科研費シンポジウム
「計算機指向の統計手法の理論とその応用」

2002.12.20–21

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 (千葉大学・自然科学)

今野 良彦 (千葉大学・自然科学)

内容

1. はじめに

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

$\Downarrow \Downarrow$

2 標本の GMANOVA の共通の回帰係数の推定問題

2. モデルと問題

$$\underset{N_1\times p_1}{Y_1} = \underset{N_1\times m}{A_{11}}\ \underset{m\times q}{\Xi}\ \underset{q\times p_1}{A_{12}} + \underset{N_1\times p_1}{\epsilon_1}$$
$$\underset{N_2\times p_2}{Y_2} = \underset{N_2\times m}{A_{21}}\ \underset{m\times q}{\Xi}\ \underset{q\times p_2}{A_{22}} + \underset{N_2\times p_2}{\epsilon_2}$$

- Ξは未知母数
- $N_i > m$, $p_i \geq q\ (i = 1, 2)$
- rank$(A_{i1}) = m$, rank$(A_{i2}) = q\ (i = 1, 2)$
- ϵ_iの各行は，互いに独立に平均零ベクトル，共分散行列Ω_iが未知の正規分布に従う(Ω_i : $p_i \times p_i$) $(i = 1, 2)$

(問題)

$$\widetilde{L}(\widehat{\Xi}, \Xi) = \mathrm{tr}\left\{A_{11}(\widehat{\Xi} - \Xi)A_{12}\Omega_1^{-1}A'_{12}(\widehat{\Xi} - \Xi)'A'_{11}\right\}$$
$$+\mathrm{tr}\left\{\widetilde{C}(\widehat{\Xi} - \Xi)A_{22}\Omega_2^{-1}A'_{22}(\widehat{\Xi} - \Xi)'\widetilde{C}'\right\}$$

の下で共通の回帰係数行列Ξを推定すること．ただし，$\widehat{\Xi}$はΞの推定量，$\widetilde{C}$は$N_2 \times m$既知のフルランク行列

記法

- $\underset{p\times q}{X} = [x_1, \ldots, x_p]' \ \Rightarrow\ \underset{pq\times 1}{\mathrm{vec}(X)} = (x'_1, \ldots, x'_p)'$
- $\underset{p\times q}{X}, \underset{r\times s}{Y} \ \Rightarrow\ \underset{pr\times qs}{X \otimes Y}$: クロネッカー積
- $\underset{p\times q}{X} \sim \mathcal{N}_{p\times q}(M, P \otimes Q)$
  $\Rightarrow\ \mathrm{vec}(X) \sim \mathcal{N}_{pq}(\mathrm{vec}(M), P \otimes Q)$
- $\mathcal{W}_p(\Sigma, m)$: 自由度 m, 平均 $m\Sigma$のウィシャート分布

3. 正準系

ある直行変換を施すことにより次の正準形を得る:

$$\begin{cases} X_1|\ Z_1 \sim \mathcal{N}_{m\times q}(\Theta + Z_1\gamma_1, I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}) \\ X_2|\ Z_2 \sim \mathcal{N}_{m\times q}(A\Theta + Z_2\gamma_2, I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}) \end{cases}$$

$$(i = 1,\ 2) \begin{cases} Z_i \sim \mathcal{N}_{m\times(p_i-q)}(0, I_m \otimes \Sigma_{22}^{(i)}) \\ S_i \sim \mathcal{W}_q(\Sigma_{11\cdot 2}^{(i)}, n_i) \\ \qquad n_i = N_i - m - p_i + q \\ \widehat{\gamma}_i|\ W_i \sim \mathcal{N}_{(p_i-q)\times q}(\gamma_i,\ W_i^{-1} \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(i)}) \\ W_i \sim \mathcal{W}_{p_i-q}(\Sigma_{22}^{(i)}, n_i + p_i - q) \end{cases}$$

- $\underset{m\times q}{\Theta}$, $\underset{m\times(p_i-q)}{\gamma_i}$, $\underset{q\times q}{\Sigma_{11\cdot 2}^{(i)}}$, $\underset{(p_i-q)\times(p_i-q)}{\Sigma_{22}^{(i)}}$: 未知母数
- $(X_i,\ Z_i)$, $(W_i,\ \widehat{\gamma}_i)$, S_iはそれぞれ独立($i = 1, 2$についても独立)
- A は既知の $m \times m$ 正則行列

上記正準形のもとで, 共通の母数Θの推定を損失関数

$$\begin{aligned} L(\widehat{\Theta}, \Theta) = &\operatorname{tr}[(\widehat{\Theta} - \Theta)\{\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}\}^{-1}(\widehat{\Theta} - \Theta)'] \\ &+ \operatorname{tr}[C'C(\widehat{\Theta} - \Theta)\{\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}\}^{-1}(\widehat{\Theta} - \Theta)'] \end{aligned}$$

のもとで考える. ただし, Cは既知の$N_2 \times m$定数行列

さらに, リスクを $\underline{R(\widehat{\Theta}, \Theta) = \mathbb{E}[L(\widehat{\Theta}, \Theta)]}$ で定める

4. 先行研究 (Sugiura & Kubokawa, 1988)

$(\Sigma_{11\cdot 2}^{(i)},\ \gamma_i)$ が既知の場合

1標本問題における Θ の最尤推定量はそれぞれ

$$\widetilde{\Theta}_1, \quad A^{-1}\widetilde{\Theta}_2 \quad (\widetilde{\Theta}_i = X_i - Z_i\gamma_i)$$

$\Downarrow$

結合比に $I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}$ と $(A'A)^{-1} \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}$ を利用する結合推定量 (2標本問題における Θ の最尤推定量)

$$\begin{aligned}\mathrm{vec}\,(\widetilde{\Theta}^{ML}) = &\Big[I_m \otimes \{\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}\}^{-1} + (A'A) \otimes \{\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}\}^{-1}\Big]^{-1} \\ &\times\Big[I_m \otimes \{\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\widetilde{\Theta}_1) \\ &\quad +(A'A) \otimes \{\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(A^{-1}\widetilde{\Theta}_2)\Big]\end{aligned}$$

$\Downarrow$

$(\Sigma_{11\cdot 2}^{(i)},\ \gamma_i)$ が未知の場合

Graybill-Deal 型の結合推定量

$$\begin{aligned}\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}^{GD}) = &\Big[I_m \otimes \{S_1/n_1\}^{-1} + (A'A) \otimes \{S_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1} \\ &\times\Big[I_m \otimes \{S_1/n_1\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}_1) \\ &\quad +(A'A) \otimes \{S_2/n_2\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(A^{-1}\widehat{\Theta}_2)\Big]\end{aligned}$$

を提案. ただし, $\widehat{\Theta}_i = X_i - Z_i\widehat{\gamma}_i$

$\Downarrow$

(目標)

$I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}$ と $(A'A)^{-1} \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}$ の推定量を改良し, $\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}^{GD})$ よりよい推定量を構成

(本報告におけるアイディア)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{X}_1 |\ \boldsymbol{Z}_1 &\sim \mathcal{N}_{m\times q}(\boldsymbol{\Theta} + \boldsymbol{Z}_1\boldsymbol{\gamma}_1, \boldsymbol{I}_m \otimes \boldsymbol{\Sigma}^{(1)}_{11\cdot 2}) \\
\boldsymbol{X}_2 |\ \boldsymbol{Z}_2 &\sim \mathcal{N}_{m\times q}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Theta} + \boldsymbol{Z}_2\boldsymbol{\gamma}_2, \boldsymbol{I}_m \otimes \boldsymbol{\Sigma}^{(2)}_{11\cdot 2}) \\
\boldsymbol{S}_1 &\sim \mathcal{W}_q(\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}_{11\cdot 2}, n_1) \\
\boldsymbol{S}_2 &\sim \mathcal{W}_q(\boldsymbol{\Sigma}^{(2)}_{11\cdot 2}, n_2)
\end{aligned}
$$

$\Sigma^{(1)}_{11\cdot 2}$をS_1とS_2の両方の情報を用いて推定, 同様に$\Sigma^{(2)}_{11\cdot 2}$をS_1とS_2の両方の情報を用いて推定し，それら推定量から結合比を構成することを考える

$\Downarrow$

しかし, 結合比に重み$(A'A)$を考慮にいれたΘの結合推定量はリスクの評価が非常に煩雑

$\Downarrow$

結合比に重み$(A'A)$を考慮しないΘの結合推定量を考え，推定量の候補を導出 ($A'A = I_m$と考える)

$\Downarrow$

得られた結合推定量に形式的に$A'A$を挿入し，最終的な結合推定量を導出

<u>注意</u>: $A'A = I_m$のときのGraybill-Deal型推定量

$$
\begin{aligned}
\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{GD} = &\ \widehat{\boldsymbol{\Theta}}_1\{\boldsymbol{S}_1/n_1\}^{-1}\Big[\{\boldsymbol{S}_1/n_1\}^{-1} + \{\boldsymbol{S}_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1} \\
&+\boldsymbol{A}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_2\{\boldsymbol{S}_2/n_2\}^{-1}\Big[\{\boldsymbol{S}_1/n_1\}^{-1} + \{\boldsymbol{S}_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1}
\end{aligned}
$$

5. 推定量の族

BとFを，$B(S_1+S_2)B' = I_q$，$BS_2B' = F$，$F = \mathrm{diag}\,(f_1,\ldots,f_q)$ $(f_1 \geq \cdots \geq f_q)$を満たす非特異行列，対角行列とする．このとき，推定量の族

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

を考える． ただし，$\Phi \equiv \Phi(F) = \mathrm{diag}\,(\phi_1,\ldots,\phi_q)$，$\widehat{\Theta}_i = X_i - Z_i\widehat{\gamma}_i\,(i=1,2)$

- 特徴: ある自然な変換に関する共変な推定量である
- 'vec'による表現: $\phi_j = \beta_j/(\alpha_j+\beta_j)$とできるとき

$$\begin{aligned}
&\mathrm{vec}\ (\widehat{\Theta}^{EQ})\\
&\quad = \{I_m\otimes(B'\mathrm{diag}(\beta_j)B) + I_m\otimes(B'\mathrm{diag}(\alpha_j)B)\}^{-1}\\
&\qquad \times\{I_m\otimes(B'\mathrm{diag}(\beta_j)B)\ \mathrm{vec}\ (\widehat{\Theta}_1)\\
&\qquad +I_m\otimes(B'\mathrm{diag}(\alpha_j)B)\mathrm{vec}(A^{-1}\widehat{\Theta}_2)\},\\
&\mathrm{diag}\,(\alpha_j) = \mathrm{diag}\,(\alpha_1,\ldots,\alpha_q),\\
&\mathrm{diag}\,(\beta_j) = \mathrm{diag}\,(\beta_1,\ldots,\beta_q).
\end{aligned}$$

ここで，$B'\mathrm{diag}\,(\beta_j)B$ と $B'\mathrm{diag}\,(\alpha_j)B$ はそれぞれ $(\Sigma^{(1)}_{11\cdot2})^{-1}$ と $(\Sigma^{(2)}_{11\cdot2})^{-1}$ の推定量

$\Downarrow\Downarrow$

上記共変推定量の族におけるΦをうまく定め，結合比を$A'A$で修正することにより，リスクの小さい推定量を求めることをめざす

6. Stein型推定量

$\boxed{\text{導出方法}}$

上記推定量の族に対するリスクの不偏推定量を計算

$\Downarrow$

そのリスクの不偏推定量を近似・評価

$\Downarrow$

よりよい Φ の候補を導出

$\Downarrow\Downarrow$

推定量の構成 (Stein型結合推定量 $\cdots$ 予稿集参照)

シミュレーションではIsotonic regressionを用いて,

$$\{\alpha_j^{ST}\}_{j=1}^{q}, \quad \{\beta_j^{ST}\}_{j=1}^{q}$$

をそれぞれ順序付けの修正を施したものを使用

7. 数値実験

上記の方法により導出された推定量とGraybill-Deal型推定量のリスクの大小関係は，理論的に示すことができなかった $\Longrightarrow$ 数値実験で改良されているか調べた

- $(\Sigma_{11\cdot 2}^{(i)}, \gamma_i)$が既知の推定量(MLE)

$$\mathrm{vec}\,(\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}^{ML})$$
$$= \Big[\boldsymbol{I}_m \otimes \{\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{(1)}\}^{-1} + (\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes \{\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{(2)}\}^{-1}\Big]^{-1}$$
$$\times\Big[\boldsymbol{I}_m \otimes \{\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{(1)}\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_1)$$
$$+(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes \{\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}^{(2)}\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\boldsymbol{A}^{-1}\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_2)\Big]$$

- Graybill-Deal型推定量

$$\mathrm{vec}\,(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{GD})$$
$$= \Big[\boldsymbol{I}_m \otimes \{\boldsymbol{S}_1/n_1\}^{-1} + (\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes \{\boldsymbol{S}_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1}$$
$$\times\Big[\boldsymbol{I}_m \otimes \{\boldsymbol{S}_1/n_1\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_1)$$
$$+(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes \{\boldsymbol{S}_2/n_2\}^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\boldsymbol{A}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_2)\Big]$$

- Stein型推定量

$$\mathrm{vec}\,(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{ST})$$
$$= \Big[\boldsymbol{I}_m \otimes (\boldsymbol{B}'\mathrm{diag}\,(\beta_j^{ST})\boldsymbol{B}) + (\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes (\boldsymbol{B}'\mathrm{diag}\,(\alpha_j^{ST})\boldsymbol{B})\Big]^{-1}$$
$$\times\Big[\boldsymbol{I}_m \otimes (\boldsymbol{B}'\mathrm{diag}\,(\beta_j^{ST})\boldsymbol{B})\,\mathrm{vec}\,(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_1)$$
$$+(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}) \otimes (\boldsymbol{B}'\mathrm{diag}\,(\alpha_j^{ST})\boldsymbol{B})\,\mathrm{vec}\,(\boldsymbol{A}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_2)\Big]$$

設定: シミュレーションの回数は10,000回

- $N_1 = N_2 = 12$
- $p_1 = 7,\ p_2 = 6$
- $m = 2,\ q = 5$
- $A'A = I_2,\ C'C = I_2$
- $\Theta = 0_{2\times 5},\ \Sigma_{22}^{(1)} = \Sigma_{22}^{(2)} = I_2,\ \gamma_1 = \gamma_2 = 0_{2\times 5}$
- 改良率: $100 \times (1 - \widehat{R}^{*ST}/\widehat{R}^{*GD})\%$
  $\widehat{R}^{*ST}, \widehat{R}^{*GD}$はそれぞれ数値実験による
  $\widehat{\Theta}^{ST}$と$\widehat{\Theta}^{GD}$のリスクの推定値
- 表内の括弧内: 標準誤差の推定値

表 1. リスクの推定値

$\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}(\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)})^{-1}$	ML	GD	ST	改良率
diag $(1, 1, 1, 1, 1)$	10	17.767 (0.093)	15.175 (0.078)	14.6 %
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 %

8. 結論

GMANOVAモデルにおける2標本問題において，数値実験の結果より

1. $\Sigma^{(2)}_{11\cdot 2}(\Sigma^{(1)}_{11\cdot 2})^{-1}$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，$\Sigma^{(2)}_{11\cdot 2}(\Sigma^{(1)}_{11\cdot 2})^{-1}$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$C'C$が単位行列のとき，改良率が大きい

今後の課題

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において，$\Sigma^{(2)}_{11\cdot 2}(\Sigma^{(1)}_{11\cdot 2})^{-1}$の各固有値はすべて 1 以上

$\Downarrow$

その推定量$\widehat{\Sigma}^{(2)}_{11\cdot 2}(\widehat{\Sigma}^{(1)}_{11\cdot 2})^{-1}$の各固有値も 1 以上となるように修正すべきか？