研究会
「Approximations to the Statistical distributions」
京都大学数理解析研究所

2003 年 3 月 3 日–3 月 5 日

Modifying the Graybill-Deal estimator of the common regression matrix in two growth curve models

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. モデルと問題
2. 正準形
3. 先行研究について
4. 推定量の族
5. Stein 型推定量
6. 数値実験
7. 結論

1. 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
- $N_i > m,\ p_i \geq q\ (i=1,2)$
- $\mathrm{rank}(A_{i1}) = m$, $\mathrm{rank}(A_{i2}) = q\ (i=1,2)$
- 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)

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

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

2. 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 $R(\widehat{\Theta}, \Theta) = \mathbb{E}[L(\widehat{\Theta}, \Theta)]$ で定める

3. 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

$$\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_1, \quad \boldsymbol{A}^{-1}\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_2 \quad (\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_i = \boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{Z}_i\boldsymbol{\gamma}_i)$$

$\Downarrow$

結合比に$\boldsymbol{I}_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}$ と$(\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A})^{-1} \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}$ 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)

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

$\Downarrow$

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

Graybill-Deal型の結合推定量

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

を提案. ただし, $\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_i = \boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{Z}_i\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_i$

$\Downarrow$

(目標)

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

$$
\begin{aligned}
X_1 |\ Z_1 &\sim \mathcal{N}_{m\times q}(\Theta + Z_1\gamma_1, I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}) \\
X_2 |\ Z_2 &\sim \mathcal{N}_{m\times q}(A\Theta + Z_2\gamma_2, I_m \otimes \Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}) \\
S_1 &\sim \mathcal{W}_q(\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}, n_1) \\
S_2 &\sim \mathcal{W}_q(\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}, n_2)
\end{aligned}
$$

$\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)}$をS_1とS_2の両方の情報を用いて推定, 同様に$\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}$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

$$
\begin{aligned}
\widehat{\Theta}^{GD} = &\ \widehat{\Theta}_1\{S_1/n_1\}^{-1}\Big[\{S_1/n_1\}^{-1} + \{S_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1} \\
&+ A^{-1}\widehat{\Theta}_2\{S_2/n_2\}^{-1}\Big[\{S_1/n_1\}^{-1} + \{S_2/n_2\}^{-1}\Big]^{-1}
\end{aligned}
$$

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

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

$$\mathrm{diag}\,(\alpha_j) = \mathrm{diag}\,(\alpha_1,\ldots,\alpha_q),$$

$$\mathrm{diag}\,(\beta_j) = \mathrm{diag}\,(\beta_1,\ldots,\beta_q).$$

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

5. 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

6. 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)

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

- Graybill-Deal型推定量

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

- Stein型推定量

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

設定: シミュレーションの回数は10,000回

- $N_1 = N_2 = 12$
- $p_1 = 7,\ p_2 = 6$
- $m = 2,\ q = 5$
- $A'A = I_2,\ C'C = I_2$
- $\Theta = 0_{2\times5},\ \Sigma_{22}^{(1)} = \Sigma_{22}^{(2)} = I_2,\ \gamma_1 = \gamma_2 = 0_{2\times5}$
- **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

$\Sigma_{11\cdot2}^{(2)}(\Sigma_{11\cdot2}^{(1)})^{-1}$	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. $\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}(\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)})^{-1}$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，$\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}(\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)})^{-1}$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$C'C$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，$\Sigma_{11\cdot 2}^{(2)}(\Sigma_{11\cdot 2}^{(1)})^{-1}$の各固有値はすべて 1 以上

$\Downarrow$

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