Tests for mean vectors with two-step monotone missing data or unequal covariance matrices
(２-ステップ単調欠測データまたは異なる共分散行列をもつ平均ベクトルの検定)

理学研究科　数理情報科学専攻
瀬尾研究室　川崎　玉恵

多変量統計解析において，平均ベクトルの検定に関する研究は基礎的な問題である．本研究では２つのテーマに焦点を当てて，平均ベクトルの検定について議論を行う．１つめのテーマは１標本問題における平均ベクトルの検定に対し，２-ステップ単調欠測データのもとでのバイアス修正変換統計量について議論する．n_1 個の $p(=p_1+p_2)$ 変量標本ベクトル $\boldsymbol{x}_j^{[1]}=(\boldsymbol{x}_{1j}^{[1]\prime},\boldsymbol{x}_{2j}^{[1]\prime})'$, $j=1,2,\ldots,n_1$ がそれぞれ独立に $N_p(\boldsymbol{\mu},\Sigma)$ に従い，$n_2(=n-n_1)$ 個の p_1 変量標本ベクトル $\boldsymbol{x}_j^{[2]}$, $j=1,2,\ldots,n_2$ がそれぞれ独立に $N_{p_1}(\boldsymbol{\mu}_1,\Sigma_{11})$ に従っているとする．ただし

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\mu}_1\\ \boldsymbol{\mu}_2\end{pmatrix},\quad \Sigma=\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}$$

と分割する．このようなデータセットのことを２-ステップ単調欠測データと呼ぶ (Kanda and Fujikoshi (1998) 等を参照)．１標本問題における平均ベクトルの検定 $H_0:\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$ vs. $H_1:\boldsymbol{\mu}\neq\boldsymbol{\mu}_0$ に対する検定統計量として，次のようなホテリングの T^2 型統計量を用いる．

$$T^2=(\widehat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\begin{pmatrix}(1/n)\widehat{\Sigma}_{11} & (1/n)\widehat{\Sigma}_{12}\\ (1/n)\widehat{\Sigma}_{21} & \widehat{\mathrm{Cov}}[\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2]\end{pmatrix}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu}_0)$$

ただし

$$\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2]=\frac{1}{n_1}\left(\Sigma_{22}-\frac{n_2}{n}\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\right)+\frac{n_2p_1}{nn_1(n_1-p_1-2)}(\Sigma_{22}-\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}),$$

$\boldsymbol{\mu}_0$ は既知ベクトルとし，$\widehat{\boldsymbol{\mu}}$, $\widehat{\Sigma}$ を $\boldsymbol{\mu}$, Σ の最尤推定量とする．このときの最尤推定量は Anderson and Olkin (1985) によって与えられており，T^2 型統計量に対する近似上側パーセント点は，Yu et al. (2006) や Seko et al. (2011, 2012) などで議論されている．また，Chang and Richards (2009) では $n,n_1\to\infty$ かつ $n_1/n\to\infty$ のもとで，T^2 型統計量が自由度 p のカイ２乗分布に漸近的に従うことを示している．本研究では，$n_1,n_2\to\infty$ において $\gamma_i=N_i/N, i=1,2$ が正の定数に収束するもとで，$\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ と $\widehat{\Sigma}$ の展開を摂動法によって与え，その結果を用いて T^2 型統計量，T^2 型統計量の２乗の統計量である T^4 の展開を与えた．ただし，$N=N_1+N_2$, $N_i=n_i-1$ とする．さらに，T^2, T^4 型統計量の展開結果の期待値を与えた．

以上の結果を用いて，バイアスを修正する変換統計量を２つ提案する．１つめは，２-ステップ単調欠測データのもとでのバートレット変換統計量 T_B^2 で，変換後の統計量の平均が極限分布であるカイ２乗分布の平均と $\mathrm{O}(N^{-1})$ まで一致するような変換である．T_B^2 に対しても，次の結果が得られた．

$$\mathrm{E}[T_B^2]=p+\mathrm{O}(N^{-2}),\quad \mathrm{E}[T_B^4]=p(p+2)+\frac{1}{N}\{c_2-2c_1(p+2)\}+\mathrm{O}(N^{-2})$$

ただし，c_1, c_2 は p と n, n_1, n_2 の関数である．２つめの変換統計量は，Fujikoshi (2000) による修正バートレット変換統計量を２-ステップ単調欠測データのもとで考える．Fujikoshi (2000) では完全データのもとで，変換後の統計量の１次，２次モーメントが，極限分布であるカイ２乗分布の１次，２次モーメントとそれぞれ $\mathrm{O}(N^{-1})$ まで一致するような変換を与えている．このような変換統計量 T^2_{MB} を２-ステップ単調欠測データのもとで与え，次のような結果が得られた．

$$\mathrm{E}[T^2_{MB}] = p + \mathrm{O}(N^{-2}),\quad \mathrm{E}[T^4_{MB}] = p(p+2) + \mathrm{O}(N^{-2}) = 2p + \mathrm{O}(N^{-2})$$

数値実験では，１次，２次モーメント，分散，MSE について，漸近展開の結果と共に T^2, T^2_B, T^2_{MB} をモンテカルロ・シミュレーションによって評価した．また，シミュレーションによる T^2 と T^2_B, T^2_{MB} の上側 100α パーセント点を与え，帰無仮説における極限分布である自由度 p のカイ２乗分布で棄却するときの type I error を計算し，近似精度を議論した．

２つめのテーマは，２標本問題における平均ベクトルの検定を母集団の分散共分散行列が等しくない場合で議論する．ここで，データには欠測値のない完全データを仮定する．母集団の分散共分散行列が等しくない場合の平均ベクトルの検定は一般に多変量 Behrens-Fisher 問題と呼ばれており，多くの議論がなされている．たとえば James (1954) は，検定統計量の Cornish-Fisher 展開によるカイ２乗分布を用いた近似解を与え，Yao (1965) は検定統計量の分布について，自由度を調整することによって近似が良くなるような F 分布を与えている．また，Yanagihara and Yuan (2005) では F 近似による自由度を調整した近似解，修正バートレット変換におけるカイ２乗近似解を与えている．本研究では，Yanagihara and Yuan (2005) における近似法をより精密にした結果を与え，さらにそのバイアスを修正した結果も与えた．

$n^{(i)}$ 個の標本ベクトル $\boldsymbol{x}^{(i)}_1, \boldsymbol{x}^{(i)}_2, \ldots, \boldsymbol{x}^{(i)}_{n^{(i)}}$ がそれぞれ独立に $N_p(\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \Sigma^{(i)})$，$i = 1, 2$ に従うとする．このとき，２標本問題における平均ベクトルの検定 $H_0 : \boldsymbol{\mu}^{(1)} = \boldsymbol{\mu}^{(2)}$ vs. $H_1 : \boldsymbol{\mu}^{(1)} \neq \boldsymbol{\mu}^{(2)}$ を，母集団の分散共分散行列が等しくない $\Sigma^{(1)} \neq \Sigma^{(2)}$ の場合で考える．ここで，母集団の分散共分散行列が等しい $\Sigma^{(1)} = \Sigma^{(2)}$ の場合の平均ベクトルの検定は，検定統計量としてホテリングの T^2 統計量がよく知られており，その分布は帰無仮説のもとでは正確に F 分布に従う．母集団の分散共分散行列が等しくない場合の帰無仮説のもとでの正確な分布は，Nel et al. (1990) などによって議論されているが，これらは計算的に扱いにくいものとなっている．本研究ではこの仮説検定問題において，Welch (1938) によって与えられた１変量の統計量を多変量に拡張した，次の検定統計量を用いる．

$$T = (\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})' \left(\frac{S^{(1)}}{n^{(1)}} + \frac{S^{(2)}}{n^{(2)}} \right)^{-1} (\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})$$

ただし，$\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)}$ を第 i 母集団の標本平均ベクトル，$S^{(i)}$ を第 i 母集団の不偏標本分散共分散行列とする．ここで，この T 統計量は

$$\begin{aligned} &n = n^{(1)} + n^{(2)},\quad \boldsymbol{z} = \sqrt{\frac{n^{(1)}n^{(2)}}{n}}\overline{\Sigma}^{-\frac{1}{2}}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}),\ \overline{\Sigma} = \frac{n^{(2)}}{n}\Sigma^{(1)} + \frac{n^{(1)}}{n}\Sigma^{(2)}, \\ &W = \overline{\Sigma}^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{n^{(2)}}{n}S^{(1)} + \frac{n^{(1)}}{n}S^{(2)} \right) \overline{\Sigma}^{-\frac{1}{2}},\ U = \frac{\boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}'W^{-1}\boldsymbol{z}} \end{aligned}$$

を用いて $T = \boldsymbol{z}'W^{-1}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}/U$ と書き表すことができる．さらに U の近似分布を未知パラメータ ν, ϕ を用いて χ^2_ν/ϕ と考えると，$\mathrm{E}[U]$, $\mathrm{E}[U^2]$ の近似値はそれぞれ ν/p, $\nu(\nu+2)/\phi^2$ と表すこと

ができる．よって $\boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}$ は自由度 p のカイ 2 乗分布に正確に従うので，T 統計量を近似的に自由度が異なるカイ 2 乗分布の比で表せると考えれば，$\nu T/(p\phi)$ の近似分布は自由度 p, ν の F 分布とみなすことができる．そこで，U における W^{-1} を摂動展開することで $\mathrm{E}[U]$ と $\mathrm{E}[U^2]$ の展開を N^{-2} の項まで求めることができ，展開結果を次のように与えた．ただし，$N = n-2$ とする．

$$\mathrm{E}[U] = 1 - \frac{\theta_1}{N} + \frac{1}{N^2}(\theta_2 - \theta_3) + \mathrm{O}(N^{-3}),\ \mathrm{E}[U^2] = 1 - \frac{2}{N}(\theta_1 - \theta_4) + \frac{1}{N^2}(2\theta_5 - \theta_6) + \mathrm{O}(N^{-3})$$

ただし，$\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_6$ は $\Sigma^{(i)}$ と $\overline{\Sigma}$ の関数である．よって，$\mathrm{E}[U], \mathrm{E}[U^2]$ の近似値 $\nu/\phi, \nu(\nu+2)/\phi^2$ と上記の展開結果とを連立方程式で解くことにより，ν と ϕ の近似解を与えた．さらに，$\Sigma^{(i)}$ と $\overline{\Sigma}$ は未知であるため，$\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_6$ を計算するには推定量を用いる必要がある．そこで推定量を用いたときに生じるバイアスを修正した，ν と ϕ の近似解も与えた．また，本研究で与えた近似解を用いた F 分布による近似上側 100α パーセント点の精度と先行研究との比較をするため，モンテカルロ・シミュレーションによって type I error による近似精度を議論した．