

多変量線形回帰における一般化リッジ推定量に 基づいたモデル選択規準

東京工業大学 森 裕一
東京工業大学 鈴木 大慈

1. はじめに

本研究では多変量線形回帰におけるモデル選択規準を扱う。多変量線形回帰は $Y = AB + E$ と表せるモデルであり、 Y を $n \times p$ の観測行列、 A を $n \times k$ のデザイン行列、 B を $k \times p$ の回帰行列、 E を $n \times p$ の誤差行列としたものである。ただし $E \sim \mathcal{N}_{n \times p}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n \otimes \Sigma)$ とし Σ は正定値行列である。既存のモデル選択規準としては最尤推定量に基づいた二乗誤差リスクの不偏推定量である C_p や MC_p 、Kullback Leibler リスクの漸近不偏推定量である AIC や不偏推定量である AICc などがあげられる。特に MC_p に関してはモデルの候補が真のモデルを包括していない場合に関する二乗誤差リスクの不偏推定量となっている。

本研究では各リスクにおいて最尤推定量を優越するような一般化リッジ推定量を提案し、その推定量のそれぞれのリスクに対する不偏推定量をモデル選択規準として提案する。真のモデルがモデルの候補の中に存在するとする。特に二乗誤差リスクにおいては真のモデルを包括していないモデルの候補も含めて、任意のモデルの候補で最尤推定量を優越する一般化リッジ推定量を用いた。ただし一般化リッジ推定量のパラメータはデータに依存して決定する。また提案したモデル選択規準は、ある漸近構造 $p/n \rightarrow c \in [0, 1)$ といくつかの条件のもとでモデルの一致性を持ち、それぞれのリスクに対する一様最小分散不偏推定量となっている。これは AICc や MC_p において成り立つことの拡張となっている。提案したモデル選択規準と既存のモデル選択規準の比較をモンテカルロシミュレーションを用いて行った。

2. モデル選択規準

モデルの候補を J とし、特にフルモデルを F とする。この時、各モデルにおける Σ の最尤推定量を $\frac{1}{n}S_J$ とし、 Λ_J 、 $C_J(S_J)$ を各モデルとデータに依存した対角行列とする。本研究で提案する一般化リッジ推定量に基づいた二乗誤差リスクに関するモデル選択規準は以下のように与えられる：

$$\begin{aligned} \text{ZMCp}(J) &= (n - k_F - p - 1) \text{tr}(S_F^{-1} S_J) + p(2k_J + p + 1 - n) \\ &\quad - (p - 2) \text{tr}[\Lambda_J C_J(S_F)^{-1}] \\ &= \text{MCp}(J) - (p - 2) \text{tr}[\Lambda_J C_J(S_F)^{-1}]. \end{aligned}$$

同様に本研究で提案する Kullback Leibler リスクに関するモデル選択規準は以下のように与えられる：

$$\begin{aligned} \text{ZKLIC}(J) &= n \log \left| \frac{1}{n} S_J \right| + np \log 2\pi + \frac{np(n + k_J)}{n - k_J - p - 1} \\ &\quad - \frac{n(p - 2)}{(n - k_J - p + 1)} \text{tr}[\Lambda_J C_J(S_J)^{-1}] \\ &= \text{AICc}(J) - \frac{n(p - 2)}{(n - k_J - p + 1)} \text{tr}[\Lambda_J C_J(S_J)^{-1}]. \end{aligned}$$