2003 年 11 月 22 日

2 標本モデルにおける共通平均の単調回帰による推定法とその妥当性の数値的検討

津熊 久幸（統計数理研究所・PD）

今野 良彦（日本女子大学・理学部）

発表の概要

1. モデルと問題
2. 正準形
3. 先行研究
4. 推定量の族
5. Stein 型結合推定量
6. 数値実験
7. 結論

1. モデルと問題

- GMANOVA モデルにおける 2 標本問題を考える
  - 1 標本の GMANOVA モデルにおいて，データに単調な欠損パターンがある場合の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

モデル

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

- Ξ は未知の回帰係数行列
- $i=1,2$ について $N_i > m$, $p_i \geq q$
  A_{i1}, A_{i2} は既知でフルランク．$\underline{A'_{i1}A_{i1}\text{は対角行列}}$
- 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 : $p_i \times p_i$) $(i=1,2)$

$$\widetilde{L}(\widehat{\Xi}, \Xi) = \mathrm{tr}\,\{A'_{11}A_{11}(\widehat{\Xi} - \Xi)A_{12}\Omega_1^{-1}A'_{12}(\widehat{\Xi} - \Xi)'\}$$
$$+\mathrm{tr}\,\{A'_{21}A_{21}(\widehat{\Xi} - \Xi)A_{22}\Omega_2^{-1}A'_{22}(\widehat{\Xi} - \Xi)'\}$$

の下で <u>共通の回帰係数行列 Ξ の推定</u> ($\widehat{\Xi}$はΞの推定量)

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
- $\underset{p\times q}{X}, \underset{p\times q}{M}, \underset{p\times p}{P}, \underset{q\times q}{Q}$ のとき

$$\underset{p\times q}{X} \sim \mathcal{N}_{p\times q}(M, P\otimes Q)$$
$$\Rightarrow\; \mathrm{vec}(X) \sim \mathcal{N}_{pq}(\mathrm{vec}(M), P\otimes Q)$$

- $\mathcal{W}_p(\Sigma, m)$: 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:

$$\begin{cases} X_1 \mid Z_1 \sim \mathcal{N}_{m\times q}(\Theta + Z_1\gamma_1, I_m \otimes \Sigma_1) \\ X_2 \mid Z_2 \sim \mathcal{N}_{m\times q}(A\Theta + Z_2\gamma_2, I_m \otimes \Sigma_2) \end{cases}$$

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

- $\underset{m\times q}{\Theta}$, $\underset{m\times(p_i-q)}{\gamma_i}$, $\underset{q\times q}{\Sigma_i}$, $\underset{(p_i-q)\times(p_i-q)}{\Lambda_i}$: 未知母数
- $(X_i,\ Z_i)$, $(W_i,\ \widehat{\gamma}_i)$, S_i はそれぞれ独立
  $\longrightarrow$ $i = 1, 2$ についても独立
- A は既知の $m \times m$ 対角行列

上記正準形のもとで，共通の母数 Θ の推定を損失関数

$$\begin{aligned} L(\widehat{\Theta}, \Theta) = &\ \mathrm{tr}\,[(\widehat{\Theta} - \Theta)\Sigma_1^{-1}(\widehat{\Theta} - \Theta)'] \\ &+ \mathrm{tr}\,[A^2(\widehat{\Theta} - \Theta)\Sigma_2^{-1}(\widehat{\Theta} - \Theta)'] \end{aligned}$$

のもとで考える

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

3. 先行研究 (Sugiura & Kubokawa, 1988)

結合比に $I_m \otimes \Sigma_1$ と $A^{-2} \otimes \Sigma_2$ の推定量

$$I_m \otimes (S_1/n_1), \qquad A^{-2} \otimes (S_2/n_2)$$

を利用するGraybill-Deal型の結合推定量(2標本問題におけるΘの最尤推定量)を提案：

$$\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}^{GD}) = \{I_m \otimes (S_1/n_1)^{-1} + A^2 \otimes (S_2/n_2)^{-1}\}^{-1} \times\{I_m \otimes (S_1/n_1)^{-1}\,\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}_1) + A^2 \otimes (S_2/n_2)^{-1}\,\mathrm{vec}\,(A^{-1}\widehat{\Theta}_2)\}$$

ただし, $\widehat{\Theta}_i = X_i - Z_i\widehat{\gamma}_i \,(i = 1,\, 2)$

$\Downarrow\Downarrow$

(本報告の目標)

結合比の, $I_m \otimes \Sigma_1$ と $A^{-2} \otimes \Sigma_2$ の推定量を改良し, $\mathrm{vec}\,(\widehat{\Theta}^{GD})$ よりよい推定量を構成

$\Downarrow\Downarrow$

(改良の方法)

Σ_1 を S_1 と S_2 の両方を用いて推定, 同様に Σ_2 を S_1 と S_2 の両方を用いて推定

$\downarrow$

得られた推定量とGraybill-Deal型結合推定量の $(S_1/n_1)^{-1}$, $(S_2/n_2)^{-1}$ を置き換え, 新たな推定量を構成

4. 推定量の族

- Bは非特異行列，Fは対角行列で，$B(S_1+S_2)B' = I_q$，$BS_2B' = F$，$F = \mathrm{diag}\,(f_1, \ldots, f_q)$ $(f_1 \geq \cdots \geq f_q)$を満たす

- $\mathrm{diag}\,(\alpha_j)$と$\mathrm{diag}\,(\beta_j)$は$q \times q$対角行列で，各対角成分$\alpha_j$と$\beta_j$は F の関数で順序関係を満たす:

$$0 < \alpha_1 \leq \cdots \leq \alpha_q, \qquad \beta_1 \geq \cdots \geq \beta_q > 0$$

$\Downarrow\Downarrow$

Graybill-Deal 型結合推定量の $(S_1/n_1)^{-1}$ を$B'\mathrm{diag}\,(\beta_j)B$，$(S_2/n_2)^{-1}$ を $B'\mathrm{diag}\,(\alpha_j)B$ に変更し，推定量を構成：

(推定量の族)

$$\mathrm{vec}(\widehat{\Theta}^{RE}) = \{I_m \otimes (B'\mathrm{diag}\,(\beta_j)B) + A^2 \otimes (B'\mathrm{diag}\,(\alpha_j)B)\}^{-1}$$
$$\times\{I_m \otimes (B'\mathrm{diag}\,(\beta_j)B)\ \mathrm{vec}\ (\widehat{\Theta}_1)$$
$$+A^2 \otimes (B'\mathrm{diag}\,(\alpha_j)B)\mathrm{vec}(A^{-1}\widehat{\Theta}_2)\}$$

特徴
- Θの不偏推定量である

- ある自然な変換に関する共変推定量を含む

- α_j と β_j を$\alpha_j^{GD} = n_2/f_j$, $\beta_j^{GD} = n_1/(1-f_j)$ とすると Graybill-Deal 型結合推定量になる

推定量の族における $\{\alpha_j\}_{j=1}^q$ と $\{\beta_j\}_{j=1}^q$ をうまく定め，リスクの小さい推定量を求めることをめざす

5. Stein 型結合推定量

導出方法の概略

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評価し，$\{\alpha_j\}_{j=1}^q$ と $\{\beta_j\}_{j=1}^q$ の候補を導出

$\downarrow$

$$\alpha_j^{ST} = \Big((n_2 - q - 1) + 4(1 - f_j) + 2\sum_{k \neq j} \frac{f_j(1 - f_k)}{f_j - f_k}\Big)\Big/ f_j$$

$$\beta_j^{ST} = \Big((n_1 - q - 1) + 4f_j - 2\sum_{k \neq j} \frac{(1 - f_j)f_k}{f_j - f_k}\Big)\Big/ (1 - f_j)$$

$\Downarrow$

$\{\alpha_j^{ST}\}_{j=1}^q$ と $\{\beta_j^{ST}\}_{j=1}^q$ は順序関係を満たすとは限らない

$\downarrow$

単調回帰をもちいて順序修正を施す

$$0 < \bar{\alpha}_1^{ST} \leq \cdots \leq \bar{\alpha}_q^{ST} \qquad \bar{\beta}_1^{ST} \geq \cdots \geq \bar{\beta}_q^{ST} > 0$$

$\Downarrow$

新たな結合推定量の構成（Stein 型結合推定量）

Graybill-Deal 型結合推定量との違い

$$\alpha_j^{GD} = n_2/f_j, \qquad \beta_j^{GD} = n_1/(1 - f_j)$$

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

$\boxed{\text{実験の設定}}$

- シミュレーションの回数は10,000回
- Θ, γ_1, γ_2： 零行列，　Λ_1, Λ_2： 単位行列
- Σ_1, Σ_2： $\Sigma_2\Sigma_1^{-1}$ の固有根の散らばりを考慮し, 4 通り
- 推定量
  - Graybill-Deal型結合推定量（ GD ）
  - Stein型結合推定量（ ST ）
- 表の「改良率」： GD のリスクに対する ST のリスクの改良の割合
- 表内の括弧内： 標準誤差の推定値

表 1. リスクの推定値

$\Sigma_2\Sigma_1^{-1}$ の固有根	GD	ST	改良率
$N_1 = N_2 = 12,\ p_1 = p_2 = 7,\ m = 2,\ q = 5$ $A^2 = \mathrm{diag}\,(3,\ 1/3)$			
$(1, 1, 1, 1, 1)$	20.47 (0.120)	16.94 (0.097)	17.3 %
$(10, 0.1, 0.1, 0.1, 0.1)$	20.33 (0.136)	18.41 (0.118)	9.4 %
$(10^{10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10})$	18.00 (0.156)	18.00 (0.156)	0.0 %
$(10^8, 10^4, 1, 10^{-4}, 10^{-8})$	20.32 (0.128)	20.51 (0.130)	-0.9 %
$N_1 = N_2 = 20,\ p_1 = p_2 = 12,\ m = 2,\ q = 10$ $A^2 = \mathrm{diag}\,(3,\ 1/3)$			
$(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$	35.33 (0.135)	26.04 (0.092)	26.3 %
$(10, 0.1, 0.1, 0.1, 0.1,$ $0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 0.1)$	34.85 (0.149)	28.40 (0.105)	18.5 %
$(10^{10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10},$ $10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10})$	27.52 (0.106)	27.52 (0.106)	0.0 %
$(10^5, 10^4, 10^3, 10^2, 10,$ $1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4})$	33.95 (0.128)	33.94 (0.128)	0.0 %

7. 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. $\Sigma_2\Sigma_1^{-1}$ 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26%の改良が見込めることがわかった
2. 逆に，$\Sigma_2\Sigma_1^{-1}$ 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. q が大きくなるにしたがい，改良率が大きくなる

注意 リスクの評価は Kubokawa & Srivastava (2001) の方法で楕円分布のもとまで拡張できる

参考文献

1. Kubokawa, T. & Srivastava, M.S. (2001). J. Multivariate Anal. 76, 138–152.
2. Loh, W.L. (1991). Ann. Statist., 19, 297–313.
3. Lin, S.P. & Perlman, M.D. (1985). In ‘Multivariate Analysis VI’ (P.K. Krishnaiah, ed.) 411-429.
4. Sugiura, N. & Kubokawa, T. (1988). Ann. Inst. Statist. Math., 40, 119–135.