

2つのGMANOVAモデルにおける共通の回帰係数の推定について

津熊 久幸 (千葉大・自然科学)

今野 良彦 (千葉大・自然科学)

1 はじめに

本報告では, 次のような共通の回帰係数をもつ 2 つの GMANOVA モデル

$$\begin{matrix} \mathbf{Y}_1 = \mathbf{A}_{11} \Xi \mathbf{A}_{12} + \boldsymbol{\epsilon}_1, & \mathbf{Y}_2 = \mathbf{A}_{21} \Xi \mathbf{A}_{22} + \boldsymbol{\epsilon}_2 \\ N_1 \times p_1 & N_1 \times m \quad m \times q \quad q \times p_1 & N_1 \times p_1 & N_2 \times p_2 & N_2 \times m \quad m \times q \quad q \times p_2 & N_2 \times p_2 \end{matrix} \quad (1)$$

の共通回帰係数の推定問題を考える. ここで, \mathbf{A}_{i1} と \mathbf{A}_{i2} ($i = 1, 2$) はそれぞれ既知のフルランク行列, \mathbf{Y}_i と $\boldsymbol{\epsilon}_i$ はそれぞれ確率行列を表し, Ξ は未知のパラメータ行列である. また, $\boldsymbol{\epsilon}_1$ と $\boldsymbol{\epsilon}_2$ は互いに独立とし, $\boldsymbol{\epsilon}_i$ は平均が零行列, 共分散行列が $\mathbf{I}_{N_i} \otimes \boldsymbol{\Omega}_i$ の正規分布に従う誤差行列とする ($\boldsymbol{\Omega}_i$ は未知の $p_i \times p_i$ 正定値行列). この報告では 2 標本問題を取り上げるが, 単調な欠損パターンを持つ 1 標本の GMANOVA モデルにおける回帰係数の推定問題が k 標本の GMANOVA の共通の回帰係数の推定問題に帰着できることに注意する.

モデル (1) の未知の共通回帰行列 Ξ の推定問題を損失関数

$$\begin{aligned} \tilde{L}(\Xi, \hat{\Xi}) = & \text{tr} \{ \mathbf{A}_{11} (\hat{\Xi} - \Xi) \mathbf{A}_{12} \boldsymbol{\Omega}_1^{-1} \mathbf{A}'_{12} (\hat{\Xi} - \Xi)' \mathbf{A}'_{11} \} \\ & + \text{tr} \{ \tilde{\mathbf{C}} (\hat{\Xi} - \Xi) \mathbf{A}_{22} \boldsymbol{\Omega}_2^{-1} \mathbf{A}'_{22} (\hat{\Xi} - \Xi)' \tilde{\mathbf{C}}' \} \end{aligned} \quad (2)$$

の下で考える. ただし, $\hat{\Xi}$ は Ξ の推定量, $\tilde{\mathbf{C}}$ は $N_2 \times m$ の既知のフルランク行列である.

2 正準形

適当な直交変換を施すことにより, 次のような正準形を得る:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_1 | \mathbf{Z}_1 & \sim N_{m \times q}(\boldsymbol{\Theta} + \mathbf{Z}_1 \boldsymbol{\gamma}_1, \mathbf{I}_m \otimes \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(1)}), & \mathbf{X}_2 | \mathbf{Z}_2 & \sim N_{m \times q}(\mathbf{A} \boldsymbol{\Theta} + \mathbf{Z}_2 \boldsymbol{\gamma}_2, \mathbf{I}_m \otimes \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(2)}), \\ \mathbf{Z}_i & \sim N_{m \times (p_i - q)}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_m \otimes \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{(i)}), & \mathbf{S}_i & \sim W_q(\boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(i)}, n_i), \quad n_i = N_i - m - p_i + q, \\ \hat{\boldsymbol{\gamma}}_i | \mathbf{W}_i & \sim N_{(p_i - q) \times q}(\boldsymbol{\gamma}_i, \mathbf{W}_i^{-1} \otimes \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(i)}), & \mathbf{W}_i & \sim W_{p_i - q}(\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{(i)}, n_i + p_i - q) \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

ただし, $\boldsymbol{\Theta}$, $\boldsymbol{\gamma}_i$, $\boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(i)}$, $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{(i)}$ はそれぞれ未知母数, $(\mathbf{X}_i, \mathbf{Z}_i)$, $(\mathbf{W}_i, \hat{\boldsymbol{\gamma}}_i)$, \mathbf{S}_i はそれぞれ独立, \mathbf{A} は既知の $m \times m$ 正則行列である. 上記正準形の下で, 損失関数 (2) は

$$L(\hat{\boldsymbol{\Theta}}, \boldsymbol{\Theta}) = \text{tr} [(\hat{\boldsymbol{\Theta}} - \boldsymbol{\Theta}) \{ \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(1)} \}^{-1} (\hat{\boldsymbol{\Theta}} - \boldsymbol{\Theta})'] + \text{tr} [\mathbf{C}' \mathbf{C} (\hat{\boldsymbol{\Theta}} - \boldsymbol{\Theta}) \{ \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}^{(2)} \}^{-1} (\hat{\boldsymbol{\Theta}} - \boldsymbol{\Theta})'] \quad (3)$$

となる. さらに, \mathbf{C} は既知の $N_2 \times m$ 定数行列である. リスクを $R(\hat{\boldsymbol{\Theta}}, \boldsymbol{\Theta}) = \mathbb{E}[L(\hat{\boldsymbol{\Theta}}, \boldsymbol{\Theta})]$ で定める. したがって以後では, 上記正準形の下で共通のパラメータ $\boldsymbol{\Theta}$ の推定を損失関数 (3) の下で考えていくことにする.

3 推定量の族

$(\Sigma_{11.2}^{(i)}, \gamma_i)$ が既知のとき, 1 標本問題における Θ の最尤推定量はそれぞれ $\tilde{\Theta}_1, A^{-1}\tilde{\Theta}_2$ である. ただし, $\tilde{\Theta}_i = X_i - Z_i\gamma_i$ ($i = 1, 2$) である. Sugiura and Kubokawa (1988) は, $\tilde{\Theta}_1$ と $A^{-1}\tilde{\Theta}_2$ の共分散 $I_m \otimes \Sigma_{11.2}^{(1)}$ と $(A'A)^{-1} \otimes \Sigma_{11.2}^{(2)}$ を重みとして利用する, $(\Sigma_{11.2}^{(i)}, \gamma_i)$ が未知の場合の Graybill-Deal 型の結合推定量を提案している:

$$\begin{aligned} \text{vec}(\hat{\Theta}^{GD}) &= \{I_m \otimes (S_1/n_1)^{-1} + (A'A) \otimes (S_2/n_2)^{-1}\}^{-1} \\ &\quad \times \{I_m \otimes (S_1/n_1)^{-1} \text{vec}(\hat{\Theta}_1) + (A'A) \otimes (S_2/n_2)^{-1} \text{vec}(A^{-1}\hat{\Theta}_2)\}. \end{aligned} \quad (4)$$

ただし, $\hat{\Theta}_i = X_i - Z_i\hat{\gamma}_i$ ($i = 1, 2$) である. しかし, 結合比に重み $(A'A)^{-1}$ を考慮にいれた結合推定量は Sugiura and Kubokawa (1988) による Graybill-Deal 型の結合推定量以外はリスクの評価が非常に困難なので, 結合比に重み $(A'A)^{-1}$ を考慮にいれない結合推定量を考え, 新たな結合推定量の導出をまずはじめに試みる.

B と F をそれぞれ, $B(S_1 + S_2)B' = I_q$, $BS_2B' = F = \text{diag}(f_1, \dots, f_q)$ ($f_1 \geq \dots \geq f_q$) を満たす非特異行列, 対角行列とする. ここで, 結合推定量の族

$$\hat{\Theta}^{EQ} = \hat{\Theta}_1 B' \Phi(B')^{-1} + A^{-1} \hat{\Theta}_2 B' (I_q - \Phi)(B')^{-1} \quad (5)$$

を考える. ただし, $\Phi \equiv \Phi(F) = \text{diag}(\phi_1, \dots, \phi_q)$, $\hat{\Theta}_i = X_i - Z_i\hat{\gamma}_i$, ($i = 1, 2$) である. この結合推定量は, ある自然な変換に関する共変な推定量である. ここで, α_j と β_j がある F の関数であり, Φ の成分が $\phi_j = \beta_j / (\alpha_j + \beta_j)$, $j = 1, 2, \dots, q$, とできるとき, 結合推定量 (5) は

$$\begin{aligned} \text{vec}(\hat{\Theta}^{EQ}) &= \{I_m \otimes (B' \text{diag}(\beta_j) B) + I_m \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B)\}^{-1} \\ &\quad \times \{I_m \otimes (B' \text{diag}(\beta_j) B) \text{vec}(\hat{\Theta}_1) \\ &\quad + I_m \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B) \text{vec}(A^{-1}\hat{\Theta}_2)\}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{diag}(\alpha_j) &= \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_q), \\ \text{diag}(\beta_j) &= \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_q). \end{aligned}$$

と書けることに注意する.

推定量 (6) のリスクを評価することにより α_j と β_j を具体的に求めたあと, 既知の結合比の重み $(A'A)^{-1}$ で推定量 $\hat{\Theta}^{EQ}$ を修正することで推定量 (4) の代替推定量として

$$\begin{aligned} \text{vec}(\hat{\Theta}^{EQ'}) &= \{I_m \otimes (B' \text{diag}(\beta_j) B) + (A'A) \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B)\}^{-1} \\ &\quad \times \{I_m \otimes (B' \text{diag}(\beta_j) B) \text{vec}(\hat{\Theta}_1) \\ &\quad + (A'A) \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B) \text{vec}(A^{-1}\hat{\Theta}_2)\} \end{aligned}$$

なるものを与えることを目指す. 上記推定量の族において, $\alpha_j = n_2/f_j$, $\beta_j = n_1/(1 - f_j)$ とおけば, 推定量 (4) を得ることに注意する. また, それ以外の具体的な α_j と β_j の構成は次の節で行う.

4 Stein 型結合推定量

族 (5) における Φ をうまく定めることにより, リスクの小さい推定量を求めることをめざす. この導出の手順は以下の通りである.

1. Stein's identity や Haff's identity などの部分積分法や, Loh (1991) による固有値に関する演算結果を用いて, (5) のリスクの不偏推定量を求める
2. このリスクの不偏推定量を評価することにより Φ の候補を導く
3. この Φ の候補を使って, その各成分を $\phi_j = \beta_j / (\alpha_j + \beta_j)$, $j = 1, 2, \dots, q$, と分解し, 推定量 (6) 内の $I_m \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B)$ を $(A' A) \otimes (B' \text{diag}(\alpha_j) B)$ に置き換えて, 新たな結合推定量を構成する

ここで, 導出された Φ は以下の通りである:

$$\Phi^{ST} = \text{diag}(\phi_1^{ST}, \dots, \phi_q^{ST}), \quad \phi_j^{ST} = \frac{\beta_j^{ST}}{\beta_j^{ST} + \alpha_j^{ST}},$$

$$f_j \times \alpha_j^{ST} = (n_2 - q - 1)h_{2j} + (r_1 - r_2)f_j + 4h_{2j}(1 - f_j) + 2h_{2j} \sum_{k \neq j} \frac{f_j(1 - f_k)}{f_j - f_k},$$

$$(1 - f_j) \times \beta_j^{ST} = (n_1 - q - 1)h_{1j} + (r_2 - r_1)(1 - f_j) + 4h_{1j}f_j - 2h_{1j} \sum_{k \neq j} \frac{(1 - f_j)f_k}{f_j - f_k},$$

$$h_{1j} = m\tilde{r}_1(1 - f_j)/n_1 + \tilde{r}_2(\text{tr}(\mathbf{A}')^{-1}\mathbf{A}^{-1})f_j/n_2,$$

$$h_{2j} = \tilde{r}_1(\text{tr} \mathbf{C}'\mathbf{C})(1 - f_j)/n_1 + \tilde{r}_2(\text{tr}(\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1})'(\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}))f_j/n_2,$$

$$\tilde{r}_i = \frac{n_i + p_i - q - 1}{n_i - 1} = \frac{N_i - m - 1}{N_i - m - p_i + q - 1} \quad (i = 1, 2),$$

$$r_1 = m\tilde{r}_1, \quad r_2 = \tilde{r}_2 \text{tr}(\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1})'(\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}).$$

したがって, 新たな推定量の候補は次のようになる:

$$\begin{aligned} \text{vec}(\hat{\Theta}^{ST}) &= [\mathbf{I}_m \otimes (\mathbf{B}' \text{diag}(\beta_j^{ST})\mathbf{B}) + (\mathbf{A}'\mathbf{A}) \otimes (\mathbf{B}' \text{diag}(\alpha_j^{ST})\mathbf{B})]^{-1} \\ &\quad \times \{[\mathbf{I}_m \otimes (\mathbf{B}' \text{diag}(\beta_j^{ST})\mathbf{B})]\text{vec}(\hat{\Theta}_1) \\ &\quad + [(\mathbf{A}'\mathbf{A}) \otimes (\mathbf{B}' \text{diag}(\alpha_j^{ST})\mathbf{B})]\text{vec}(\mathbf{A}^{-1}\hat{\Theta}_2)\}. \end{aligned}$$

5 数値実験

$\Sigma_{11.2}^{(1)}$ と $\Sigma_{11.2}^{(2)}$ がともに既知である場合の結合推定量

$$\begin{aligned} \text{vec}(\tilde{\Theta}^{ML}) &= [\mathbf{I}_m \otimes (\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1} + \mathbf{A}'\mathbf{A} \otimes (\Sigma_{11.2}^{(2)})^{-1}]^{-1} \\ &\quad \times \{[\mathbf{I}_m \otimes (\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}]\text{vec}(\tilde{\Theta}_1) + [\mathbf{A}'\mathbf{A} \otimes (\Sigma_{11.2}^{(2)})^{-1}]\text{vec}(\mathbf{A}^{-1}\tilde{\Theta}_2)\} \end{aligned}$$

のリスクを解析的に求めた. この推定量のリスクの値は, 最良の推定量のリスクの下限とみなすことができると思われる.

数値実験は, データの欠測状況を考慮しつつ, いくつかの設定の下で実験した. 各設定は表に与えてある通りである. また表内の「改良率」とは, 推定量 $\hat{\Theta}^{GD}$ に対する推定量 $\hat{\Theta}^{ST}$ のリスクの改良の割合である. 数値実験の結果をまとめると, 次のようになる:

1. $\Sigma_{11.2}^{(2)}(\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}$ の各固有値が近い値をとる場合は, 改良率は大きくなる傾向がある. 今回の実験設定では, 最大で約 16% の改良が見込めることがわかった.
2. 逆に, $\Sigma_{11.2}^{(2)}(\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}$ の各固有値が散らばっている場合には, 改良率は小さくなる.
3. 損失関数内の重み $C'C$ が単位行列のとき, 改良率が大きくなる (表 2).

推定量の導出のあらずじ, 実験結果の詳細は, 発表当日に報告する.

参考文献

- [1] Graybill, F.A. and Deal, R.B. (1959). Combined unbiased estimator. *Biometrics* **15**, 543–550.
- [2] Lin, S.P. and Perlman, M.D. (1985). A Monte Carlo comparisons of four estimators for a covariance matrix. In *Multivariate Analysis VI* (P.K. Krishnaiah, ed.) 411–429.
- [3] Loh, W.L. (1991). Estimating the common mean of two multivariate normal distributions. *Ann. Statist.* **19**, 297–313.
- [4] Sugiura, N. and Kubokawa, T. (1988). Estimating common parameters of growth curve models. *Ann. Inst. Statist. Math.* **40**, 119–135.
- [5] Tsukuma, H. and Konno, Y. (2002). Alternative estimators of the common regression matrix in two GMANOVA models under weighted quadratic losses. Technical Reports of Mathematical Sciences, Chiba University, Vol.18, No. 12. (<http://www.math.s.chiba-u.ac.jp/report/content.html>)

表 1. リスクの推定値

$$(N_1, N_2, p_1, p_2, m, q) = (12, 12, 7, 6, 2, 5)$$

$$\Xi = 0, \quad \gamma_i = 0, \quad \Sigma_{22}^{(i)} = I_{p_i - q}$$

$$A'A = \text{diag}(1, 1), \quad C'C = \text{diag}(1, 1)$$

$\Sigma_{11.2}^{(2)}(\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}$	KW	GD	ST	改良率
diag (1, 1, 1, 1, 1)	10	17.767 (0.093)	15.175 (0.078)	14.6 %
diag (10, 1, 1, 1, 1)	10	17.774 (0.095)	16.082 (0.084)	9.5 %
diag (10, 10, 10, 1, 1)	10	18.320 (0.104)	16.584 (0.090)	9.5 %
diag (100, 1, 1, 1, 1)	10	17.840 (0.097)	16.344 (0.088)	8.4 %
diag (100, 100, 10, 1, 1)	10	18.129 (0.108)	16.687 (0.094)	7.9 %
diag (10 ⁴ , 10 ⁴ , 10 ² , 1, 1)	10	17.853 (0.106)	16.520 (0.094)	7.5 %
diag (10 ⁴ , 10 ³ , 10 ² , 10, 1)	10	17.950 (0.119)	15.993 (0.094)	10.9 %
diag (10 ⁸ , 1, 1, 1, 1)	10	17.797 (0.095)	16.288 (0.086)	8.5 %
diag (10 ⁸ , 10 ⁶ , 10 ⁴ , 10 ² , 1)	10	16.992 (0.120)	15.508 (0.096)	8.7 %

表 2. リスクの推定値

$$(N_1, N_2, p_1, p_2, m, q) = (12, 12, 7, 6, 2, 5)$$

$$\Xi = 0, \quad \gamma_i = 0, \quad \Sigma_{22}^{(i)} = I_{p_i - q}$$

$$A'A = \text{diag}(1/3, 3), \quad C'C = \text{diag}(1, 1)$$

$\Sigma_{11.2}^{(2)}(\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}$	KW	GD	ST	改良率
diag (1, 1, 1, 1, 1)	10.000	18.493 (0.111)	15.557 (0.091)	15.9 %
diag (10, 1, 1, 1, 1)	9.911	18.359 (0.112)	15.791 (0.089)	14.0 %
diag (10, 10, 10, 1, 1)	9.732	18.183 (0.118)	15.441 (0.089)	15.1 %
diag (100, 1, 1, 1, 1)	9.987	18.559 (0.117)	16.159 (0.097)	12.9 %
diag (100, 100, 10, 1, 1)	9.885	18.224 (0.121)	15.600 (0.092)	14.4 %
diag (10 ⁴ , 10 ⁴ , 10 ² , 1, 1)	9.987	18.236 (0.121)	15.692 (0.088)	13.9 %
diag (10 ⁴ , 10 ³ , 10 ² , 10, 1)	9.896	17.770 (0.125)	14.938 (0.086)	15.9 %
diag (10 ⁸ , 1, 1, 1, 1)	10.000	18.511 (0.114)	16.064 (0.091)	13.2 %
diag (10 ⁸ , 10 ⁶ , 10 ⁴ , 10 ² , 1)	9.987	17.095 (0.127)	14.729 (0.089)	13.8 %

表 3. リスクの推定値

$$(N_1, N_2, p_1, p_2, m, q) = (12, 12, 7, 6, 2, 5)$$

$$\Xi = 0, \quad \gamma_i = 0, \quad \Sigma_{22}^{(i)} = I_{p_i - q}$$

$$A'A = \text{diag}(1/3, 3), \quad C'C = \text{diag}(1/3, 3)$$

$\Sigma_{11.2}^{(2)}(\Sigma_{11.2}^{(1)})^{-1}$	KW	GD	ST	改良率
diag (1, 1, 1, 1, 1)	10	18.651 (0.105)	16.880 (0.095)	9.5 %
diag (10, 1, 1, 1, 1)	10	18.437 (0.104)	17.524 (0.099)	4.9 %
diag (10, 10, 10, 1, 1)	10	18.400 (0.109)	17.458 (0.102)	5.1 %
diag (100, 1, 1, 1, 1)	10	18.402 (0.105)	17.711 (0.102)	3.8 %
diag (100, 100, 10, 1, 1)	10	18.206 (0.112)	17.413 (0.106)	4.4 %
diag (10^4 , 10^4 , 10^2 , 1, 1)	10	18.000 (0.109)	17.262 (0.103)	4.1 %
diag (10^4 , 10^3 , 10^2 , 10, 1)	10	17.819 (0.117)	16.383 (0.100)	8.1 %
diag (10^8 , 1, 1, 1, 1)	10	18.312 (0.103)	17.598 (0.099)	3.9 %
diag (10^8 , 10^6 , 10^4 , 10^2 , 1)	10	16.990 (0.117)	15.934 (0.103)	6.2 %