多変量正規母集団における条件付き独立性検定について

松内 直輝（神戸大学大学院理学研究科）
首藤 信通（神戸大学大学院理学研究科）

1　はじめに

本報告においては, 多変量正規母集団における条件付き独立性検定問題を考える. 本報告では, 特に, 多変量正規性を持つ p 次元確率変数ベクトル $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{X}_1', \boldsymbol{X}_2', \boldsymbol{X}_3')'$ に対し, 母集団から得られた標本ベクトルを基にして $\boldsymbol{X}_1$ が与えられた下で, $\boldsymbol{X}_2$ と $\boldsymbol{X}_3$ が条件付き独立であるか否かを仮説検定するための尤度比検定を構成する. ここに, $\boldsymbol{X}_i$ は p_i 次元分割ベクトルである. したがって, $p = p_1 + p_2 + p_3$ である.

本報告に関連する先行研究としては, Lauritzen(1996) が $p_2 = p_3 = 1$ の場合における条件付き独立性仮説検定問題の帰無仮説および対立仮説の別表現を与えている. 他の関連する結果については, 例えば Andersson & Perlman (1993) を参照されたい.

本報告では Lauritzen(1996) が与えた条件付き独立性仮説の表現を一般化し, 得られた検定統計量の帰無分布の漸近的性質を数値的に考察する.

2　帰無仮説および対立仮説の別表現

p 変量正規分布 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ の平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$, 分散共分散行列 Σ について, $\boldsymbol{X}$ の分割と対応する分割

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \\ \boldsymbol{\mu}_3 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & \Sigma_{13} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} & \Sigma_{23} \\ \Sigma_{31} & \Sigma_{32} & \Sigma_{33} \end{pmatrix}$$

を考える. ここで $\boldsymbol{\mu}_i (i = 1, 2, 3)$ はそれぞれ $\boldsymbol{\mu}$ の p_i 次元分割ベクトルであり, Σ_{ij} はそれぞれ, Σ の $p_i \times p_j$ 分割行列である.

本節では条件付き独立性仮説を共分散行列の逆行列の分割に関する仮説として書き換える. はじめに, 必要となる補題を与える.

補題 1. $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{X}_1', \boldsymbol{X}_2', \boldsymbol{X}_3')' \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ とする. このとき, 以下がそれぞれが成り立つ.

(i) $\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}_1 \\ \boldsymbol{X}_2 \end{pmatrix} \sim N_{p_1+p_2}\left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \right)$,

(ii) $\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}_2 \\ \boldsymbol{X}_3 \end{pmatrix} | \boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1 \sim N_{p_2+p_3}\left(\boldsymbol{\mu}_{2,3|1}, \begin{pmatrix} \Sigma^{22} & \Sigma^{23} \\ \Sigma^{32} & \Sigma^{33} \end{pmatrix}^{-1} \right)$.

ただし

$$\boldsymbol{\mu}_{2,3|1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_2 \\ \boldsymbol{\mu}_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Sigma_{21} \\ \Sigma_{31} \end{pmatrix} \Sigma_{11}^{-1} (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1),$$

Σ^{ij} は Σ^{-1} の $p_i \times p_j$ 分割行列である.

定理 1. $\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ とする. このとき

$$\boldsymbol{X}_2 \perp\!\!\!\perp \boldsymbol{X}_3 | (\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1) \Leftrightarrow \Sigma^{23} = O_{23}, \Sigma^{32} = O_{32}$$

が成り立つ. ここに, O_{ij} は $p_i \times p_j$ 零行列である.

証明. $(\Rightarrow)$ 仮定より, $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \boldsymbol{X}_3$ の結合確率密度関数と $\boldsymbol{X}_1$ の周辺確率密度関数の積は

$$f_{\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \boldsymbol{X}_3}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3) f_{\boldsymbol{X}_1}(\boldsymbol{x}_1) = f_{\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) f_{\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_3}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_3)$$

の形式となる. いま $\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ であるから

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \Sigma^{11} & \Sigma^{12} & \Sigma^{13} \\ \Sigma^{21} & \Sigma^{22} & \Sigma^{23} \\ \Sigma^{31} & \Sigma^{32} & \Sigma^{33} \end{pmatrix}$$

とおくと

$$f_{\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_3}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3)\,f_{\boldsymbol{X}_1}(\boldsymbol{x}_1)=(2\pi)^{-\frac{p_1+p_2}{2}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}|\Sigma_{11}|^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}Q\right)$$

とかける. ただし, Q は

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1\\ \boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2\\ \boldsymbol{x}_3-\boldsymbol{\mu}_3\end{pmatrix}'\begin{pmatrix}\Sigma^{11}&\Sigma^{12}&\Sigma^{13}\\ \Sigma^{21}&\Sigma^{22}&\Sigma^{23}\\ \Sigma^{31}&\Sigma^{32}&\Sigma^{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1\\ \boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2\\ \boldsymbol{x}_3-\boldsymbol{\mu}_3\end{pmatrix}+(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1)'\Sigma_{11}^{-1}(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1)$$

である. これが $f_{\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)f_{\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_3}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_3)$ と等しく, 補題1より $\Sigma^{23}=O_{23},\Sigma^{32}=O_{32}$ が導かれる.

($\Leftarrow$) 仮定より

$$\begin{aligned}f_{\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_3|\boldsymbol{X}_1}(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3\mid\boldsymbol{x}_1)=&(2\pi)^{-\frac{p_2+p_3}{2}}\begin{vmatrix}\Sigma^{22}&O_{23}\\ O_{32}&\Sigma^{33}\end{vmatrix}^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}Q_{23}\right)\\ =&(2\pi)^{-\frac{p_2}{2}}|\Sigma^{22}|^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}Q_{2|1}\right)\\ &\times(2\pi)^{-\frac{p_3}{2}}|\Sigma^{33}|^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}Q_{3|1}\right)\end{aligned}$$

が成り立つ. ただし

$$\begin{aligned}Q_{23}&=\left(\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_2\\ \boldsymbol{x}_3\end{pmatrix}-\boldsymbol{\mu}_{2,3|1}\right)'\begin{pmatrix}\Sigma^{22}&O_{23}\\ O_{32}&\Sigma^{33}\end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_2\\ \boldsymbol{x}_3\end{pmatrix}-\boldsymbol{\mu}_{2,3|1}\right),\\ Q_{2|1}&=\left(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_{2|1}\right)'\Sigma^{22}\left(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_{2|1}\right),\\ Q_{3|1}&=\left(\boldsymbol{x}_3-\boldsymbol{\mu}_{3|1}\right)'\Sigma^{33}\left(\boldsymbol{x}_3-\boldsymbol{\mu}_{3|1}\right)\end{aligned}$$

である. □

以後, 具体的に Σ^{-1} の分割行列 $\begin{pmatrix}\Sigma^{22}&\Sigma^{23}\\ \Sigma^{32}&\Sigma^{33}\end{pmatrix}$ を求める.

$$\Sigma=\left(\begin{array}{c|cc}\Sigma_{11}&\Sigma_{12}&\Sigma_{13}\\ \hline \Sigma_{21}&\Sigma_{22}&\Sigma_{23}\\ \Sigma_{31}&\Sigma_{32}&\Sigma_{33}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c}A_{11}&A_{12}\\ \hline A_{21}&A_{22}\end{array}\right)$$

とおくと

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}A_{22\cdot 1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}A_{22\cdot 1}^{-1} \\ -A_{22\cdot 1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & A_{22\cdot 1}^{-1} \end{pmatrix}$$

である. ただし $A_{22\cdot 1} = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ であり, $\Sigma_{ij\cdot 1} = \Sigma_{ij} - \Sigma_{i1}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{1j}$ とおくと

$$\begin{pmatrix} \Sigma^{22} & \Sigma^{23} \\ \Sigma^{32} & \Sigma^{33} \end{pmatrix} = A_{22\cdot 1}^{-1} = \begin{pmatrix} \Sigma_{22\cdot 1} & \Sigma_{23\cdot 1} \\ \Sigma_{32\cdot 1} & \Sigma_{33\cdot 1} \end{pmatrix}^{-1}.$$

さらに, 以下のような変換

$$\begin{pmatrix} \begin{matrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12} \\ \Sigma_{21}^{-1}\Sigma_{11}^{-1} & \Sigma_{22\cdot 1} \end{matrix} & \Sigma_{(12)}^{-1}\Sigma_{(12)3} \\ \Sigma_{3(12)}\Sigma_{(12)}^{-1} & \Sigma_{33\cdot(12)} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} & \Psi_{13} \\ \Psi_{21} & \Psi_{22} & \Psi_{23} \\ \Psi_{31} & \Psi_{32} & \Psi_{33} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 - \Psi_{21}\boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_3 - \Psi_{3(12)}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_1 \\ \boldsymbol{\eta}_2 \\ \boldsymbol{\eta}_3 \end{pmatrix}$$

を考える. ここで

$$\Sigma_{(12)} = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}, \Sigma_{(12)3} = \begin{pmatrix} \Sigma_{13} \\ \Sigma_{23} \end{pmatrix}, \Sigma_{33\cdot(12)} = \Sigma_{33} - \Sigma_{3(12)}\Sigma_{(12)}^{-1}\Sigma_{(12)3}$$

である.

$$\Sigma_{23\cdot 1} = O_{23} \Leftrightarrow \Psi_{23} = O_{23}$$

であるから $\boldsymbol{X}_1$ が与えられた下で, $\boldsymbol{X}_2$ と $\boldsymbol{X}_3$ の条件付き独立性に関する仮説検定問題は

$$H_0 : \Psi_{23} = O_{23} \quad vs. \quad H_1 : \Psi_{23} \neq O_{23}$$

となる.

3 尤度比検定統計量の構成

本節では, 最尤推定量を基にして帰無仮説 H_0 に対する尤度比検定を構成する. まず, 最尤推定量を求めるために必要となる補題を記す.

補題 2. $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a}$ を p 次元ベクトル, X, A を p 次正方行列とすると, 以下がそれぞれ成り立つ.

(i) $\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{a}' \boldsymbol{x} = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{x}' \boldsymbol{a} = \boldsymbol{a},$

(ii) $\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{x}' A \boldsymbol{x} = A' \boldsymbol{x} + A \boldsymbol{x},$

(iii) $\dfrac{\partial}{\partial X} X^{-1} = -X^{-1} \left(\dfrac{\partial}{\partial X} X \right) X^{-1},$

(iv) $\dfrac{\partial}{\partial X} \mathrm{tr} \left(A X^{-1} \right) = - \left(X^{-1} A X^{-1} \right)',$

(v) $\dfrac{\partial}{\partial X} \log |X| = (X^{-1})',$

(vi) $\dfrac{\partial}{\partial X} \boldsymbol{a}' X^{-1} \boldsymbol{b} = (X^{-1})' \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}' (X^{-1})',$

(vii) $\dfrac{\partial}{\partial X} \boldsymbol{a}' X \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}',$

(viii) $\dfrac{\partial}{\partial X} \boldsymbol{a}' X' A X \boldsymbol{b} = A X \boldsymbol{b} \boldsymbol{a}' + A' X \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}'.$

以上の補題を用いて尤度方程式を解く. p 変量正規母集団 $\Pi : N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ から標本ベクトル $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N$ が得られたとすると, 尤度関数は

$$L(\boldsymbol{\eta}, \Psi) = \prod_{j=1}^{N} (2\pi)^{-\frac{p}{2}} |\Psi_{11}|^{-\frac{1}{2}} |\Psi_{22}|^{-\frac{1}{2}} |\Psi_{33}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} A_j \right)$$

となる. ただし

$$\boldsymbol{y}_j = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_{j1} \\ \boldsymbol{y}_{j2} \\ \boldsymbol{y}_{j3} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_1 \\ \boldsymbol{\eta}_2 \\ \boldsymbol{\eta}_3 \end{pmatrix}, \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} & \Psi_{13} \\ \Psi_{21} & \Psi_{22} & \Psi_{23} \\ \Psi_{31} & \Psi_{32} & \Psi_{33} \end{pmatrix},$$

$$
\begin{aligned}
A_j =& (\boldsymbol{y}_{j1} - \boldsymbol{\eta}_1)' \Psi_{11}^{-1} (\boldsymbol{y}_{j1} - \boldsymbol{\eta}_1) \\
&+ (\boldsymbol{y}_{j2} - \Psi_{21}\boldsymbol{y}_{j1} - \boldsymbol{\eta}_2)' \Psi_{22}^{-1} (\boldsymbol{y}_{j2} - \Psi_{21}\boldsymbol{y}_{j1} - \boldsymbol{\eta}_2) \\
&+ (\boldsymbol{y}_{j3} - \Psi_{31}\boldsymbol{y}_{j1} - \Psi_{32}\boldsymbol{y}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)' \Psi_{33}^{-1} (\boldsymbol{y}_{j3} - \Psi_{31}\boldsymbol{y}_{j1} - \Psi_{32}\boldsymbol{y}_2 - \boldsymbol{\eta}_3).
\end{aligned}
$$

補題 2 を利用すると, 最尤推定量は以下のように得られる.

定理 2. $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N$ を $\Pi : N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ から得られた p 次元標本ベクトルとし, $\boldsymbol{y}_j (j = 1, \ldots, N)$ において, $\boldsymbol{y}_{jk}$ を $\boldsymbol{y}_j$ の p_k 次元分割ベクトルとする. このとき, H_1 の下での $\{\boldsymbol{\eta}, \Psi\}$ の最尤推定量は

$$
\hat{\boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{y}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{y}}_2 - \hat{\Psi}_{21}\bar{\boldsymbol{y}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{y}}_3 - \hat{\Psi}_{31}\bar{\boldsymbol{y}}_1 - \hat{\Psi}_{32}\bar{\boldsymbol{y}}_2 \end{pmatrix},
$$

$$
\hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \begin{array}{cc} S_{11} & S_{11}^{-1}S_{12} \\ S_{21}^{-1}S_{11}^{-1} & S_{22\cdot 1} \end{array} & S_{(12)}^{-1}S_{(12)3} \\ S_{3(12)}S_{(12)}^{-1} & S_{33\cdot(12)} \end{pmatrix}
$$

である. また, H_0 の下での $\{\boldsymbol{\eta}, \Psi\}$ の最尤推定量は

$$
\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{y}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{y}}_2 - \tilde{\Psi}_{21}\bar{\boldsymbol{y}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{y}}_3 - \tilde{\Psi}_{31}\bar{\boldsymbol{y}}_1 \end{pmatrix},
$$

$$
\tilde{\Psi} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{11}^{-1}S_{12} & S_{11}^{-1}S_{13} \\ S_{21}S_{11}^{-1} & S_{22\cdot 1} & O_{23} \\ S_{31}S_{11}^{-1} & O_{32} & S_{33\cdot 1} \end{pmatrix}
$$

である. ここで

$$
\bar{\boldsymbol{y}} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{y}_j, S = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \left(\boldsymbol{y}_j - \bar{\boldsymbol{y}}\right)\left(\boldsymbol{y}_j - \bar{\boldsymbol{y}}\right)',
$$

$\bar{\boldsymbol{y}}_i$ は, $\bar{\boldsymbol{y}}$ の p_i 次元分割ベクトル, S_{ij} は S の $p_i \times p_j$ 分割行列であり, $S_{ij\cdot 1} = S_{ij} - S_{i1}S_{11}^{-1}S_{1j}$,

$$S_{(12)} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}, S_{(12)3} = \begin{pmatrix} S_{13} \\ S_{23} \end{pmatrix}, S_{33\cdot(12)} = S_{33} - S_{3(12)}S_{(12)}^{-1}S_{(12)3}.$$

よって尤度比を λ とおくと, 尤度比検定統計量は

$$\begin{aligned} -2\log\lambda &= N\left(\log(\det(S_{33\cdot 1})) - \log(\det(S_{33\cdot(12)}))\right) \\ &= N\left(\log(\det(S_{33\cdot 1})) - \log(\det(S_{33\cdot 1} - S_{32\cdot 1}S_{22\cdot 1}^{-1}S_{23\cdot 1}))\right) \end{aligned}$$

である.

4 数値実験

前節で求めた検定統計量に対し大規模シミュレーションを行い, H_0 の下で尤度比検定統計量の分布収束について数値的考察を与えるだけでなく, 標本サイズや p_i を変化させた場合の尤度比検定統計量の上側 $100\alpha\%$点を求める. ここに, α は有意水準である. p を固定し, 帰無仮説, つまり $\boldsymbol{X}_1$ が与えられた下で, $\boldsymbol{X}_2, \boldsymbol{X}_3$ が条件付き独立である下で疑似的に発生させたデータセットから尤度比検定統計量を求め, 降順で並び替えた時の上側 $100\alpha\%$ 番目の値と, 自由度 p_2p_3 のカイ二乗分布の上側 $100\alpha\%$点の比較を行う. 詳細については当日報告する.

参考文献

[1] Lauritzen, S. L., *Graphical Models*, Oxford Statistical Science Series, 1996.

[2] Andersson, S. A. and Perlman, M. D. (1993). Lattice models for conditional independence in a multivariate normal distribution, *The Annals of Statistics*, **21**, 1318–1358.