhya*, 237.
- 19) Plackett, R. L.: An exact test for the equality of variances, 34 (1947), *Biometrika*, 311.
- 20) Rao, C. R.: Advanced statistical methods in biometric research (1952), John Wiley and Sons.
- 21) Roy, S. N.: Some aspects of multivariate analysis, (1957), John Wiley and Sons.
- 22) Rulon, P. J. and Brooks, W. D.: On statistical tests of group differences. (1961), Educ. Research Corporation.
- 23) Scheffé, H.: The analysis of variance (1963), John Wiley and Sons.
- 24) Wilks, S. S.: Certain generalization in the analysis of variance, 24 (1932), *Biometrika*, 471-474.

終わりに、本稿の執筆をお勧め下さった恩師 北川敏男 教授に、日ごろの御指導とあわせて、深く感謝の意を表します。また、各章の計算プログラミングについてはシオノギ解析センター、岸川良一、町原英、林英輝の諸氏に、文献・原稿の整理には酒井千鶴子嬢に、それぞれ御協力いただいた。ここにしるして、厚く御礼申し上げたい。

(浅野長一郎)

索引

A

誤った判断を下す確率.....180

B

バクファートミン法.....150
 パートレットの分解.....29
 幕等行列.....24, 38
 ベクトル相関係数.....21
 母寄与率.....193
 母集団.....1
 分布関数.....4
 分散共分散分析法.....128

D

独立性の仮説.....74
 独立性の検定.....57
 同時分布.....4
 同時積率.....6
 同時信頼区間.....75

G

擬似一変量問題.....72
 擬似二変量問題.....75
 誤差分散.....140
 誤差項.....139
 行列.....109
 —の微分.....114
 —の因子分解.....110
 行列式.....109

H

判別関数法.....128
 平均.....6
 平均平方回帰平面.....15
 平均平方線型回帰関数のベクトル.....15
 偏回帰係数.....199
 変量
 —の独立性.....124
 —の内部従属性.....124
 —の従属性.....124
 偏相関係数.....17, 191, 198
 —の分布.....50

—の推定.....50

非負.....3
 非心F-分布.....32
 非心 χ^2 -分布.....31
 非心率.....31
 Hotelling の自由度 p の T^2 -統計量.....32, 222
 不偏共分散行列.....24
 フィッシャーのZ変換.....195
 不信頼因子ベクトル.....139
 不信頼性.....140
 標本.....1
 標本平均ベクトル.....23
 標本平均の分布.....23
 標本寄与率.....191
 標本空間.....4
 標本共分散行列.....24
 標本内共分散行列.....108
 標本積和行列の分布.....24
 標本特有根の分布.....80

I

因子分析.....133
 因子負荷行列.....139
 因子群点ベクトル.....139
 1 標本の場合.....221, 222
 一意性の定理.....7
 一様性の検定.....101
 尤度比検定.....55
 尤度比規準.....55
 一般化ベータ分布.....35
 一般化分散.....29
 一般規準オプティミム法.....151
 一般の構造模型.....139

J

J. Wishart.....1

K

回帰.....191
 回帰分析.....127
 回帰関数ベクトル.....13
 回帰係数行列.....15
 —の推定.....90

回帰係数のベクトル	15
回帰曲線	13
確率楕円	197
確率楕円体	9
拡張された第一種検定法	72
関与率	197
k 標本の場合	223
$k(>2)$ 個の正規母集団のいずれかに 判別する場合	182
T^2 -検定	56
棄却楕円	197
棄却域	55
寄与率	197
“規準”バリマックス法	146
“規準”コバリミン法	150
コクランの定理	36, 38
効 率	42
構造の簡素化	143
K. Pearson	1
クァーティミン法	148
クァーチマックス法	143
共分散行列	7
——の構造に関する仮説検定	67
共分散行列分析	80, 104
共通因子	139
——に関する仮説検定	142
共有性	140

M

マハラノビスの距離	222
密度関数	4

N

内部一次変換	20
2 標本で Δ が異なる場合	223
2 標本の場合	221, 222
2 個の母集団のいずれかに判別する場合	180
二次形式	114
二次形式の独立性	36

O

オブリマックス法	147
----------	-----

R

R. A. Fisher	1
連続型	4
連続定理	7
臨界点	55

S

最大尤度推定ベクトル	37
最大根の分布	89
成因分析	132, 133, 135
正規回帰論	90
正規観測行列	23
正規線型回帰論	212
正則正規分布	9
正值定符号	3
正準変数	20
正準相関係数	20
正準相関係数の推定	54
線型回帰模型	211
線型結合の分布	10
セントロイド法	137
Δ 既知のときの等平均の仮説検定	221
Δ 未知のときの等平均の仮説検定	222
信頼楕円	198
信頼性	140
“素”バリマックス法	145
“素”コバリミン法	149
双方に相似な	72
相関分析	127
相関行列	7
相関比	195
相関係数	7
ステップ・ダウン重相関係数	16
ステューデント化された(中心的) ウィッシュアート行列	35
斜交回転	147
主成因分析	133
周辺分布	4, 9
集中楕円体	41

T

多変量ベールンズ・フィッシャー問題	223
多変量解析	123
対立仮説	55
単相関	192
単相関係数	191
——の分布	44
——の推定	44
特性関数	7, 11
特殊因子ベクトル	139
特殊性	140
等分散共分散行列の仮説検定	224
等平均仮説	57, 74
統計的仮説	55

統計的に、互いに独立	5
等共分散行列	
——の仮説	72
——の仮説検定	72

U

ウィッシュャート分布	27
ウィッシュャート行列	27

W

W. S. Gosset	1
--------------	---

Y

ヤコービの公式	109
ヤコービヤン	3, 116
唯一性	140
ユニオン・インターセクション法	72
より有効である	42

有意水準	55
有効推定ベクトル	42

Z

漸近分布	47, 80, 83, 100
残差	17
残差共分散行列	13
全共分散行列	102
自由度	27
条件つき分布	10
条件つき分布関数	5
条件つき確率	5
条件つき密度関数	5
充足統計量	41
重相関係数	15, 191, 196
——の分布	50
——の推定	50

Memorandum

Memorandum

著者紹介

^{しお} ^{たに} ^{かつる}
塩谷 実 カンザス州立大学統計学科教授、理学博士
^{あさ} ^の ^{ちよう} ^{いち} ^{ろう}
浅野 長一郎 シオノギ解析センター、甲南大学理学部

情報科学講座
(全 73 巻)

A・5・3 多変量解析論

定価1400 円

編集者との
申し合わせ
により
検印廃止

© 1967

昭和42年1月5日 初版1刷発行
 昭和46年11月25日 初版7刷発行

編集代表者 北川 敏 男
 喜 安 善 市

発 行 者 南 條 正 男
 東京都文京区小日向4丁目6番19号

印 刷 者 岩 永 吉 光
 東京都新宿区市ヶ谷本村町27番地

東京都文京区小日向4丁目6番19号
 発行所 電話東京(947)2511番(代表)
 振替口座東京57035番

共立出版株式会社

印刷・新日本印刷 製本・関山製本

NDC 417.6 Printed in Japan



3341-156071-1371

社団法人自然科学協会会員

情報科学講座

全73巻

大泉充郎・勝木保次・北川敏男・喜安善市・栗原俊彦・桑原万寿太郎
坂井利之・高田昇平・次田 皓・南雲仁一・中村幸雄・和田 弘編集

A・共通基礎理論	
情報科学への道……………	七五〇円
情報科学の動向Ⅰ……………	八〇〇円
情報科学の動向Ⅱ……………	一一〇〇円
情報科学の将来……………	統
論理数学Ⅰ……………	統
論理数学Ⅱ……………	統
論理数学Ⅲ……………	統
情報理論Ⅰ……………	統
情報理論Ⅱ……………	八〇〇円
情報理論Ⅲ……………	統
計画法理論概説……………	統
数理計画法Ⅰ……………	一六〇〇円
決定理論……………	統
組織論……………	統
最適制御過程Ⅰ……………	一二〇〇円
最適制御過程Ⅱ……………	八五〇円
制御原理……………	統
統計的制御過程……………	統
適応制御過程……………	統
マルコフ過程……………	九五〇円
確率過程論……………	七〇〇円
多変量解析論……………	一四〇〇円
推測過程論……………	統
B・生体情報	
感覚情報Ⅰ……………	一〇〇〇円
C・言語および行動	
言語理論……………	九〇〇円
言語の機械処理……………	統
計算機用言語……………	統
情報処理Ⅰ……………	六五〇円
情報処理Ⅱ……………	統
情報処理Ⅲ……………	統
ゲーム理論と行動理論……………	七五〇円
情報の伝播……………	一六〇〇円
記号行動論……………	七五〇円
グループダイナミクス……………	統
D・情報システム	
入出力装置……………	八〇〇円
論理要素Ⅰ……………	八〇〇円
記憶装置Ⅰ……………	一〇〇〇円
記憶装置Ⅱ……………	一〇〇〇円
情報要素の小型実装法……………	統
E・情報系モデル	
学習理論・学習解析……………	一〇〇〇円
プログラム学習……………	統
学習実験……………	七〇〇円
学習制御及び学習制御機械……………	九五〇円
自己組織化モデルⅠ……………	統
自己組織化モデルⅡ……………	統
パターン認識の理論……………	七〇〇円
文字・図形の認識機械……………	一〇〇〇円
音声の認識機械……………	統
各巻A5判・平均二〇〇頁・上製挿入	
新しい情報要素……………	統
オートエレクトロニクス……………	統
計算体系Ⅰ……………	統
計算体系Ⅱ……………	統
科学技術計算……………	統
経営情報システムの設計……………	八五〇円
オンライン・システム……………	統
実時間システム概論……………	六〇〇円
実時間システム設計論……………	統
実時間システム開発……………	八〇〇円
データ通信……………	統
システム数学……………	統
生体システム……………	統
社会システム……………	統
システム工学……………	統
創造システム……………	統