

共分散行列に関する検定の仮説の近傍での
漸近展開について

熊本大学教養部 長尾寿夫

1. 序

多次元正規分布の共分散行列 Σ に関する次の仮説検定問題を取り扱う。

(i) 仮説 $H_1: \Sigma = \Sigma_0$ 対立仮説 $K_1: \Sigma \neq \Sigma_0$. (ii) $H_2: \Sigma = \sigma^2 I$ $K_2: \Sigma \neq \sigma^2 I$ (iii) $H_3: \Sigma = \Sigma_D$ $K_3: \Sigma \neq \Sigma_D$ (iv) $H_4: \Sigma_1 = \cdots = \Sigma_k (= \Sigma)$
 $K_4: \Sigma_i \neq \Sigma_j \ (i \neq j)$. ここで Σ_D は、次の行列である。

$$(1.1) \quad \Sigma_D = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \Sigma_{kk} \end{pmatrix}.$$

これに対する尤度比検定を λ としたとき、対立仮説の下での漸近展開は、(i), (ii) に対しては, Sugiura [9], (iii), (iv) に対しては, Nagao [7], [6] によって求められた。そのオー項は、正規分布となり、仮説の下では、その分散は 0 となる。このことより Nagao [8] は、(i) ~ (iv) に対する検定基準をあたえ

仮説の下での漸近展開を求めた。ここではそれらの検定と (iii), (iv) に対する尤度比検定の仮説の近傍での漸近展開を取り扱う。(ただし n^{-1} の項は、省略)。

2. 検定統計量

$X_1, X_2, \dots, X_N$ を p 次元正規分布 $N(\mu, \Sigma)$ からの標本とする。このとき (i) に対して,

$$(2.1) \quad T_1 = \frac{n}{2} \text{tr}(S \Sigma_0^{-1} / n - I)^2$$

ただし $S = \sum_{\alpha=1}^N (X_\alpha - \bar{X})(X_\alpha - \bar{X})'$, $n = N - 1$.

(ii) に対しては,

$$(2.2) \quad T_2 = \frac{p^2 n}{2} \text{tr} \left\{ \frac{S}{\text{tr} S} - p^{-1} I \right\}^2.$$

この検定は、別の観点より John [3] と Sugiyama [10] により, locally best invariant test であることが示されている。

(iii) に対しては,

$$(2.3) \quad T_3 = \frac{n}{2} \text{tr}(S S_D^{-1} - I)^2,$$

ただし

$$(2.4) \quad S_D = \begin{pmatrix} S_{11} & 0 \\ 0 & S_{gg} \end{pmatrix}.$$

特に, $g=2$ のとき, $T_3 = n \operatorname{tr} S_{12} S_{22}^{-1} S_{21} S_{11}^{-1}$ となり, Pillai 統計量となる。(iv) に対しては,

$$(2.5) \quad T_4 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^k n_{\alpha} \operatorname{tr} \left\{ \frac{S_{\alpha}}{n_{\alpha}} \left(\frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^k S_{\alpha} \right)^{-1} - I \right\}^2$$

ただし $S_{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_{\alpha}} (X_{\alpha j} - \bar{X}_{\alpha})(X_{\alpha j} - \bar{X}_{\alpha})'$, $n_{\alpha} = N_{\alpha} - 1$, $n = \sum_{\alpha=1}^k n_{\alpha}$.

また (iii) に対する尤度比検定は,

$$(2.6) \quad \lambda_3 = \frac{|S|^{\frac{N}{2}}}{\prod_{\alpha=1}^k |S_{\alpha}|^{\frac{N_{\alpha}}{2}}}.$$

(iv) に対する尤度比検定は,

$$(2.7) \quad \lambda_4 = \frac{\prod_{\alpha=1}^k |S_{\alpha}/n_{\alpha}|^{n_{\alpha}/2}}{|\sum_{\alpha=1}^k S_{\alpha}/n|^{n/2}}$$

3. 準備

$S(p \times p)$ を Wishart 分布 $W(\Sigma, n)$ とする。このとき次の補題を与える。

補題 1. $\Sigma = I + n^{\frac{1}{2}}\theta$ の下で, $Y = \sqrt{\frac{n}{2}}(\log S/n - \log \Sigma)$ は, 漸近的に, $p(p+1)/2$ 次元正規分布平均 0, 共分散行列

$$(3.1) \quad \begin{pmatrix} \overbrace{1 \cdots 1}^p & \overbrace{0 \cdots 0}^{p(p-1)/2} \\ \vdots & \\ 0 & \frac{1}{2} \cdots \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

に従う。ただし $\log S \equiv T'(\log \Lambda)T$.

証明. $U = (\Sigma^{\frac{1}{2}} S \Sigma^{\frac{1}{2}} - nI) / \sqrt{2n}$ とすると, U は漸近的に,
 $p(p+1)/2$ 次元正規分布平均 0 共分散行列 (3.1) をもつ. ここで
 $\Sigma = I + n^{-\frac{1}{2}} \Theta$ より, $\log S/n = \log(I + \frac{1}{\sqrt{n}}(\Theta + \sqrt{2}U) + O_p(n^{-1}))$
 $= \frac{1}{\sqrt{n}}(\Theta + \sqrt{2}U) + O_p(n^{-1})$. かくて $Y = U + O_p(n^{-\frac{1}{2}})$.

次に $Z = \sqrt{\frac{2}{n}} \log S/n$ の分布を考える. $S = ne^{\sqrt{\frac{2}{n}}Z}$ より, Jacobian
 は, $\text{Jac} [2]$ より

$$(3.2) \quad \left| \frac{\partial S}{\partial Z} \right| = (2n)^{p(p+1)/4} \text{etr}[\sqrt{\frac{2}{n}} Y] \prod_{i>j}^p \frac{f(\lambda_i) - f(\lambda_j)}{\lambda_i - \lambda_j}.$$

ただし $f(\lambda_i) = e^{\lambda_i}$ で, $\lambda_i = \sqrt{\frac{2}{n}} c_{\lambda_i}(Z)$ である.

ここでは, 漸近展開を求めるのが目的であるから, (3.2) の
 後半を展開すると

$$(3.3) \quad \prod_{i>j}^p \frac{f(\lambda_i) - f(\lambda_j)}{\lambda_i - \lambda_j} = 1 + \frac{1}{2}(p-1)\sqrt{\frac{2}{n}} \text{tr} Z + O(n^{-1}).$$

また $|e^A| = \text{etr} A$ より Z の分布は, 次であたえられる.

$$(3.4) \quad c^* \cdot \text{etr} \left[\frac{1}{2}(n-p+1)\sqrt{\frac{2}{n}} Z - \frac{n}{2} \sum^1 e^{\sqrt{\frac{2}{n}} Z} \right] \left[1 + \frac{1}{2}(p-1)\sqrt{\frac{2}{n}} \text{tr} Z + O(n^{-1}) \right],$$

ただし

$$(3.5) \quad c^* = \left\{ \prod_{j=1}^p \Gamma\left[\frac{1}{2}(n+1-j)\right] \right\}^{-1} \left(\frac{n}{2}\right)^{p(2n-p-1)/4} n^{-p(p-1)/4} |\Sigma|^{-\frac{n}{2}}.$$

補題 2. $p(p+1)/2 \times 1$ ベクトル $(z_{11}, \dots, z_{pp}, z_{12}, \dots, z_{p-1,p})'$ は, 平均 0 共分散行列 $\Sigma^* = (\sigma_{ij,ke})$ をもつ正規分布とする。 $(i,j)=a$, $(k,l)=b$, $(m,n)=c$, $(j,r)=d$, $(s,t)=e$, $(u,v)=f$ とすると,

$$(3.6) \quad E y_a y_b y_c y_d = \sigma_{ab} \sigma_{cd} + \sigma_{ac} \sigma_{bd} + \sigma_{ad} \sigma_{bc}.$$

4. 漸近展開

T_1 の特性関数は, 次であたえられる。

$$(4.1) \quad C(t) = c_{p,n} \int \exp\left[(it) \frac{n}{2} \text{tr}(S \Sigma_0^{-1}/n - I)^2\right] |S|^{\frac{1}{2}(n-p-1)} |\Sigma_0^{-1}|^{-\frac{n}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \Sigma_0^{-1} S\right] dS.$$

$\Sigma_0^{-\frac{1}{2}} S \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} \rightarrow S$ とすると

$$= c_{p,n} \int \exp\left[(it) \frac{n}{2} \text{tr}(S/n - I)^2\right] |S|^{\frac{1}{2}(n-p-1)} |\Sigma_0^{-1}|^{-\frac{n}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} S\right] dS.$$

かくて統計量 $T_1 = \frac{n}{2} \text{tr}(S/n - I)^2$ となり, S は, $W(\Sigma_0^{-\frac{1}{2}} \Sigma_0^{-\frac{1}{2}}, n)$ となる。ここで $\Sigma = \Sigma_0 + n^{\frac{1}{2}} \theta$ の下での T_1 の漸近展開を求める。すると $\Sigma_0^{-\frac{1}{2}} \Sigma \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} = I + n^{\frac{1}{2}} \theta^*$ となる。ただし $\theta^* = \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} \theta \Sigma_0^{-\frac{1}{2}}$. よって補題 1 により $Y = \sqrt{\frac{n}{2}} (\log S - \log(I + n^{\frac{1}{2}} \theta^*))$ は, 漸近的に正規分布であるから, T_1 を Y で表すと,

$$(4.2) \quad T_1 = g_0(Y) + \frac{1}{\sqrt{n}} g_1(Y) + O_p(n^{-1})$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
 (4.3) \quad g_0(Y) &= \text{tr}(Y + \frac{1}{\sqrt{2}}\theta^*)^2, \\
 g_1(Y) &= \sqrt{2} \text{tr}(Y + \frac{1}{\sqrt{2}}\theta^*) \{ (Y + \frac{1}{\sqrt{2}}\theta^*)^2 - \frac{1}{2}\theta^{*2} \}.
 \end{aligned}$$

よって π の特性関数は、次のようになる。

$$(4.4) \quad C(t) = E[\exp(itg_0(Y)) \{1 + \frac{it}{\sqrt{n}} g_1(Y)\}] + O(n^{-1}).$$

そこで、上の平均を求めるために、 $g_0(Y)$ を $Z = \sqrt{\frac{n}{2}} \log S/n$ で、あらわし、 Z の分布 (3.4) をもちいると、(4.4) の右-項は、次のようになる。

$$\begin{aligned}
 (4.5) \quad E[\exp(itg_0(Y))] &= c \int \exp[-\frac{1}{2}(1-2it)\text{tr}Z^2 + \frac{1}{\sqrt{2}}\text{tr}\theta^*Z] \\
 &\quad \cdot \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}[it-1]\text{tr}\theta^{*2}Z + \frac{1}{2}\text{tr}\theta^*Z^2 - \frac{1}{3\sqrt{2}}\text{tr}Z^3 \right) + O(n^{-1}) \right\} dZ,
 \end{aligned}$$

$$c = c^* \cdot \text{etr}[-\frac{n}{2}(I + n^{\frac{1}{2}}\theta^*)^{-1}].$$

ここで、 $\exp$ の中を $p(p+1)/2$ 次元正規分布となるように、少し修正すると次のようになる。

$$(4.6) \quad c \cdot (2\pi)^{p(p+1)/4} 2^{-p(p+1)/4} (1-2it)^{-\frac{p}{2}} \cdot \exp\left[\frac{1}{4}\text{tr}\theta^{*2} + \frac{it}{2(1-2it)}\text{tr}\theta^{*2}\right]$$

$$\times E\left[1 + \frac{1}{\sqrt{n}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(it-1)\text{tr}\theta^{*2}Z + \frac{1}{2}\text{tr}\theta^*Z^2 - \frac{1}{3\sqrt{2}}\text{tr}Z^3 \right\} + O(n^{-1}) \right].$$

ここで E は、 Z を平均 $\frac{1}{2}(1-2it)^{-1}\theta^*$ 、共分散行列 $\sigma_{ij,kl} = (1-2it)^{-1} \cdot (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})/2$ としたときの平均を意味する。

また $f = \frac{1}{2}p(p+1)$. よって、係数を Stirling の公式をもちいて展開し、後半を補題2をもちいて計算すると、

$$(4.7) \quad (1-zit)^{-\frac{f}{2}} \exp\left[\frac{it}{2(1-zit)} a_2\right] \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{n}} \left[-\frac{a_3}{12}(t)_3 + \frac{1}{4}(a_3 - (p+1)a_1)(t)_2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4}(-a_3 + (p+1)a_1)(t)_1 + \frac{1}{12}a_3 \right] + O(n^{-1}) \right\},$$

ただし $a_i = \text{tr} \theta^{*i}$, $(t)_\alpha = (1-zit)^{-\alpha}$.

同様に才二項も計算することにより特性関数は、次のようになる。

$$(4.8) \quad C(t) = (1-zit)^{-\frac{f}{2}} \exp\left[\frac{it}{2(1-zit)} a_2\right] \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{n}} \left[\frac{a_3}{6}(t)_3 + \frac{1}{2}(p+1)a_1(t)_2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2}(-a_3 - (p+1)a_1)(t)_1 + \frac{1}{3}a_3 \right] + O(n^{-1}) \right\}.$$

よって上を反転することにより次の定理を得る。

定理1. $\Sigma = \Sigma_0 + n^{\frac{1}{2}}\theta$ の下で、

$$(4.9) \quad P_f(T_1 \leq x) = P_f(\delta^2) + \frac{1}{\sqrt{n}} \left\{ \frac{a_3}{6} P_{f+6}(\delta^2) + \frac{1}{2}(p+1)a_1 P_{f+4}(\delta^2) \right. \\ \left. + \frac{1}{2}(-a_3 - (p+1)a_1) P_{f+2}(\delta^2) + \frac{1}{3}a_3 P_f(\delta^2) \right\} + O(n^{-1}),$$

ただし $f = \frac{1}{2}p(p+1)$, $a_i = \text{tr}(\theta \Sigma_0^{-1})^i$, τ あり, $P_f(\delta^2)$ は、自由度 f である非心母数 δ^2 をもつ非心 χ^2 分布である。ただし $\delta^2 = a_2/4$.

同様な方法により以下の定理を得る。

定理 2. $\Sigma = \sigma^2 I + n^{\frac{1}{2}} \Theta$ の下で,

$$(4.10) \quad P_f(T_2 \leq x) = P_f(\delta^2) + \frac{1}{\sqrt{n}} \left\{ \left(\frac{1}{6} a_3 - \frac{1}{2} f^{-1} a_1 a_2 + \frac{1}{3} f^2 a_1^3 \right) P_{f+6}(\delta^2) \right. \\ \left. + \left(-\frac{1}{2} a_3 + f^{-1} a_1 a_2 - \frac{1}{2} f^2 a_1^3 \right) P_{f+2}(\delta^2) + \left(\frac{1}{3} a_3 - \frac{1}{2} f^{-1} a_1 a_2 + \frac{1}{6} f^2 a_1^3 \right) \right. \\ \left. \cdot P_f(\delta^2) \right\} + O(n^{-1}).$$

ただし $f = \frac{1}{2} p(p+1) - 1$, $a_i = \sigma^{-2i} \text{tr} \Theta^i$, $\delta^2 = a_2/4$.

定理 3. $\Sigma = \Sigma_D + n^{\frac{1}{2}} \Theta$ の下で,

$$(4.11) \quad P_f(T_3 \leq x) = P_f(\delta^2) + \frac{n^{\frac{1}{2}}}{6} a_3 \{ P_{f+6}(\delta^2) - 3 P_{f+2}(\delta^2) + 2 P_f(\delta^2) \} + O(n^{-1}).$$

ただし $f = \frac{1}{2} (p^2 - \sum_{\alpha=1}^k p_\alpha^2)$, $a_i = \text{tr} (\Theta \Sigma_D^{-1})^i$, $\delta^2 = a_2/4$.

なお特に $k=2$ の場合, $n^{\frac{1}{2}}$ の項は, 0 となる。またその場合に対して, Fujikoshi [1], Lee [4] によって上は求められている。

定理 4. $\Sigma_\alpha = \Sigma + n^{\frac{1}{2}} \Theta_\alpha$ ($\alpha=1, 2, \dots, k$) とし, $n_\alpha/n = \rho_\alpha$ 一定の下で,

$$(4.12) \quad P_f(T_4 \leq x) = P_f(\delta^2) + n^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{6} (\text{tr} A_3) P_{f+6}(\delta^2) + \frac{1}{2} (\varphi+1) (\text{tr} E_1) P_{f+4}(\delta^2) \right.$$

$$+ \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} A_3 - \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\theta} A_2 - \frac{1}{2} (p+1) \text{tr} E_1 \right\} P_{f+2}(\delta^2) + \left(\frac{1}{3} \text{tr} A_3 + \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\theta} A_2 \right) P_f(\delta^2) \\ + O(\bar{n}^{-1}),$$

ただし $f = \frac{1}{2}(k-1)p(p+1)$, $A_\beta = \sum_{\alpha=1}^k \rho_\alpha \{(\theta_\alpha - \hat{\theta}) \bar{\Sigma}^{-1}\}^\beta$, $\hat{\theta} = \sum_{\alpha=1}^k \rho_\alpha \theta_\alpha \bar{\Sigma}^{-1}$,
 $E_1 = \sum_{\alpha=1}^k (\theta_\alpha - \hat{\theta}) \bar{\Sigma}^{-1}$, $\delta^2 = \frac{1}{4} \text{tr} A_2$.

定理 5. $\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_D + N^{\frac{1}{2}} \bar{\theta}$ の下で,

$$(4.13) \quad \Pr(-2 \log \lambda_3 \leq x) = P_f(\delta^2) + \frac{N^{\frac{1}{2}}}{6} a_3 \{ P_{f+4}(\delta^2) - 3 P_{f+2}(\delta^2) \\ + 2 P_f(\delta^2) \} + O(N^{-1}).$$

特に, $g=2$ の場合には, 上の定理は, Lee [4], Muirhead [5], Sugiura [12] によってあたえられている。

定理 6. $\bar{\Sigma}_\alpha = \bar{\Sigma} + \bar{n}^{\frac{1}{2}} \bar{\theta}_\alpha$ ($\alpha=1, 2, \dots, k$) とし, $n_\alpha/\bar{n} = \rho_\alpha$ 一定の下で

$$(4.14) \quad \Pr(-2 \log \lambda_4 \leq x) = P_f(\delta^2) + \bar{n}^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{6} (\text{tr} A_3) P_{f+4}(\delta^2) + \left(-\frac{1}{2} \text{tr} A_3 - \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\theta} A_2 \right) \right. \\ \left. \times P_{f+2}(\delta^2) + \left(\frac{1}{3} \text{tr} A_3 + \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\theta} A_2 \right) P_f(\delta^2) \right\} + O(\bar{n}^{-1}).$$

なお $k=2$ の場合, Sugiura [11] によって求められている。

- [1] Fujikoshi, Y. (1970). Asymptotic expansions of the distributions of test statistics in multivariate analysis. J. Sci. Hiroshima Univ. Ser. A-I. 34 73-144.
- [2] Jack, H. (1964-65). Jacobians of transformations involving orthogonal matrices. Proc. Roy. Soc. Edinburgh 67 81-103.
- [3] John, S. (1971). Some optimal multivariate tests. Biometrika 58 123-127.
- [4] Lee, Y.S. (1971). Distribution of the canonical correlations and asymptotic expansions for distributions of certain independence test statistics. Ann. Math. Statist. 42 526-537.
- [5] Muirhead, R.J. (1972). On the test of independence between two sets of variates. Ann. Math. Statist. 43 1491-1497.
- [6] Nagao, H. (1970). Asymptotic expansions of some test criteria for homogeneity of variances and covariance matrices from normal populations. J. Sci. Hiroshima Univ. Ser. A-I 34 153-247.
- [7] _____ (1972). Non-null distributions of the likelihood ratio criteria for independence and equality of mean vectors and covariance matrices. Ann. Inst. Statist. Math. 24 67-79.
- [8] _____ (1973). On some test criteria for covariance matrix. Ann. Statist. (To appear).
- [9] Sugiura, N. (1969). Asymptotic expansions of the distributions of the likelihood ratio criteria for covariance matrix. Ann. Math. Statist. 40 2051-2063.
- [10] _____ (1972). Locally best invariant test for sphericity and the limiting distributions. Ann. Math. Statist. 43 1312-1316.
- [11] _____ (1972). Asymptotic formulas for hypergeometric function ${}_2F_1$ of matrix argument, useful in multivariate analysis. Report at the meeting of the Mathematical society of Japan.
- [12] _____ (1973). Asymptotic non-null distributions of the likelihood ratio criteria for covariance matrix under local alternatives. Ann. Statist. (To appear).