数理解析研究所講究録 1334 巻 2003 年 37-46

Estimators of error variance obtained by pooling sums of squares for factorial effects in the analysis of experiments using two-level orthogonal arrays

慶應義塾大学大学院　理工学研究科　大野　洋平 (Youhei OONO)
Graduate School of Science and Technology,
Keio University
慶應義塾大学　理工学部　篠崎　信雄 (Nobuo SHINOZAKI)
Faculty of Science and Technology,
Keio University

1　序論

2 水準系直交表を用いた実験を行った場合の誤差分散 σ^2 の推定に関して議論する．要因効果は 1 列ずつ割当てられ，対応する平方和を T_i, $i=1,2,\cdots,p$ とする．また，誤差列は ν 列に割当てられ，対応する平方和を S とする．観測誤差は互いに独立に $N(0,\sigma^2)$ に従うと仮定すると，S, T_i, $i=1,\cdots,p$ は互いに独立であり，

$$\frac{S}{\sigma^2}\sim\chi^2_\nu,$$
$$\frac{T_i}{\sigma^2}\sim\chi^2_1(\lambda_i)$$

である．ここで，λ_i は非心パラメータであり，$\sqrt{\lambda_i}$ は要因効果 i の大きさに比例する．

二乗誤差損失

$$L(\sigma^2,\hat{\sigma^2})=(\hat{\sigma^2}/\sigma^2-1)^2$$

のもとで，S の定数倍のクラスの推定量のなかで最良のものとして，

$$\delta_0=\frac{S}{\nu+2}$$

が知られているが，Stein(1964) は $p=1$ の場合，

$$\delta_1=\min\left(\frac{S}{\nu+2},\frac{S+T_1}{\nu+3}\right)$$

によって δ_0 が改良されることを示した．また，Gelfand and Dey(1988) は予めプールする順番が決まっている場合に Stein の与えた縮小推定量を一般化し，$1\le j\le p$ に対し，

$$\phi_j=\min\left(\frac{S}{\nu+2},\frac{S+T_1}{\nu+3},\frac{S+T_1+T_2}{\nu+4},\cdots,\frac{S+\sum_{i=1}^{j}T_i}{\nu+j+2}\right)$$

なる推定量を与え，

$$\phi_0 \prec \phi_1 \prec \phi_2 \prec \cdots \prec \phi_p$$

であることを証明した．ここで，$a \prec b$ は b が a を改良するという意味である．プールする順番を予め決めない場合に関しては，永田 (1989) が $\nu = 2$，$p = 2$ の場合に，$S/2$ をもとにして構成される検定を用いた推定量

$$d = \begin{cases} \frac{S}{2}, & \text{要因 } 1, 2 \text{ とも有意} \\ \frac{S+T_1}{3}, & \text{要因 } 1 \text{ のみ有意でない} \\ \frac{S+T_2}{3}, & \text{要因 } 2 \text{ のみ有意でない} \\ \frac{S+T_1+T_2}{4}, & \text{要因 } 1, 2 \text{ とも有意でない} \end{cases}$$

と $S/2$ を比較し，3つの有意水準0.05, 0.25, 0.5の中で0.5として構成した推定量が $S/2$ をよく改良することをモンテカルロ・シミュレーションにより示した．

要因 $1, \cdots, p$ を個別に検定し普通の意味でプールする推定量は，推定量として不連続であり，改良するかどうかを議論するのは困難である．しかしながら，それにある程度似た連続な推定量について議論することが，不連続な推定量に関する議論に結びつくと期待する．本論文では $\delta_0 = S/(\nu + 2)$ をもとにプールする連続な推定量

$$\delta_p = \frac{S}{\nu+2} - \frac{1}{\nu+p+2}\sum_{i=1}^{p}\left(\frac{S}{\nu+2} - T_i\right)^+$$

が，δ_0 を二乗誤差損失の下で一様に改良する (ν, p) の範囲を求める．また，改良する推定量に関して偏りと平均二乗誤差 (MSE) の両面からの評価を行う．

2 一様な改良となる必要十分条件

$\sigma^2 = 1$ として一般性を失わない．δ_p と δ_0 の損失関数の差は，

$$\begin{aligned} &\{(\delta_0 - 1)^2 - (\delta_p - 1)^2\}(\nu + p + 2)^2 \\ &= \frac{2(\nu+p+2)}{\nu+2}\sum_{i=1}^{p} S\left(\frac{S}{\nu+2} - T_i\right)^+ - 2(\nu+p+2)\sum_{i=1}^{p}\left(\frac{S}{\nu+2} - T_i\right)^+ \\ &- \left[\sum_{i=1}^{p}\left\{\left(\frac{S}{\nu+2} - T_i\right)^+\right\}^2 + \sum_{\substack{i \neq j \\ 1 \leq i,j \leq p}}\left(\frac{S}{\nu+2} - T_i\right)^+\left(\frac{S}{\nu+2} - T_j\right)^+\right] \end{aligned} \tag{1}$$

である．(1) 式の期待値を取るにあたり，部分積分によって得られる次の Lemma 2.1 を導入する．

LEMMA 2.1 (Stein's Identity) $X \sim \chi_p^2$ で，$f(X)$ は X の絶対連続関数である時，両辺の期待値が存在するならば，$E(Xf(X)) = E\{pf(X) + 2Xf'(X)\}$ が成り立つ．ここで，f' は f の微分である．

S と互いに独立であり，$T_i|K_i \sim \chi^2_{1+2K_i}$，$K_i \sim Po(\lambda_i/2)$ なる確率変数 K_i を導入すると，Lemma 2.1 より，

$$
\begin{aligned}
E\left\{S\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\right\} &= (\nu+2)E\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+ + 2E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}),\\
E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\right\}^2 &= \frac{2(\nu+3)}{\nu+2}E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}) - 2E\left[E\left\{K_i\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+ \middle| K_i\right\}\right]
\end{aligned}
$$

が得られる．ただし，$I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}$ は $S/(\nu+2) > T_i$ ならば 1，それ以外ならば 0 をとる定義関数である．これらを用いると，δ_0 の MSE と δ_p の MSE の差は，

$$
\{MSE(\delta_0) - MSE(\delta_p)\}(\nu+p+2)^2 = \sum_{i=1}^{p} E(D_i) \tag{2}
$$

と表現される．ここで $MSE(\zeta)$ は ζ の MSE のことであり，

$$
\begin{aligned}
D_i &= \frac{2(\nu+2p+1)}{\nu+2}E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}|K_i) + 2E\left\{K_i\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+ \middle| K_i\right\}\\
&\quad - \sum_{\substack{j\neq i\\ 1\leq j\leq p}} E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\left(\frac{S}{\nu+2}-T_j\right)^+ \middle| K_i, K_j\right\}
\end{aligned} \tag{3}
$$

である．また，(2) 式右辺の期待値は K_i，$i=1,\cdots,p$ についてのものである．この表現をもとに δ_p が δ_0 を改良する条件を議論する．(2)，(3) 式より，$K_1 \geq 0, \cdots, K_p \geq 0$ に対して $D_i \geq 0$ が成り立つような (ν, p) に対しては δ_p は δ_0 を一様に改良する．それを示すために $K_i = 0$ と $K_i > 0$ 場合に分けて考える．

$K_i = 0$ の場合：

$T_j|K_j$，$j \neq i$ は $K_j = 0$ の時に確率的に最小である．すなわち，D_i は $K_j = 0$，$j \neq i$ の時に最小となり，

$$
D_i \geq \frac{2(\nu+2p+1)}{\nu+2}E_0(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}) - (p-1)E_0\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\left(\frac{S}{\nu+2}-T_j\right)^+\right\}
$$

が得られる．ここで E_0 は $\lambda_i=0,\ i=1,\cdots,p$ の時の期待値である．従って，

$$\frac{a}{b} \geq \frac{(\nu+2)(p-1)}{2(\nu+2p+1)} \tag{4}$$

ならば $D_i \geq 0$ となる．ただし，

$$a = E_0(T_1 I_{\frac{S}{\nu+2}>T_1}),\ b = E_0\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_1\right)^+\left(\frac{S}{\nu+2}-T_2\right)^+\right\}$$

である．

$K_i>0$ の場合：

(3) 式右辺第 3 項に対して，$\{S/(\nu+2)-T_i\}^+\{S/(\nu+2)-T_j\}^+ \leq \{S/(\nu+2)-T_i\}^+S/(\nu+2)$ を使い，再び Lemma 2.1 を使うと，

$$\begin{aligned} D_i \quad &\geq \frac{2(\nu+p+2)}{\nu+2}E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}|K_i) \\ &\quad +\{2K_i-(p-1)\}E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\middle|K_i\right\} \end{aligned}$$

となる．ここで $K_i \geq 1$ ならば，

$$E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}|K_i) \geq \frac{\nu+2}{\nu+3}\times E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+|K_i\right\}$$

が示せることに注意し，これを用いると，

$$D_i \geq \left\{\frac{2(\nu+p+2)}{\nu+3}+2K_i-(p-1)\right\}E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\middle|K_i\right\}$$

が得られる．さらに $K_i \geq 1$ であることより，

$$\frac{2(\nu+p+2)}{\nu+3}+2K_i-(p-1) \geq \frac{\nu+1}{\nu+3}\left(5+\frac{8}{\nu+1}-p\right)$$

となる．従って，

$$p < 5+\frac{8}{\nu+1} \tag{5}$$

ならば $D_i>0$ となる．

以上の2つのケースより，(4) 式かつ (5) 式が成り立てば，δ_p が δ_0 を一様に改良する．ここで，(5) 式の条件は (4) 式の条件に含まれることが証明できるため，実質的には (4) 式の

みが成り立てばよい．さらに(4)式は$\lambda_i = 0,\ i = 1, \cdots, p$の時に$MSE(\delta_p) \leq MSE(\delta_0)$となることと同値であるから，(4)式が成り立たない場合にはδ_pはδ_0を改良しない．従ってδ_pがδ_0を一様に改良するための必要十分条件は次の定理で与えられる．

THEOREM 2.2 δ_pがδ_0を一様に改良するための必要十分条件は，$\lambda_i = 0,\ i = 1, 2, \cdots, p$である時に$MSE(\delta_p) \leq MSE(\delta_0)$となることである．

Theorem 2.2の直感的な解釈を述べる．$\sqrt{\lambda_i}$は要因効果iの大きさに比例するので，$\lambda_i = 0,\ i = 1, \cdots, p$とはすべての要因効果がない場合を意味する．$T_i,\ i = 1, \cdots, p$が$\lambda_i = 0,\ i = 1, \cdots, p$の時に確率的に最小であることに注意すると，$\delta_p$は$\lambda_i = 0,\ i = 1, \cdots, p$の時に確率的に最小であり最も縮小したものになっており，Theorem 2.2はそのような場合にδ_pのMSEがδ_0のMSE以下であればδ_pがδ_0を一様な改良に改良するということを意味する．

(4)式が成り立つ(ν, p)の範囲を，$\nu \leq 40$の場合について数値計算を用いて具体的に調べると次の表1を得る．(4)式左辺はpに依存せず右辺はpの増加関数であるから，νを固定すれば(4)式が成り立つpの範囲は，$p \leq p^*(\nu)$という形で求められることに注意する．直感的にはpが大きくなると縮小しすぎてしまい改良にならなくなるということである．

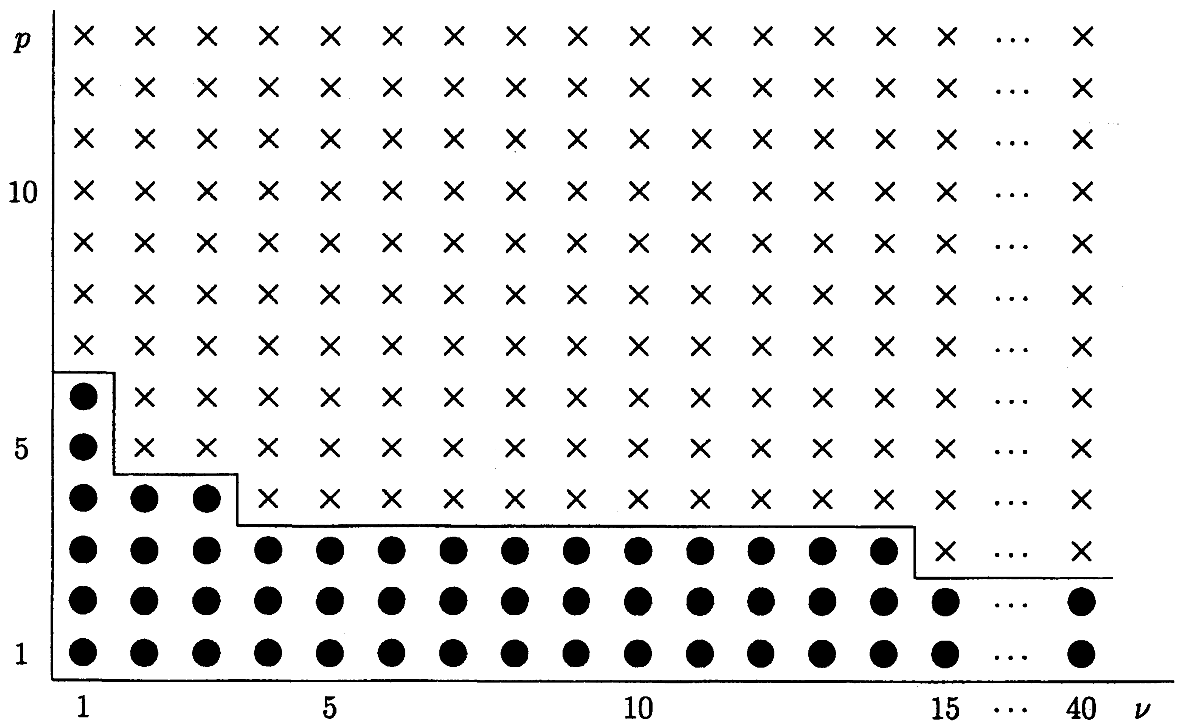
表1: $1 \leq \nu \leq 40$の時のa, bと$p^*(\nu)$の値

ν	a	b	a/b	$p^*(\nu)$	ν	a	b	a/b	$p^*(\nu)$
1	0.057669	0.107241	0.537751	6	21	0.178083	0.225953	0.788142	2
2	0.089443	0.151270	0.591280	4	22	0.178930	0.226355	0.790481	2
3	0.109551	0.174162	0.629019	4	23	0.179709	0.226721	0.792646	2
4	0.123417	0.187827	0.657076	3	24	0.180430	0.227054	0.794655	2
5	0.133555	0.196763	0.678762	3	25	0.181098	0.227360	0.796525	2
6	0.141289	0.202994	0.696029	3	26	0.181719	0.227641	0.798270	2
7	0.147384	0.207553	0.710105	3	27	0.182298	0.227900	0.799902	2
8	0.152310	0.211015	0.721800	3	28	0.182838	0.228140	0.801431	2
9	0.156375	0.213722	0.731673	3	29	0.183345	0.228363	0.802867	2
10	0.159785	0.215891	0.740118	3	30	0.183820	0.228570	0.804219	2
11	0.162688	0.217664	0.747425	3	31	0.184267	0.228763	0.805492	2
12	0.165188	0.219137	0.753809	3	32	0.184687	0.228943	0.806695	2

13	0.167364	0.220379	0.759436	3
14	0.169275	0.221439	0.764431	3
15	0.170966	0.222353	0.768897	2
16	0.172474	0.223149	0.772912	2
17	0.173827	0.223848	0.776543	2
18	0.175048	0.224466	0.779841	2
19	0.176154	0.225016	0.782850	2
20	0.177162	0.225509	0.785607	2
33	0.185084	0.229112	0.807833	2
34	0.185460	0.229271	0.808910	2
35	0.185815	0.229420	0.809932	2
36	0.186151	0.229561	0.810903	2
37	0.186471	0.229693	0.811826	2
38	0.186775	0.229818	0.812705	2
39	0.187064	0.229937	0.813543	2
40	0.187339	0.230049	0.814343	2

表1より得られた改良になる $(\nu,\ p)$ の範囲を次の図1に図示する．

図1：δ_p が δ_0 を改良する $(\nu,\ p)$ の範囲



●＝改良，×＝改良しない

図1より，$\nu \leq 40$ で δ_p が δ_0 を一様に改良する p の範囲が得られた．次に，$\nu > 40$ の時にも $p = 2$ で改良となることと，$p \geq 3$ で改良にならないことを議論する．δ_2 が δ_0 を

一様に改良することに関しては，Cauchy-Schwartz の不等式

$$
\begin{aligned}
&2E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_1\right)^+\left(\frac{S}{\nu+2}-T_2\right)^+\right\}\\
&\le \sum_{i=1}^{2} E\left\{\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\right\}^2\\
&= \sum_{i=1}^{2}\left\{\frac{2(\nu+3)}{\nu+2}E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}) - 2E\left[E\left\{K_i\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\middle|K_i\right\}\right]\right\}
\end{aligned}
$$

を用いると，(2)，(3) 式より，

$$
\begin{aligned}
&(\nu+4)^2\{MSE(\delta_0)-MSE(\delta_2)\}\\
&\ge \frac{4}{\nu+2}\sum_{i=1}^{2}E(T_i I_{\frac{S}{\nu+2}>T_i}) + 4\sum_{i=1}^{2}E\left[E\left\{K_i\left(\frac{S}{\nu+2}-T_i\right)^+\middle|K_i\right\}\right]\\
&>0.
\end{aligned}
$$

従って，δ_2 は δ_0 を改良する．

δ_p, $p\ge 3$ が δ_0 を改良しないことに関しては，$p\ge 3$, $\nu>40$ で (4) 式が成り立たないこと，すなわち

$$
\frac{a}{b} < \frac{(p-1)(\nu+2)}{2(\nu+2p+1)} \tag{6}
$$

を示せばよい．$\lambda_1=0$ の時，$S+T_1$, $U_1=T_1/(S+T_1)$ は互いに独立であり，$E_0(S+T_1)=\nu+1$ であることに注意すると，a, b はそれぞれ次のように評価できる．

$$
\begin{aligned}
a &= (\nu+1)E_0\left(U_1|U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)P_0\left(U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)\\
b &\ge \frac{(\nu+1)(\nu+3)}{(\nu+2)^2}\left[\left\{1-(\nu+3)E_0\left(U_1|U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)\right\}P_0\left(U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)\right]^2
\end{aligned}
$$

従って，

$$
\frac{a}{b} \le \frac{(\nu+2)^2}{\nu+3}\frac{E_0\left(U_1|U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)}{\left\{1-(\nu+3)E_0\left(U_1|U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)\right\}^2 P_0\left(U_1<\frac{1}{\nu+3}\right)} \tag{7}
$$

が得られる．ただし，P_0 は $\lambda_1=0$ の時の確率である．右辺は，$E_0\{U_1|U_1<1/(\nu+3)\}$ に関する増加関数であり，$P_0\{U_1<1/(\nu+3)\}$ に関する減少関数である．ここで，U_1 が $Beta(1/2,(\nu+1)/2)$ に従うことに注意すると $\nu>40$ に対して，

$$
E_0\left\{U_1|U_1<\frac{1}{\nu+3}\right\} \le \frac{3}{10(\nu+3)} \tag{8}
$$

$$
P_0\left\{U_1<\frac{1}{\nu+3}\right\} \ge \frac{33}{50} \tag{9}
$$

が示せる．(8)，(9) 式を (7) 式右辺に使うと，

$$\frac{a}{b} \le \frac{500}{539}\left(\frac{\nu+2}{\nu+3}\right)^2 \tag{10}$$

が得られる．一方で，(6) 式右辺は p の増加関数であることより，(6) 式右辺 $\ge (\nu+2)/(\nu+7)$ である．従って (10) 式を用いると，(6) 式が示せる．

3　偏りと平均二乗誤差の両面からの改良推定量の評価

これまでの議論で δ_p が δ_0 を一様に改良する (ν, p) の範囲が得られた．実際に応用することを考えると，一様な改良を与える推定量であってもあまりに偏りが大きいのでは問題である．一方で，MSE よりも大幅に偏りを基準に推定量を評価するなら UMVUE S/ν が最良ということになるが，MSE を減少させることができる場合には S/ν を使うことは好ましくない．我々の得た改良推定量は偏りがあるが S/ν よりは MSE が小さい．従って，偏りと MSE の両面から改良推定量を評価する．ひとつの公正な判断な仕方として，$MSE(S/\nu)$ に対する $MSE(\delta_p)$ の減少割合，

$$A = 100 \times \left\{1 - \frac{MSE(\delta_p)}{MSE(S/\nu)}\right\}$$

と，$MSE(S/\nu)$ に対する (偏り)^2 の占める割合，

$$B = 100 \times \frac{(\delta_p\text{の偏り})^2}{MSE(S/\nu)}$$

の 2 つの指標をもとに推定量を評価する．A が大きく B が小さいほど好ましい．また A/B は改良する推定量を評価するよい基準である．δ_p の偏りが最も大きくなるとき，すなわち $\lambda_i = 0$, $i = 1, \cdots, p$ のとき (偏り)^2, MSE, A, B, A/B の値を計算する．実際の問題では，ν, p ともに小さい場合が重要であり，ここでは $\nu \le 10$ の場合について δ_p, $p = 2, 3, 4, 5$ を取り上げ，表 2 に示す．B を 30% から 40% 程度まで許容すれば，MSE が 30% 以上減少し，ν が小さいところでは A/B が 1 より大きい．

表2: (偏り)^2, MSE, A, B, A/B の値.

δ_2

ν	(偏り)^2	MSE	A	B	A/B
1	0.525333	0.656792	67.2	26.3	2.6
2	0.330091	0.491012	50.9	33.0	1.5
3	0.228353	0.392800	41.1	34.3	1.2
4	0.167957	0.327633	34.5	33.6	1.0
5	0.128962	0.281151	29.7	32.2	0.9
6	0.102242	0.246289	26.1	30.7	0.9
7	0.083101	0.219157	23.3	29.1	0.8
8	0.068904	0.197431	21.0	27.6	0.8
9	0.058075	0.179637	19.2	26.1	0.7
10	0.049623	0.164793	17.6	24.8	0.7

δ_3

ν	(偏り)^2	MSE	A	B	A/B
1	0.546612	0.658910	67.1	27.3	2.5
2	0.355015	0.493880	50.6	35.5	1.4
3	0.252199	0.395787	40.6	37.8	1.1
4	0.189507	0.330486	33.9	37.9	0.9
5	0.148072	0.283783	29.1	37.0	0.8
6	0.119106	0.248681	25.4	35.7	0.7
7	0.097995	0.221318	22.5	34.3	0.7
8	0.082101	0.199380	20.2	32.8	0.6
9	0.069820	0.181398	18.4	31.4	0.6
10	0.060124	0.166387	16.8	30.1	0.6

δ_4

ν	(偏り)^2	MSE	A	B	A/B
1	0.562069	0.661545	66.9	28.1	2.4
2	0.374303	0.497617	50.2	37.4	1.3
3	0.271565	0.399834	40.0	40.7	1.0

δ_5

ν	(偏り)^2	MSE	A	B	A/B
1	0.573803	0.664136	66.8	28.7	2.3

参考文献

(1) Stein, C. Inadmissiblity of the usual estimator for the variance of a normal distribution with unknown mean. Ann. Inst. Statist. Math., **1964**, *16*, 155-160.

(2) Shinozaki, N. Some modifications of improved estimators of a normal variance. Ann. Inst. Statist. Math., **1995**, *47*, 273-286.

(3) Gelfand, A. E. and Dey, D. K. Improved estimation of the disturbance variance in a linear regression model. J. Econometrics, **1988**, *39*, 387-395.

(4) 永田 靖 直交表におけるプーリングを伴った誤差分散の推定 品質, **1989**, *19*,

(5) Kubokawa, T. Shrinkage and modification techniques in estimation of variance and the related problems: A review. Comm. in Statist. - Theory and Methods., **1999**, *28*, 613-650.

(6) Dey, D.K. and Srinivasan, C. Estimation of a covariance matrix under Stein's loss. Ann. Statist., **1985**, *13*, 1581-1591.

(7) Rakesh, S. and Vilpa, T. An estimation procedure for error variance incorporating PTS for random effects model under the linex loss function. Comm. in Statist. - Theory and Methods., **2001**, *30*, 2583-2599.