

異なった GMANOVA モデルにおける最小重み付き 残差平方和の差の分布形*

広島大学・理学研究科数学専攻[†] 小田凌也, 柳原宏和

Ryoya Oda and Hirokazu Yanagihara

Department of Mathematics, Graduate School of Science
Hiroshima University

§1. 導入

本論文では, Potthoff and Roy (1964) により提案された一般化多変量分散分析 (Generalized Multivariate Analysis of Variance; GMANOVA) モデルを取り扱う. GMANOVA モデルとは以下のように記述されたモデルであり, 例えば, Kshirsagar and Smith (1995), Srivastava and Rosen (1999) による総論がある.

$$\mathbf{Y} \sim N_{n \times p}(\mathbf{A}\Theta\mathbf{X}', \Sigma \otimes \mathbf{I}_n). \quad (1)$$

ただし, \mathbf{Y} は $n \times p$ 目的変数行列, \mathbf{A} は $n \times k$ 個体間計画行列, \mathbf{X} は $p \times q$ 個体内計画行列, Θ は $k \times q$ 未知回帰係数行列である. また, Σ は $p \times p$ 未知分散共分散行列であり, 正定値性を仮定する. 本論文では, n 次単位行列を \mathbf{I}_n と表し, また, 推定量の存在を保証するために, $\text{rank}(\mathbf{A}) = k$, $\text{rank}(\mathbf{X}) = q \leq p$, $n - p - k - 1 > 0$ を仮定する. GMANOVA モデルは多くの場合, 目的変数の経時的な変動を記述するために用いられることから成長曲線モデルとも呼ばれる. もし, データに k 個の群があり, それぞれの群に属する個体の経時変動に $(q - 1)$ 次多項式を当てはめることを考えるならば, 以下のような \mathbf{A} と \mathbf{X} を

用いばよい。

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{n_1} & \mathbf{0}_{n_1} & \cdots & \mathbf{0}_{n_1} \\ \mathbf{0}_{n_2} & \mathbf{1}_{n_2} & \cdots & \mathbf{0}_{n_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0}_{n_k} & \mathbf{0}_{n_k} & \cdots & \mathbf{1}_{n_k} \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{q-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{q-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_p & x_p^2 & \cdots & x_p^{q-1} \end{pmatrix}.$$

ただし, $\mathbf{1}_n$ はすべての成分が1である n 次元ベクトル, $\mathbf{0}_n$ はすべての成分が0である n 次元ベクトル, n_i は第 i 群に属する個体数である. GMANOVA モデルを適用する際には, 考え得る多項式の次数は $(q-1)$ 通りあるため, 想定されるモデルの個数も $(q-1)$ 個存在する. 重み付き残差平方和の最小化により Θ を推定した場合, それぞれのモデルのデータへの当てはまりの良さは重み付き残差平方和の最小値, つまり, 最小重み付き残差平方和により測られる. そのため, モデルの当てはまりの良さを比較する場合, 最小重み付き残差平方和の差を比較することになり, その振り舞いを調べることがモデル選択法において重要な役割を担う. そこで, 本論文では, 異なる2つのモデルにおける最小重み付き残差平方和の差が従う分布形を調べることを目的とする.

本論文の構成は以下の通りである. 第2章では, 本論文の目的を達成するために必要な設定を与える. 第3章では, 主定理である最小重み付き残差平方和の差の分布形を調べる. 数学的な証明は付録に記す.

§2. 準備

本章では, 本論文の目的を達成するために必要な設定を与える. まずはじめに, GMANOVA モデルにおける最小重み付き残差平方和を考える. (1) 式で定義された Θ と X をそれぞれ $\Theta = (\Theta_d, \bar{\Theta}_d)$, $X = (X_d, \bar{X}_d)$ と分割し, Θ_d と X_d のサイズをそれぞれ $k \times d$, $p \times d$ とする. ただし, Θ_d と X_d はそれぞれ Θ , X の第1列から第 d 列までを並べた行列であり, $\bar{\Theta}_d$ と \bar{X}_d はそれぞれ Θ , X の第 $d+1$ 列から第 q 列までを並べた行列である. このとき, Θ_d と X_d を使ったモデルを以下のように記述する.

$$Y \sim N_{n \times p}(A\Theta_d X_d', \Sigma_d \otimes I_n). \quad (2)$$

ただし, Σ_d は $p \times p$ 分散共分散行列で正定値性を仮定する. 特に, $d = q$ のとき (2) 式は (1) 式と同様のモデルとなる. このとき, (2) 式のモデルにおける重み付き残差平方和 (Weighted Residual Sum of Squares; WRSS) は,

$$\text{WRSS}_d(\Theta_d) = \text{tr}\{(Y - A\Theta_d X_d')'(Y - A\Theta_d X_d')S^{-1}\},$$

として与えられる。ただし、 $\mathbf{S} = (n - k)^{-1} \mathbf{Y}'(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_A)\mathbf{Y}$, $\mathbf{P}_A = \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'$ である。すると、 $\text{WRSS}_d(\boldsymbol{\Theta}_d)$ の $\boldsymbol{\Theta}_d$ に関する最小値である最小重み付き残差平方和は、

$$\text{WRSS}_d(\hat{\boldsymbol{\Theta}}_d) = n\text{tr}(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_d \mathbf{S}^{-1}), \quad (3)$$

として与えられる。ただし、 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}_d$ と $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_d$ はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_d &= \frac{1}{n}(\mathbf{Y} - \mathbf{A}\hat{\boldsymbol{\Theta}}_d \mathbf{X}'_d)'(\mathbf{Y} - \mathbf{A}\hat{\boldsymbol{\Theta}}_d \mathbf{X}'_d), \\ \hat{\boldsymbol{\Theta}}_d &= (\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}, \end{aligned} \quad (4)$$

として与えられる (証明は付録 A.1 参照)。特に、 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}_d$ と $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_d$ はそれぞれ $\boldsymbol{\Theta}_d$, $\boldsymbol{\Sigma}_d$ の最尤推定量であることが知られている。

次に、GMANOVA モデルでの真のモデルを与える。 $\boldsymbol{\Theta}_*$ と \mathbf{X}_* をそれぞれ $\boldsymbol{\Theta}$, \mathbf{X} の第 1 列から第 d_* 列までを並べた行列とし、 $\bar{\boldsymbol{\Theta}}_*$ と $\bar{\mathbf{X}}_*$ はそれぞれ $\boldsymbol{\Theta}$, \mathbf{X} の第 $(d_* + 1)$ 列から第 q 列までを並べた行列とする。ただし、 $\boldsymbol{\Theta}_*$ と \mathbf{X}_* のサイズはそれぞれ $k \times d_*$, $p \times d_*$ である。このとき、真のモデルを、

$$\mathbf{Y} \sim N_{n \times p}(\mathbf{A}\boldsymbol{\Theta}_* \mathbf{X}'_*, \boldsymbol{\Sigma}_* \otimes \mathbf{I}_n),$$

で定義する。ただし、 $\boldsymbol{\Sigma}_*$ は真の $p \times p$ 分散共分散行列で正定値性をもつ。

最後に、非心パラメータ行列を定義する。添え字 d ($1 \leq d \leq q - 1$) に対して、非心パラメータ行列は以下の $\boldsymbol{\Gamma}_d$ を用いて、 $\boldsymbol{\Gamma}_d \boldsymbol{\Gamma}'_d$ で定義される。

$$\boldsymbol{\Gamma}_d = \mathbf{Q}' \bar{\mathbf{H}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \mathbf{X}_* \boldsymbol{\Theta}'_* \mathbf{A}'. \quad (5)$$

ただし、 $\mathbf{H}_d = \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \mathbf{X}_d (\mathbf{X}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1} \mathbf{X}_d)^{-1/2}$ は $p \times d$ 行列で、 $\mathbf{H} = (\mathbf{H}_d, \bar{\mathbf{H}}_d)$ は p 次直交行列である。また、 $(p - d)$ 次直交行列 \mathbf{Q} は、

$$\mathbf{Q}_d = \begin{cases} \bar{\mathbf{H}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \bar{\mathbf{X}}_d (\bar{\mathbf{X}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1} \bar{\mathbf{X}}_d)^{-1/2} \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \bar{\mathbf{X}}_d^{-1/2} & (d_* \leq d \leq q - 1) \\ \|\bar{\mathbf{H}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}\|^{-1} \bar{\mathbf{H}}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1} & (1 \leq d \leq d_* - 1) \end{cases},$$

を用いて、 $\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}_d, \bar{\mathbf{Q}}_d)$ として定義される。ただし、 \mathbf{x}_{d+1} は \mathbf{X} の第 $(d + 1)$ 列ベクトルである。ここで、 $\bar{\mathbf{H}}_d$ は \mathbf{H}_d と直交することから、 $\mathbf{X}'_d \boldsymbol{\Sigma}_*^{-1/2} \bar{\mathbf{H}}_d = \mathbf{O}_{d, (p-d)}$ であるので、 $d_* \leq d \leq q - 1$ のときは、 $\boldsymbol{\Gamma}_d = \mathbf{O}_{(p-d), n}$ であることがわかる。ただし、 $\mathbf{O}_{n, m}$ はすべての成分が 0 である $n \times m$ 行列である。

§3. 最小重み付き残差平方和の差の分布形

本章では, (3) 式で与えられた異なる添え字 d に対する $\text{WRSS}_d(\hat{\Theta}_d)$ の差が従う分布形を調べる. 以下, その差を $\mathcal{D}(d_1, d_2)$ とかく. つまり,

$$\mathcal{D}(d_1, d_2) = \text{WRSS}_{d_1}(\hat{\Theta}_{d_1}) - \text{WRSS}_{d_2}(\hat{\Theta}_{d_2}),$$

とかく. (5) 式で定義される非心パラメータ行列 Γ_d は $d_* \leq d \leq q-1$ のとき $\Gamma_d = \mathbf{O}_{(p-d), n}$ となる. これを考慮して, 以下のような d の値によって場合分けされた 2 通りの \mathcal{D} の分布形を調べる.

$$\begin{cases} \mathcal{D}(d, q) & (d_* \leq d \leq q-1) \\ \mathcal{D}(d+1, d) & (1 \leq d \leq d_*-1) \end{cases}. \quad (6)$$

まずはじめに, $\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_d$ の列ベクトルで張る空間への射影行列を用いて, 以下のように $(n-k)^{-1}\text{WRSS}_d(\hat{\Theta}_d)$ の別表現を与える (証明は付録 A.2 参照).

補題 1 添え字 d ($1 \leq d \leq q$) に対して,

$$\frac{1}{n-k}\text{WRSS}_d(\hat{\Theta}_d) = p + \frac{1}{n-k}\text{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\},$$

が成り立つ. ただし, \mathcal{P}_d は $\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_d$ の列ベクトルで張る空間への射影行列で, $\mathcal{P}_d = \mathbf{P}_{\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_d} = \mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1/2}$ である.

次に, 補題 1 を用いて, $\mathcal{D}(d, q)$ と $\mathcal{D}(d+1, d)$ の別表現を得る. 簡単な計算により以下のような表現が得られる.

$$\mathcal{D}(d, q) = \text{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathcal{P}_q - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\}, \quad (7)$$

$$\mathcal{D}(d+1, d) = -\text{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathcal{P}_{d+1} - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\}. \quad (8)$$

ただし, \mathcal{P}_q と \mathcal{P}_{d+1} はそれぞれ,

$$\mathcal{P}_q = \mathbf{P}_{\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}} = \mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{S}^{-1/2},$$

$$\mathcal{P}_{d+1} = \mathbf{P}_{\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_{d+1}} = \mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_{d+1}(\mathbf{X}'_{d+1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_{d+1})^{-1}\mathbf{X}'_{d+1}\mathbf{S}^{-1/2},$$

として与えられる. 最後に, 行列サイズの縮小を行い, 2 次形式の分布形を調べる. 行列サイズの縮小では, Satoh *et al.* (1997) での Lemma 3.1 と同じ直交変換を行う. 2 次形式の分布系を調べるためには, Fujikoshi (2002) での Lemma 4.1 と同様の方法を用いる.

これらの操作を行うことで以下の2つの定理が得られる (証明はそれぞれ付録 A.3, A.4 参照).

定理 1 $d_* \leq d \leq q-1$, $q < p$ とし, $\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \mathbf{V}_3, \mathbf{V}_4$ は互いに独立に,

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_1 &\sim W_{q-d}(k, \mathbf{I}_{q-d}), \mathbf{V}_2 \sim W_{q-d}(n-p-k+q, \mathbf{I}_{q-d}), \\ \mathbf{V}_3 &\sim W_{q-d}(p-q, \mathbf{I}_{q-d}), \mathbf{V}_4 \sim W_{q-d}(n-p-k+2q-d, \mathbf{I}_{q-d}), \end{aligned}$$

に従うとする. このとき,

$$\begin{aligned} &\mathcal{D}(d, q) \\ &= (n-k) \text{tr} \left\{ \mathbf{V}_1 \left(\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{V}_3^{1/2} \mathbf{V}_4^{-1} \mathbf{V}_3^{1/2} \right)^{1/2} \mathbf{V}_2^{-1} \left(\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{V}_3^{1/2} \mathbf{V}_4^{-1} \mathbf{V}_3^{1/2} \right)^{1/2} \right\}, \end{aligned}$$

が成り立つ.

定理 2 $1 \leq d \leq d_* - 1$ とし, v_2, \mathbf{u}_3, v_4 は互いに独立に \mathbf{S} に依存した確率変数で,

$$\begin{aligned} v_2 &\sim \chi^2(n-p-k+d+1), \mathbf{u}_3 \sim N_{p-d-1}(\mathbf{0}_{p-d-1}, \mathbf{I}_{p-d-1}), \\ v_4 &\sim \chi^2(n-p-k+d+2), \end{aligned}$$

に従うとする. さらに, v_1 は, \mathbf{S} を与えた下での条件付き分布が自由度 k の非心カイ 2 乗分布に従う, つまり, $v_1 | \mathbf{S} \sim \chi^2(k; \delta_d)$ であるような確率変数とする. ただし,

$$\delta_d = \frac{(\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}_3') \Gamma_d \Gamma_d' (\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}_3')'}{v_4 + \mathbf{u}_3' \mathbf{u}_3}, \quad \Gamma_d = \mathbf{Q}' \bar{\mathbf{H}}_d' \Sigma_*^{-1/2} \mathbf{X}_* \Theta_*' \mathbf{A}',$$

であり, Γ_d は (5) 式で定義される $(p-d) \times n$ 行列である. このとき,

$$\mathcal{D}(d+1, d) = -(n-k) \frac{v_1}{v_2} \left(1 + \frac{\mathbf{u}_3' \mathbf{u}_3}{v_4} \right),$$

が成り立つ.

定理 1 では, $q < p$ を仮定しているが, $q = p$ のときはより簡単な分布形となる. 定理 1 での証明における直交行列 \mathbf{Q} を用いることなく次のような直接的な結果が得られる (証明は付録 A.5 参照).

系 1 $d_* \leq d \leq p-1$ とし, $\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2$ は互いに独立に,

$$\mathbf{V}_1 \sim W_{p-d}(k, \mathbf{I}_{p-d}), \mathbf{V}_2 \sim W_{p-d}(n-k, \mathbf{I}_{p-d}),$$

に従うとする。このとき、

$$\mathcal{D}(d, p) = (n - k)\text{tr}(\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2^{-1}),$$

が成り立つ。

定理 1, 2 を用いることで、 $\mathcal{D}(d, q)$ と $\mathcal{D}(d+1, d)$ のモーメントを計算することができる。特に、ここでは、1 次モーメントの結果を与える (証明は付録 A.6 参照)。

系 2 定数行列 \mathbf{M} を以下のように定義する。

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}'_{p-d-1} \\ \mathbf{0}_{p-d-1} & (n-p-k+d)^{-1} \mathbf{I}_{p-d-1} \end{pmatrix}.$$

$d_* \leq d \leq q-1$ のとき、 $\mathcal{D}(d, q)$ の期待値は、

$$E[\mathcal{D}(d, q)] = \frac{k(q-d)(n-k)(n-k-1)}{(n-p-k+d-1)(n-p-k+q-1)},$$

となる。また、 $1 \leq d \leq d_* - 1$ のとき、 $\mathcal{D}(d+1, d)$ の期待値は、

$$E[\mathcal{D}(d+1, d)] = - \left(\frac{n-k}{n-p-k+d-1} \right) \left\{ \frac{k(n-k-1)}{n-p-k+d} + \text{tr}(\mathbf{\Gamma}_d \mathbf{\Gamma}'_d \mathbf{M}) \right\},$$

となる。ただし、 $\mathbf{\Gamma}_d$ は (5) 式で定義される $(p-d) \times n$ 行列である。

A. 付録

A.1. (3) 式の証明

まず、 $\text{tr}\{(Y - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d)'(Y - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d) \mathbf{S}^{-1}\}$ は以下のように計算される。

$$\begin{aligned} & \text{tr}\{(Y - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d)'(Y - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d) \mathbf{S}^{-1}\} \\ &= \text{vec}(Y - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d)' \text{vec}(Y \mathbf{S}^{-1} - \mathbf{A}\mathbf{\Theta}_d \mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1}) \\ &= \{\text{vec}(Y) - (\mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}) \text{vec}(\mathbf{\Theta}_d)\}' \{(\mathbf{S}^{-1} \otimes \mathbf{I}_n) \text{vec}(Y) - (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}) \text{vec}(\mathbf{\Theta}_d)\} \\ &= \text{vec}(Y)' (\mathbf{S}^{-1} \otimes \mathbf{I}_n) \text{vec}(Y) \\ &\quad - 2 \text{vec}(Y)' (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}) \text{vec}(\mathbf{\Theta}_d) + \text{vec}(\mathbf{\Theta}_d)' (\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}' \mathbf{A}) \text{vec}(\mathbf{\Theta}_d) \\ &= [\text{vec}(\mathbf{\Theta}_d) - \{(\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d)^{-1} \mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \otimes (\mathbf{A}' \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}'\} \text{vec}(Y)]' (\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}' \mathbf{A}) \\ &\quad \cdot [\text{vec}(\mathbf{\Theta}_d) - \{(\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d)^{-1} \mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \otimes (\mathbf{A}' \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}'\} \text{vec}(Y)] \\ &\quad + \text{vec}(Y)' (\mathbf{S}^{-1} \otimes \mathbf{I}_n) \text{vec}(Y) - \text{vec}\{\mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d (\mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}_d)^{-1} \mathbf{X}'_d \mathbf{S}^{-1} \otimes \mathbf{P}_A\} \text{vec}(Y). \end{aligned}$$

ただし, $m \times n$ 行列 \mathbf{J} と $p \times q$ 行列 \mathbf{K} に対して, \mathbf{J} の vec 作用素 $\text{vec}(\mathbf{J})$ は \mathbf{J} の列ベクトルを縦に並べた mn 次元ベクトルを表し, \mathbf{J} と \mathbf{K} のクロネッカー積 $\mathbf{J} \otimes \mathbf{K}$ は \mathbf{J} のすべての成分に \mathbf{K} を掛け合わせた $mp \times nq$ 行列である (例えば, Harville, 1997, 16 章参照). また, 上式の計算では, vec 作用素とクロネッカー積の関係式: $\text{vec}(\mathbf{A}\Theta_d\mathbf{X}'_d) = (\mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A})\text{vec}(\Theta_d)$ を用いた. ここで, $(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d \otimes \mathbf{A}'\mathbf{A})$ は非負定値行列であるので, 上式を最小にする $\text{vec}(\hat{\Theta}_d)$ は,

$$\text{vec}(\hat{\Theta}_d) = \{(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1} \otimes (\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\}\text{vec}(\mathbf{Y}),$$

となる. したがって, $\hat{\Theta}_d = (\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}$ である. よって, 題意が示せた. \square

A.2. 補題 1 の証明

まず, (4) 式から $n\hat{\Sigma}_d$ は以下のように計算することができる.

$$\begin{aligned} n\hat{\Sigma}_d &= \{\mathbf{Y} - \mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\}' \{\mathbf{Y} - \mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\} \\ &= [(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_A)\mathbf{Y} + \mathbf{P}_A\mathbf{Y} \{ \mathbf{I}_p - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d \}]' \\ &\quad \cdot [(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_A)\mathbf{Y} + \mathbf{P}_A\mathbf{Y} \{ \mathbf{I}_p - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d \}] \\ &= \mathbf{Y}'(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_A)\mathbf{Y} \\ &\quad + \{ \mathbf{I}_p - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d \}' \mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y} \{ \mathbf{I}_p - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d \}. \end{aligned}$$

したがって, 上式を用いることで,

$$\begin{aligned} &\frac{n}{n-k} \text{tr}(\hat{\Sigma}_d\mathbf{S}^{-1}) \\ &= p + \frac{1}{n-k} \text{tr}[\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y} \{ \mathbf{S}^{-1/2} - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1/2} \} \\ &\quad \cdot \{ \mathbf{S}^{-1/2} - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1/2} \}'] \\ &= p + \frac{1}{n-k} \text{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathbf{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\}, \end{aligned}$$

と書くことができる. よって題意が示せた. \square

A.3. 定理 1 の証明

まずはじめに, \mathcal{P}_q を \mathcal{P}_d を用いて表すことで, (6) 式の $\mathcal{D}(d, q)$ に関する別表現を与える. 補助定理 1 を用いることで $(\mathbf{X}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X})^{-1}$ は,

$$\begin{aligned} C_{11} &= (\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1} + (\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\bar{\mathbf{X}}_d\mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}\bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}, \\ C_{12} &= -(\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_d)^{-1}\mathbf{X}'_d\mathbf{S}^{-1}\bar{\mathbf{X}}_d\mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}, \\ C_{22} &= \mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}, \\ C_{22\cdot 1} &= \mathbf{C}_{22} - \mathbf{C}'_{12}\mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{C}_{12} = \bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d, \end{aligned}$$

を用いて,

$$(\mathbf{X}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X})^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C'_{12} & C_{22} \end{pmatrix},$$

と表せる. これより, \mathcal{P}_q を計算すると,

$$\mathcal{P}_q = \mathcal{P}_d + (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d\mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}\bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d),$$

となる. 上式と (7) 式を用いることで,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(d, q) &= \text{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d\mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}\bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\} \\ &= \text{tr}\{\bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d\mathbf{C}_{22\cdot 1}^{-1}\}, \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

と書くことができる. ここで, $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2, \mathbf{\Lambda}_d$ を以下のようにおく.

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_1 &= \bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d, \\ \mathbf{T}_2 &= \bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{\Sigma}_*\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d, \\ \mathbf{\Lambda}_d &= \bar{\mathbf{X}}'_d\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_*\mathbf{\Theta}'_*\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{\Theta}_*\mathbf{X}'_*\mathbf{S}^{-1/2}(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d. \end{aligned}$$

このとき, $\text{rank}(\mathbf{T}_2) = q - d$ であり, \mathbf{T}_2 は半正定値行列であるので, \mathbf{T}_2 は正定値行列である. よって, $\mathbf{T}_2 = \mathbf{T}_2^{1/2}(\mathbf{T}_2^{1/2})'$ となる $(q - d) \times (q - d)$ 正則行列 $\mathbf{T}_2^{1/2}$ が存在する. ここで, $\mathbf{V}_1 = \mathbf{T}_2^{-1/2}\mathbf{T}_1(\mathbf{T}_2^{-1/2})'$ とおくと, $\mathbf{Y}'\mathbf{P}_A\mathbf{Y}$ と \mathbf{S} が互いに独立であることと, ウィンシャート分布の性質から, \mathbf{S} を与えた下での \mathbf{V}_1 の条件付き分布は,

$$\mathbf{V}_1|\mathbf{S} \sim W_{q-d}(k, \mathbf{I}_{q-d}; \mathbf{T}_2^{-1/2}\mathbf{\Lambda}_d(\mathbf{T}_2^{-1/2})'),$$

となる。ここで、 $d_* \leq d \leq q-1$ であることから、 $(\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d)\mathbf{S}^{-1/2}\mathbf{X}_* = \mathbf{O}_{p,d_*}$ が成り立つので、 $\mathbf{A}_d = \mathbf{O}_{q-d,q-d}$ となることがわかる。したがって、 \mathbf{V}_1 は \mathbf{S} と互いに独立に、

$$\mathbf{V}_1 \sim W_{q-d}(k, \mathbf{I}_{q-d}), \quad (\text{A.2})$$

に従うことがわかる。また、(A.1) 式を $\mathbf{V}_1, \mathbf{T}_2, \mathbf{C}_{22.1}$ を用いて書き直すと、

$$\mathcal{D}(d, q) = \text{tr}\{\mathbf{T}_2^{1/2}\mathbf{V}_1(\mathbf{T}_2^{1/2})'\mathbf{C}_{22.1}^{-1}\} = \text{tr}\{\mathbf{V}_1(\mathbf{T}_2^{1/2})'\mathbf{C}_{22.1}^{-1}\mathbf{T}_2^{1/2}\}, \quad (\text{A.3})$$

と表せる。

次に、 \mathbf{T}_2 と $\mathbf{C}_{22.1}$ の式変形を行う。まず、

$$\mathbf{Z}_d = \Sigma_*^{-1/2}\mathbf{X}_d, \quad \bar{\mathbf{Z}}_d = \Sigma_*^{-1/2}\bar{\mathbf{X}}_d,$$

とおく。また、 p 次直交行列 \mathbf{H} を、

$$\mathbf{H} = (\mathbf{H}_d, \bar{\mathbf{H}}_d), \quad \mathbf{H}_d = \mathbf{Z}_d(\mathbf{Z}'_d\mathbf{Z}_d)^{-1/2},$$

とする。ただし、 \mathbf{H}_d : $p \times d$ 行列、 $\bar{\mathbf{H}}_d$: $p \times (p-d)$ 行列である。さらに、 $\mathbf{U} = (n-k)\mathbf{H}'\Sigma_*^{-1/2}\mathbf{S}\Sigma_*^{-1/2}\mathbf{H}$ とおくと、ウィシャート分布の性質から、 $\mathbf{U} \sim W_p(n-k, \mathbf{I}_p)$ である。このとき、 \mathbf{T}_2 と $\mathbf{C}_{22.1}$ はそれぞれ、

$$\mathbf{T}_2 = (n-k)^2\bar{\mathbf{Z}}'_d\mathbf{H}(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{U}^{-1})^2\mathbf{H}'\bar{\mathbf{Z}}_d, \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{C}_{22.1} = (n-k)\bar{\mathbf{Z}}'_d\mathbf{H}(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{U}^{-1})\mathbf{H}'\bar{\mathbf{Z}}_d, \quad (\text{A.5})$$

と表せる。ただし、 $\mathbf{G} = \mathbf{H}'\mathbf{H}_d(\mathbf{H}'_d\mathbf{H}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}'\mathbf{H}_d)^{-1}\mathbf{H}'_d\mathbf{H}$ である。ここで、 \mathbf{U} を以下のように分割する。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{U}_{21} & \mathbf{U}_{22} \end{pmatrix}.$$

ただし、 \mathbf{U}_{11} は $d \times d$ 行列、 \mathbf{U}_{22} は $(p-d) \times (p-d)$ 行列である。すると、補助定理 1 を用いることで、

$$\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{d,d} & \mathbf{O}_{d,p-d} \\ \mathbf{O}_{p-d,d} & \mathbf{U}_{22}^{-1} \end{pmatrix},$$

となることから、(A.4) 式と (A.5) 式はそれぞれ、

$$\mathbf{T}_2 = (n-k)^2\bar{\mathbf{Z}}'_d\bar{\mathbf{H}}_d\mathbf{U}_{22}^{-2}\bar{\mathbf{H}}'_d\bar{\mathbf{Z}}_d, \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{C}_{22.1} = (n-k)\bar{\mathbf{Z}}'_d\bar{\mathbf{H}}_d\mathbf{U}_{22}^{-1}\bar{\mathbf{H}}'_d\bar{\mathbf{Z}}_d, \quad (\text{A.7})$$

と書くことができる。ここで、 $(p-d)$ 次直交行列 \mathbf{Q} を、

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}_d, \bar{\mathbf{Q}}_d), \mathbf{Q}_d = \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{-1/2},$$

とする。ただし、 \mathbf{Q}_d : $(p-d) \times (q-d)$ 行列、 $\bar{\mathbf{Q}}_d$: $(p-d) \times (p-q)$ 行列である。すると、 \mathbf{U}_{22} はウィシャート分布の性質から、 $\mathbf{U}_{22} \sim W_{p-d}(n-k, \mathbf{I}_{p-d})$ であるので、 $\mathbf{W} = \mathbf{Q}' \mathbf{U}_{22} \mathbf{Q}$ とおくと、 $\mathbf{W} \sim W_{p-d}(n-k, \mathbf{I}_{p-d})$ である。ここで、 \mathbf{W} を以下のように分割する。

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{11} & \mathbf{W}_{12} \\ \mathbf{W}_{21} & \mathbf{W}_{22} \end{pmatrix}.$$

ただし、 \mathbf{W}_{11} は $(q-d) \times (q-d)$ 行列、 \mathbf{W}_{22} は $(p-q) \times (p-q)$ 行列である。このとき、補助定理 1 を用いることで、(A.6) 式と (A.7) 式はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_2 &= (n-k)^2 \bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{Q} (\mathbf{Q}' \mathbf{U}_{22} \mathbf{Q})^{-2} \mathbf{Q}' \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d \\ &= (n-k)^2 (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{1/2} \mathbf{W}_{11.2}^{-1} (\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{W}_{21}) \mathbf{W}_{11.2}^{-1} (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{1/2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{22.1} &= (n-k) \bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{Q} (\mathbf{Q}' \mathbf{U}_{22} \mathbf{Q})^{-1} \mathbf{Q}' \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d \\ &= (n-k) (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{1/2} \mathbf{W}_{11.2}^{-1} (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{1/2}, \end{aligned}$$

となる。ただし、 $\mathbf{W}_{11.2} = \mathbf{W}_{11} - \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1} \mathbf{W}_{21}$ である。ここで、上式の表現から、 $\mathbf{T}_2^{1/2}$ の 1 つとして、 $\mathbf{T}_2^{1/2} = (n-k) (\bar{\mathbf{Z}}'_d \bar{\mathbf{H}}_d \bar{\mathbf{H}}'_d \bar{\mathbf{Z}}_d)^{1/2} \mathbf{W}_{11.2}^{-1} (\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{W}_{21})^{1/2}$ をとることができる。すると (A.3) 式は、

$$\mathcal{D}(d, q) = \text{tr}\{\mathbf{V}_1 (\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{W}_{21})^{1/2} \mathbf{W}_{11.2}^{-1} (\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{W}_{21})^{1/2}\}, \quad (\text{A.8})$$

と表せる。ここで、 $\mathbf{V}_2 = \mathbf{W}_{11.2}$ とおくと、補助定理 2 から、

$$\mathbf{V}_2 \sim W_{q-d}(n-p-k+q, \mathbf{I}_{q-d}), \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{W}_{22} \sim W_{q-d}(n-k, \mathbf{I}_{q-d}),$$

$$\mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1/2} \sim N_{(q-d) \times (p-q)}(\mathbf{O}_{q-d, p-q}, \mathbf{I}_{p-q} \otimes \mathbf{I}_{q-d}),$$

が成り立ち、 \mathbf{V}_2 、 \mathbf{W}_{22} 、 $\mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1/2}$ は互いに独立である。さらに、

$$\mathbf{V}_3 = \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1} \mathbf{W}_{21},$$

$$\mathbf{V}_4^{-1} = (\mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1} \mathbf{W}_{21})^{-1/2} \mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{W}_{21} (\mathbf{W}_{12} \mathbf{W}_{22}^{-1} \mathbf{W}_{21})^{-1/2},$$

とおく。すると、逆ウィシャート分布の性質を利用することで、

$$\mathbf{V}_3 \sim W_{q-d}(p-q, \mathbf{I}_{q-d}), \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{V}_4 \sim W_{q-d}(n-p-k+2q-d, \mathbf{I}_{q-d}), \quad (\text{A.11})$$

となり, V_2, V_3, V_4 は互いに独立である. したがって, (A.2), (A.9), (A.10), (A.11) 式で与えられる V_1, V_2, V_3, V_4 を用いて (A.8) 式は,

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}(d, q) \\ &= (n-k) \operatorname{tr} \left\{ V_1 \left(I_{q-d} + V_3^{1/2} V_4^{-1} V_3^{1/2} \right)^{1/2} V_2^{-1} \left(I_{q-d} + V_3^{1/2} V_4^{-1} V_3^{1/2} \right)^{1/2} \right\}, \end{aligned}$$

と表せる. □

A.4. 定理 2 の証明

まず, 補助定理 1 を用いることで $\mathcal{P}_{d+1} - \mathcal{P}_d$ は,

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}_{d+1} - \mathcal{P}_d \\ &= \{ \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1} \}^{-1} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1} \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d), \end{aligned}$$

と表される. 上式と (8) 式を用いることで, (6) 式の $\mathcal{D}(d+1, d)$ は,

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}(d+1, d) \\ &= -\{ \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1} \}^{-1} \\ & \quad \times \operatorname{tr} \{ \mathbf{Y}' \mathbf{P}_A \mathbf{Y} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1} \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \} \\ &= \frac{\mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{Y}' \mathbf{P}_A \mathbf{Y} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}}{\mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}}, \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

と書くことができる. ここで, t_1, t_2, t_3, λ_d を以下のようにおく.

$$\begin{aligned} t_1 &= \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{Y}' \mathbf{P}_A \mathbf{Y} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}, \\ t_2 &= \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \Sigma_* \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}, \\ t_3 &= \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}, \\ \lambda_d &= \mathbf{x}'_{d+1} \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{X}_* \Theta_*' \mathbf{A}' \mathbf{A} \Theta_* \mathbf{X}_*' \mathbf{S}^{-1/2} (\mathbf{I}_p - \mathcal{P}_d) \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}. \end{aligned}$$

すると, (A.12) 式は,

$$\mathcal{D}(d+1, d) = -\frac{t_1}{t_2} \cdot \frac{t_2}{t_3}, \quad (\text{A.13})$$

とかける. ここで, $v_1 = t_1/t_2$ とおくと, $\mathbf{Y}' \mathbf{P}_A \mathbf{Y}$ と \mathbf{S} が互いに独立であることと, ウィンシャート分布の性質から, \mathbf{S} を与えた下での v_1 の条件付き分布は,

$$v_1 | \mathbf{S} \sim \chi^2(k; \delta_d), \quad (\text{A.14})$$

となる。ただし, $\delta_d = \lambda_d/t_2$ である。

ここからさらに, t_2, t_3, λ_d の式変形を行いそれらの分布形を調べる。まず,

$$\mathbf{z}_{d+1} = \Sigma_*^{-1/2} \mathbf{x}_{d+1}, \quad \mathbf{Z}_d = \Sigma_*^{-1/2} \mathbf{X}_d, \quad \mathbf{Z}_* = \Sigma_*^{-1/2} \mathbf{X}_*,$$

とおく。また, p 次直交行列 \mathbf{H} を,

$$\mathbf{H} = (\mathbf{H}_d, \bar{\mathbf{H}}_d), \quad \mathbf{H}_d = \mathbf{Z}_d(\mathbf{Z}'_d \mathbf{Z}_d)^{-1/2},$$

とする。ただし, \mathbf{H}_d : $p \times d$ 行列, $\bar{\mathbf{H}}_d$: $p \times (p-d)$ 行列である。さらに, $\mathbf{U} = (n-k)\mathbf{H}'\Sigma_*^{-1/2}\mathbf{S}\Sigma_*^{-1/2}\mathbf{H}$ とおくと, ウィンシャート分布の性質から, $\mathbf{U} \sim W_p(n-k, \mathbf{I}_p)$ である。このとき, t_2, t_3, λ_d はそれぞれ,

$$t_2 = (n-k)^2 \mathbf{z}'_{d+1} \mathbf{H}(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \mathbf{G} \mathbf{U}^{-1})^2 \mathbf{H}' \mathbf{z}_{d+1}, \quad (\text{A.15})$$

$$t_3 = (n-k) \mathbf{z}'_{d+1} \mathbf{H}(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \mathbf{G} \mathbf{U}^{-1}) \mathbf{H}' \mathbf{z}_{d+1}, \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \lambda_d &= (n-k)^2 \mathbf{z}'_{d+1} \mathbf{H}(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \mathbf{G} \mathbf{U}^{-1}) \mathbf{Z}_* \Theta'_* \mathbf{A}' \\ &\quad \cdot \mathbf{A} \Theta_* \mathbf{Z}'_*(\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \mathbf{G} \mathbf{U}^{-1}) \mathbf{H}' \mathbf{z}_{d+1}, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

と表せる。ただし, $\mathbf{G} = \mathbf{H}' \mathbf{H}_d (\mathbf{H}'_d \mathbf{H} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{H}' \mathbf{H}_d)^{-1} \mathbf{H}'_d \mathbf{H}$ である。ここで, \mathbf{U} を以下のように分割する。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{U}_{21} & \mathbf{U}_{22} \end{pmatrix}.$$

ただし, \mathbf{U}_{11} は $d \times d$ 行列, \mathbf{U}_{22} は $(p-d) \times (p-d)$ 行列である。すると, 補助定理 1 を用いることで,

$$\mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \mathbf{G} \mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{d,d} & \mathbf{O}_{d,p-d} \\ \mathbf{O}_{p-d,d} & \mathbf{U}_{22}^{-1} \end{pmatrix},$$

となることから, (A.15), (A.16), (A.17) 式はそれぞれ,

$$t_2 = (n-k)^2 \mathbf{z}'_{d+1} \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-2} \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}, \quad (\text{A.18})$$

$$t_3 = (n-k) \mathbf{z}'_{d+1} \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}, \quad (\text{A.19})$$

$$\lambda_d = (n-k)^2 \mathbf{z}'_{d+1} \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{Z}_* \Theta'_* \mathbf{A}' \mathbf{A} \Theta_* \mathbf{Z}'_* \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}, \quad (\text{A.20})$$

と書くことができる。ここで, $(p-d)$ 次直交行列 \mathbf{Q} を,

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_d, \bar{\mathbf{Q}}_d), \quad \mathbf{q}_d = \|\bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}\|^{-1} \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1},$$

とする。ただし、 \mathbf{q}_d は $(p-d)$ 次元ベクトル、 $\bar{\mathbf{Q}}_d$ は $(p-d) \times (p-d-1)$ 行列である。すると、 \mathbf{U}_{22} はウィシャート分布の性質から、 $\mathbf{U}_{22} \sim W_{p-d}(n-k, \mathbf{I}_{p-d})$ であるので、 $\mathbf{W} = \mathbf{Q}'\mathbf{U}_{22}\mathbf{Q}$ とおくと、 $\mathbf{W} \sim W_{p-d}(n-k, \mathbf{I}_{p-d})$ である。ここで、 \mathbf{W} を以下のように分割する。

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_{11} & \mathbf{w}'_{21} \\ \mathbf{w}_{21} & \mathbf{W}_{22} \end{pmatrix}.$$

ただし、 w_{11} はスカラー、 \mathbf{W}_{22} は $(p-d-1) \times (p-d-1)$ 行列である。このとき、補助定理 1 を用いることで、(A.18), (A.19), (A.20) 式はそれぞれ、

$$t_2 = (n-k)^2 \|\bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}\|^2 w_{11.2}^{-2} (1 + \mathbf{w}'_{21} \mathbf{W}_{22}^{-2} \mathbf{w}_{21}), \quad (\text{A.21})$$

$$t_3 = (n-k) \|\bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}\|^2 w_{11.2}^{-1}, \quad (\text{A.22})$$

$$\lambda_d = (n-k)^2 \|\bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{z}_{d+1}\|^2 w_{11.2}^{-2} (1, -\mathbf{w}'_{21} \mathbf{W}_{22}^{-1}) \Gamma_d \Gamma'_d (1, -\mathbf{w}'_{21} \mathbf{W}_{22}^{-1})', \quad (\text{A.23})$$

となる。ただし、 $w_{11.2} = w_{11} - \mathbf{w}'_{21} \mathbf{W}_{22}^{-1} \mathbf{w}_{21}$ 、 $\Gamma_d = \mathbf{Q}' \bar{\mathbf{H}}'_d \mathbf{Z}_* \Theta_*' \mathbf{A}'$ である。ここで、 $v_2 = w_{11.2}$ 、 $\mathbf{u} = \mathbf{W}_{22}^{-1/2} \mathbf{w}_{21}$ とおくと、補助定理 2 から、

$$v_2 \sim \chi^2(n-p-k+d+1), \quad (\text{A.24})$$

$$\mathbf{W}_{22} \sim W_{p-d-1}(n-k, \mathbf{I}_{p-d-1}),$$

$$\mathbf{u} \sim N_{p-d-1}(\mathbf{0}_{p-d-1}, \mathbf{I}_{p-d-1}),$$

が成り立ち、 v_2 、 \mathbf{W}_{22} 、 \mathbf{u} は互いに独立である。さらに、補助定理 3 から、

$$\mathbf{u}_3 \sim N_{p-d-1}(\mathbf{0}_{p-d-1}, \mathbf{I}_{p-d-1}), \quad v_4 \sim \chi^2(n-p-k+d+2),$$

で互いに独立な確率変数 \mathbf{u}_3 、 v_4 を用いて、

$$\mathbf{W}_{22}^{-1/2} \mathbf{u} = \frac{\mathbf{u}_3}{\sqrt{v_4}}, \quad (\text{A.25})$$

と書くことができる。以上より、(A.21), (A.22), (A.23) 式を用いて、 t_2/t_3 と δ_d はそれぞれ、

$$\frac{t_2}{t_3} = (n-k) \frac{1}{v_2} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4} \right),$$

$$\delta_d = \frac{(\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}'_3) \Gamma_d \Gamma'_d (\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}'_3)'}{v_4 + \mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3},$$

となる。したがって、(A.14), (A.24), (A.25) 式で与えられる v_1 、 v_2 、 \mathbf{u}_3 、 v_4 を用いて (A.13) 式は、

$$\mathcal{D}(d+1, d) = -(n-k) \frac{v_1}{v_2} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4} \right),$$

と表せる. □

A.5. 系 1 の証明

定理 1 の証明を利用する. (A.3) 式は,

$$\mathcal{D}(d, p) = \text{tr}\{\mathbf{V}_1(\mathbf{T}_2^{1/2})' \mathbf{C}_{22 \cdot 1}^{-1} \mathbf{T}_2^{1/2}\},$$

と表される. ただし, \mathbf{V}_1 , \mathbf{T}_2 , $\mathbf{C}_{22 \cdot 1}$ はそれぞれ (A.2), (A.6), (A.7) 式で表される. また, $\text{rank}(\bar{\mathbf{Z}}_d) = p - d$, $\text{rank}(\bar{\mathbf{H}}_d) = p - d$ であるので, $\bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d$ は $(p - d) \times (p - d)$ 正則行列である. ここで, $\mathbf{T}_2^{1/2}$ の 1 つとして, $\mathbf{T}_2^{1/2} = (n - k) \bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1}$ をとることで (A.3) 式は,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(d, p) &= (n - k) \text{tr}\{\mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_d' \bar{\mathbf{Z}}_d (\bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_d' \bar{\mathbf{Z}}_d)^{-1} \bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1}\} \\ &= (n - k) \text{tr}\{\mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_d' \bar{\mathbf{Z}}_d (\bar{\mathbf{H}}_d' \bar{\mathbf{Z}}_d)^{-1} \mathbf{U}_{22} (\bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d)^{-1} \bar{\mathbf{Z}}_d' \bar{\mathbf{H}}_d \mathbf{U}_{22}^{-1}\} \\ &= (n - k) \text{tr}(\mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{22}^{-1}), \end{aligned}$$

と表せる. よって題意が示せた. □

A.6. 系 2 の証明

まずはじめに, $d_* \leq d \leq q - 1$, $q < p$ の場合を示す. 定理 1 における \mathbf{V}_1 , \mathbf{V}_2 , \mathbf{V}_3 , \mathbf{V}_4 は互いに独立であるので, ウィンシャート分布と逆ウィンシャート分布の期待値から, \mathbf{V}_1 と \mathbf{V}_2 を与えた下での $\mathcal{D}(d, q)$ の条件付き期待値は,

$$E[\mathcal{D}(d, q) | \mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2] = \frac{k(n - k)}{n - p - k + d - 1} \text{tr}(\mathbf{I}_{q-d} + \mathbf{V}_3^{1/2} \mathbf{V}_4^{-1} \mathbf{V}_3^{1/2}),$$

と計算できる. したがって, $\mathcal{D}(d, q)$ の期待値は,

$$E[\mathcal{D}(d, q)] = \frac{k(q - d)(n - k)(n - k - 1)}{(n - p - k + d - 1)(n - p - k + q - 1)}, \quad (\text{A.26})$$

となる. また, $q = p$ の場合は, 系 1 の結果を利用することで, (A.26) 式と同じ形であることが簡単にわかる.

次に, $1 \leq d \leq d_* - 1$ の場合を示す. 定理 2 における v_1 , v_2 , \mathbf{u}_3 , v_4 を用いることで, \mathbf{S} を与えた下での $\mathcal{D}(d + 1, d)$ の条件付き期待値は,

$$\begin{aligned} E[\mathcal{D}(d + 1, d) | \mathbf{S}] &= -(n - k)(k + \delta_d) v_2^{-1} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4}\right) \\ &= -k(n - k) v_2^{-1} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4}\right) - \delta_d (n - k) v_2^{-1} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4}\right), \end{aligned}$$

と計算できる. 上式右辺の第 1 項, 第 2 項それぞれの期待値を計算する. まず, 第 1 項の期待値はカイ 2 乗分布, 逆カイ 2 乗分布の期待値から,

$$E \left[-k(n-k)v_2^{-1} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4} \right) \right] = -\frac{k(n-k)(n-k-1)}{(n-p-k+d)(n-p-k+d-1)},$$

と計算できる. 第 2 項の期待値を計算するために $\mathbf{\Gamma}_d$ を, $\mathbf{\Gamma}_d = (\boldsymbol{\gamma}_1, \mathbf{\Gamma}'_2)'$, $\boldsymbol{\gamma}_1: n \times 1$, $\mathbf{\Gamma}_2: (p-d-1) \times n$ と分割する. このとき,

$$\begin{aligned} & E \left[-\delta_d(n-k)v_2^{-1} \left(1 + \frac{\mathbf{u}'_3 \mathbf{u}_3}{v_4} \right) \right] \\ &= -(n-k)E[v_2^{-1}]E \left[\frac{(\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}'_3)\mathbf{\Gamma}_d\mathbf{\Gamma}'_d(\sqrt{v_4}, -\mathbf{u}'_3)'}{v_4} \right] \\ &= -\left(\frac{n-k}{n-p-k+d-1} \right) \left\{ \boldsymbol{\gamma}'_1 \boldsymbol{\gamma}_1 + \frac{1}{n-p-k+d} \text{tr}(\mathbf{\Gamma}_2\mathbf{\Gamma}'_2) \right\} \\ &= -\left(\frac{n-k}{n-p-k+d-1} \right) \text{tr}(\mathbf{\Gamma}_d\mathbf{\Gamma}'_d\mathbf{M}), \end{aligned}$$

と計算できる. ただし, \mathbf{M} は定数行列で,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}'_{p-d-1} \\ \mathbf{0}_{p-d-1} & (n-p-k+d)^{-1}\mathbf{I}_{p-d-1} \end{pmatrix},$$

として与えられる. したがって, $\mathcal{D}(d+1, d)$ の期待値は,

$$E[\mathcal{D}(d+1, d)] = -\left(\frac{n-k}{n-p-k+d-1} \right) \left\{ \frac{k(n-k-1)}{n-p-k+d} + \text{tr}(\mathbf{\Gamma}_d\mathbf{\Gamma}'_d\mathbf{M}) \right\},$$

と計算できる. □

B. 付録

以降, 付録 A で用いられた補助定理を紹介する.

補助定理 1 (例えば, Harville, 1997, Theorem 13.3.8 参照) \mathbf{T} を $m \times m$ 行列, \mathbf{U} を $m \times n$ 行列, \mathbf{V} を $n \times m$ 行列, \mathbf{W} を $n \times n$ 行列とし, \mathbf{T} は正則行列とする. このとき, $n \times n$ 行列 $\mathbf{Q} = \mathbf{W} - \mathbf{V}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{U}$ が正則であるときに限り, $\begin{pmatrix} \mathbf{T} & \mathbf{U} \\ \mathbf{V} & \mathbf{W} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \mathbf{W} & \mathbf{V} \\ \mathbf{U} & \mathbf{T} \end{pmatrix}$ は正則行列

であり,

$$\begin{pmatrix} T & U \\ V & W \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} T^{-1} + T^{-1}UQ^{-1}VT^{-1} & -T^{-1}UQ^{-1} \\ -Q^{-1}VT^{-1} & Q^{-1} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} W & V \\ U & T \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} Q^{-1} & -Q^{-1}VT^{-1} \\ -T^{-1}UQ^{-1} & T^{-1} + T^{-1}UQ^{-1}VT^{-1} \end{pmatrix},$$

が成り立つ.

補助定理 2 (例えば, Fujikoshi *et al.*, 2010, Theorem 2.2.3 参照) $W \sim W_p(n, \Sigma)$ とし, W と Σ は以下のように分割されているとする.

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}.$$

ただし, W_{ij} , Σ_{ij} は $p_i \times p_j$ 行列とする. このとき, もし $\Sigma_{12} = \mathbf{O}_{p_1, p_2}$ ならば, $W_{11 \cdot 2}$, W_{22} , $W_{12}W_{22}^{-1/2}$ は互いに独立に,

$$W_{11 \cdot 2} \sim W_{p_1}(n - p_2, \Sigma_{11}), \quad W_{22} \sim W_{p_2}(n, \Sigma_{22}), \quad W_{12}W_{22}^{-1/2} \sim N_{p, n}(\mathbf{O}_{p, n}, \mathbf{I}_n \otimes \Sigma_{11}),$$

に従う.

補助定理 3 (例えば, Johnson and Kotz, 1972, page 144 参照) $\mathbf{x} \sim N_q(\mathbf{0}_q, \mathbf{I}_q)$, $\mathbf{J} : q \times q$, $\mathbf{J}'\mathbf{J} \sim W_q(n, \mathbf{R}^{-1})$ に従い, \mathbf{x} と \mathbf{J} は互いに独立な確率変数とする. このとき,

$$\mathbf{J}^{-1}\mathbf{x} = \frac{\mathbf{y}}{\sqrt{t}},$$

が成り立つ. ただし, \mathbf{y} と t は互いに独立に, $\mathbf{y} \sim N_q(\mathbf{0}_q, \mathbf{R})$, $t \sim \chi^2(n - q + 1)$ に従う.

参考文献

- [1] Fujikoshi, Y. (2002). Selection of variables for discriminant analysis in a high-dimensional case. *Sankhyā Ser. A*, **64**, 256–267.
- [2] Fujikoshi, Y., Ulyanov, V. V. & Shimizu, R. (2010). *Multivariate Statistics: High-Dimensional and Large-Sample Approximations*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- [3] Harville, D. A. (1997). *Matrix Algebra from a Statistician's Perspective*. Springer-Verlag, New York.

- [4] Johnson, N. L. & Kotz, S. (1972). *Distributions in Statistics: Continuous Multivariate Distributions*. Wiley, New York.
- [5] Kshirsagar, A. M. & Smith, W. B. (1995). *Growth Curves*. Marcel Dekker, New York.
- [6] Potthoff, R. F. & Roy, S. N. (1964). A generalized multivariate analysis of variance model useful especially for growth curve problems. *Biometrika*, **51**, 313–326.
- [7] Satoh, K., Kobayashi, M. & Fujikoshi, Y. (1997). Variable selection for the growth curve model. *J. Multivariate Anal.*, **60**, 277–292.
- [8] Srivastava, M. S. & von Rosen, D. (1999). Growth curve model. In *Multivariate Analysis, Design of Experiments, and Survey Sampling* (ed. S. Ghosh), pp.547–578, Marcel Dekker, New York.