

多変量 Tukey-Kramer 型多重比較法とその保守性

瀬 尾 隆*, 西 山 貴 弘**

Multivariate Tukey-Kramer Type Multiple Comparison Procedures
and their Conservativeness

Takashi Seo* and Takahiro Nishiyama**

本論文では, 多変量正規母集団における平均ベクトル間の多重比較法に対する保守的な同時信頼区間について考える. 多重比較の中の対比較と対照比較に対する多変量 Tukey-Kramer (MTK) 型多重比較法とそれらの性質が与えられる. 特に母集団の数が3つの場合について MTK 型法の保守性に対する被覆確率の上限がその被覆確率の変形によって導出される. 最後に, いくつかの選ばれたパラメータに対してモンテカルロシミュレーションによる数値的結果が与えられる.

In this paper, conservative simultaneous confidence intervals for multiple comparisons among mean vectors in multivariate normal populations are considered. In multiple comparisons, the multivariate Tukey-Kramer (MTK) type multiple comparison procedures for pairwise comparisons and for comparisons with a control and their properties are presented. In particular, the upper bounds of coverage probabilities for the conservativeness of the MTK type procedures are derived by the reduction of the coverage probabilities when the number of population is three. Finally, numerical results by Monte Carlo simulations are given for some selected values of parameters.

1. はじめに

多変量正規母集団における平均ベクトルに関する多重比較法についての同時信頼区間を考える. k 個の多変量正規母集団において, μ_i を i 番目の母集団からの平均ベクトルとし, μ_i を並べた $p \times k$ の未知行列を $M = [\mu_1, \dots, \mu_k]$ とする. さらに, $\hat{M} = [\hat{\mu}_1, \dots, \hat{\mu}_k]$ を M の推定量とし, $\text{vec}(X) \sim N_{kp}(\mathbf{0}, V \otimes \Sigma)$ とする. ここで, $X = \hat{M} - M$, V は $k \times k$ 既知行列, Σ は $p \times p$ 未知行列とし, $\text{vec}(\cdot)$ は行列の各列を縦に並べることによって作られる列ベクトルを意味する. また, S は νS が \hat{M} と独立で, $\nu S \sim W_p(\Sigma, \nu)$ となるような Σ の不偏推定量とする. そのとき, 平均ベクトル間の多重比較法における同時信頼区間は次のような形で表現される.

$$\mathbf{a}'\mathbf{M}\mathbf{b} \in [\mathbf{a}'\hat{\mathbf{M}}\mathbf{b} \pm t(\mathbf{b}'\mathbf{V}\mathbf{b})^{1/2}(\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a})^{1/2}], \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, \forall \mathbf{b} \in \mathbb{B}. \quad (1)$$

ここで, \mathbb{R}^p は任意の零でない p 次元実ベクトル, \mathbb{B} は k 次元空間における r 個のベクトルから成る部分集合であり, $t(>0)$ は次のような T_{\max}^2 型統計量

* 東京理科大学理学部数理情報科学科 〒162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3

E-mail: seo@rs.kagu.tus.ac.jp

** 東京理科大学大学院理学研究科数学専攻 〒162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3

E-mail: j1105706@ed.kagu.tus.ac.jp

$$T_{\max}^2 = \max_{b \in B} \left\{ \frac{(Xb)'S^{-1}Xb}{b'Vb} \right\} \quad (2)$$

の上側 100α %点の平方根である。このとき (1) の被覆確率 (coverage probability) はちょうど $1-\alpha$ になる。

多重比較法にはいくつかの比較があるが、本論文では、対比較と対照比較について考える。すなわち、対比較の場合、 e_i を k 次元空間の中の i 番目が 1 である単位ベクトルとおくと、(1) の B は、

$$B=C \equiv \{c \in R^k : c = e_i - e_j, 1 \leq i < j \leq k\}$$

となり、このとき $r = k(k-1)/2$ であり、(1) の同時信頼区間は、

$$a'(\mu_i - \mu_j) \in [a'(\hat{\mu}_i - \hat{\mu}_j) \pm t_{\max \cdot p} (d_{ij} a' S a)^{1/2}], \forall a \in R^p, 1 \leq i < j \leq k$$

と表すことができる。ここで $t_{\max \cdot p}^2$ は次のような $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量

$$\begin{aligned} T_{\max \cdot p}^2 &= \max_{c \in C} \left\{ \frac{(Xc)'S^{-1}Xc}{c'Vc} \right\} \\ &= \max_{i < j} \{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)'(d_{ij} S)^{-1}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\} \end{aligned}$$

の上側 100α %点である。ただし $d_{ij} = v_{ii} - 2v_{ij} + v_{jj}$ である。

$V=I$ の場合、 $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量は、本質的に多変量ステューデント化範囲統計量 (R_{\max}^2 統計量) と同等である。この R_{\max}^2 統計量の上側パーセント点については、ボンフェロニの不等式を利用した修正 2 次近似法が与えられ、近似の精度が評価されている (Siotani (1959), Seo and Siotani (1992) 参照)。さらに標本数が異なる場合を含むアンバランス型 ($V \neq I$) の場合における修正 2 次近似値が与えられている (Seo (1995))。また、最近、 $V=I$ および $V \neq I$ のそれぞれの場合に対して、非正規分布の一つである楕円分布の下での近似法 (1 次近似, 修正 2 次近似) が与えられ、非正規性の影響が調べられている (Seo (2002), Okamoto and Seo (2003), Okamoto (2005))。一方、より簡便な手法として、一変量の場合の Tukey-Kramer 法 (Tukey (1953), Kramer (1956, 1957)) を多変量に拡張した多変量 Tukey-Kramer 法が提案されている (Seo, Mano and Fujikoshi (1994))。この多変量 Tukey-Kramer 法は、与えられた任意の正定値行列 V に対する同時信頼区間を求める際に必要となる $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量の上側パーセント点を、 $V=I$ である $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量 (すなわち R_{\max}^2 統計量) の上側パーセント点で代用する近似法である。また、この手法の重要な性質の一つとして、「多変量 Tukey-Kramer 法は常に保守的な同時信頼区間を構成する」という多変量一般化 Tukey 予想が知られている。この予想は、3 つの平均ベクトル ($k=3$) の場合に、Seo, Mano and Fujikoshi (1994) によって肯定的に証明されているが、 $k \geq 4$ については未解決な問題 (予想) として残されている。また、 $k=3$ の場合において、多変量 Tukey-Kramer 法による近似同時信頼区間が、どの程度保守的であるか研究されている (Seo (1996))。これに関連して、一変量の場合における一般化 Tukey 予想については、Hayter (1984, 1989), Brown (1984), Spurrier and Isham (1985), Uusipaikka (1985) などの研究があり、Somerville (1993) がその保守性の程度を与えている。

次に、対照比較の場合、 k 番目の母集団をコントロールとすると、

$$B=D \equiv \{d \in R^k : d = e_i - e_k, i = 1, \dots, k-1\}$$

となり、そのとき、 $r = k-1$ であり、(1) の同時信頼区間は次のようになる。

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) \pm t_{\max \cdot c}(d_{ik} \mathbf{a}' \mathbf{S} \mathbf{a})^{1/2}], \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, i=1, \dots, k-1.$$

ここで, $t_{\max \cdot c}^2$ は次のような $T_{\max \cdot c}^2$ 統計量

$$\begin{aligned} T_{\max \cdot c}^2 &= \max_{d \in \mathcal{D}} \left\{ \frac{(\mathbf{X}d)' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X}d}{d' \mathbf{V}d} \right\} \\ &= \max_{i=1, \dots, k-1} \{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k)'(d_{ik} \mathbf{S})(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k)\} \end{aligned}$$

の上側 100α %点である.

対照比較の場合において, 修正 2 次近似法による近似値および多変量 Tukey-Kramer 法タイプの保守的な手法が Seo (1995) によって提案されている. 本論文では, 対比較と対照比較に対する多変量 Tukey-Kramer 型多重比較法の保守性の程度における上限を与える.

本論文の構成は以下の通りである. 第 2 節で, 多変量 Tukey-Kramer 法の紹介とその保守性について述べる. 第 3 節で Seo (1995) による対照比較における保守的な方法を紹介し, その保守性の上限について示す. 第 4 節で, モンテカルロ・シミュレーションによる数値実験の結果を与え, 数値的な保守性の程度を示す.

2. 多変量 Tukey-Kramer 法

全ての対比較に対する多変量 Tukey-Kramer 法による同時信頼区間は, 次のようになる.

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) \pm t_p \sqrt{d_{ij} \mathbf{a}' \mathbf{S} \mathbf{a}}], \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, 1 \leq i < j \leq k. \quad (3)$$

ここで t_p^2 は, $\mathbf{V}=\mathbf{I}$ のときの $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量の上側 100α %点, つまり, $t_p^2 = q^2/2$ で, $q^2 \equiv q_{p,k,\nu}^2(\alpha)$ は, パラメータ k, ν の p 変量ステューデント化範囲統計量の上側 100α %点である. 多変量一般化 Tukey 予想として, 「(3) の被覆確率は, 与えられた任意の正定値行列 \mathbf{V} について $1-\alpha$ 以上になる」という予想があり, $k=3$ の場合, Seo, Mano and Fujikoshi (1994) で理論的に証明されている. ここでは同様の変形を用いることによって保守性の程度を導出するため, 以下に Seo, Mano and Fujikoshi (1994) の証明の概略を述べる.

まず, Hochberg (1974) の多変量への拡張として次の定理が成り立つ.

定理 2.1. $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量の分布は, $d_{ij} = v_{ii} - 2v_{ij} + v_{jj}$ を通して行列 \mathbf{V} に依存する.

定理 2.1 より, すべての $i, j (1 \leq i < j \leq k)$ に対して, $d_{ij} = d$ を満足する $T_{\max \cdot p}^2$ の分布は, $\mathbf{V}=\mathbf{I}$ のときの $T_{\max \cdot p}^2$ の分布に等しい. すなわち, そのときの (3) の被覆確率は正確に $1-\alpha$ である.

次に確率

$$Q(t, \mathbf{V}, \mathbf{B}) = \Pr\{(\mathbf{X}\mathbf{b})'(\nu\mathbf{S})^{-1}(\mathbf{X}\mathbf{b}) \leq t(\mathbf{b}'\mathbf{V}\mathbf{b}), \quad \forall \mathbf{b} \in \mathbf{B}\} \quad (4)$$

を考える. ここで, t は任意の固定された定数とする. 一般性を失うことなく, (4) の確率を考えるときには $\Sigma = \mathbf{I}_p$ と仮定することができる.

$t = t_p^*$ ($\equiv t_p^*/\nu$), $\mathbf{B}=\mathbf{C}$ のとき, (4) の被覆確率 $Q(t_p^*, \mathbf{V}, \mathbf{C})$ は, (3) の被覆確率を表している.

定理 2.2. $\mathbf{V}=\mathbf{B}'\mathbf{B}$ を満たす正則行列 \mathbf{B} が存在し, $\Gamma = \{\gamma; \gamma = (\mathbf{b}'\mathbf{V}\mathbf{b})^{-1/2} \mathbf{B}\mathbf{b}, \mathbf{b} \in \mathbf{B}\}$ とするとき, 確率 $Q(t, \mathbf{V}, \mathbf{B})$ を次のように書くことができる.

$$Q(t, \mathbf{V}, \mathbf{B}) = E_L \{ \Pr(\mathbf{Y}\boldsymbol{\gamma})' \mathbf{L}^{-1} \mathbf{Y}\boldsymbol{\gamma} \leq t \text{ for any } \boldsymbol{\gamma} \in \Gamma \},$$

ただし, $\mathbf{L} = \text{diag}(\ell_1, \dots, \ell_p)$ で, その確率密度関数 (例えば, Siotani, Hayakawa and Fujikoshi (1985, p. 450) を参照) は,

$$\frac{\pi^{p^2/2}}{2^{p\nu/2} \Gamma_p\left(\frac{1}{2}\nu\right) \Gamma_p\left(\frac{1}{2}p\right)} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \ell_i\right) \prod_{i=1}^p \ell_i^{(\nu-p-1)/2} \prod_{i < j} (\ell_i - \ell_j)$$

であり, $\Gamma_p(n) = \pi^{p(p-1)/4} \prod_{i=1}^p \Gamma(n - (i-1)/2)$. また, $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k]$ は \mathbf{L} と独立で, $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k$ は, 互いに独立で $N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I}_p)$ に従う.

さらに, \mathbf{B} の特別な場合として, \mathbf{B} によって張られる空間の次元を 2 とすると, 次の定理が成り立つ.

定理 2.3. $\mathbf{B} = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m\}$ によって張られる空間の次元を 2 とすると,

$$\boldsymbol{\gamma}' \mathbf{H} = (\boldsymbol{\delta}'_j, 0, \dots, 0), \quad j=1, \dots, m,$$

となる直交行列 \mathbf{H} が存在し, (ただし, $\boldsymbol{\delta}_j = [\cos \beta_j, \sin \beta_j]'$ は, $\boldsymbol{\delta}'_j \boldsymbol{\delta}_j = 1$ の 2 次元ベクトル), 確率 $Q(t, \mathbf{V}, \mathbf{B})$ は,

$$Q(t, \mathbf{V}, \mathbf{B}) = E_{L,R} \left[\Pr \left\{ \sum_{i=1}^p \frac{r_i^2}{\ell_i} \cos^2(\theta_i - \beta_j) \leq t \text{ for any } j=1, \dots, m \right\} \right] \quad (5)$$

と表される. ただし, $\theta_1, \dots, \theta_p$ は互いに独立に $[0, 2\pi)$ の一様分布に従い, $\mathbf{R} = \text{diag}(r_1, \dots, r_p)$ で, r_1^2, \dots, r_p^2 は互いに独立に χ^2_2 分布に従う. さらに, \mathbf{R} と, $\mathbf{L} = \text{diag}(\ell_1, \dots, \ell_p)$ とは互いに独立である.

ここで, $Q(t_p^*, \mathbf{V}, \mathbf{C})$ に関連して, 任意の $0 = \beta_1 \leq \dots \leq \beta_m \leq \pi$ に対して, 次の確率

$$G(\beta_1, \dots, \beta_m) = \Pr \left\{ \sum_{i=1}^p w_i \cos^2(\theta_i - \beta_j) \leq t \text{ for any } j=1, \dots, m \right\} \quad (6)$$

を考える. ただし, $w_i > 0, t > 0$ で, $\theta_1, \dots, \theta_p$ は互いに独立に $[0, 2\pi)$ の一様分布に従うとする. このとき, 確率 (6) は任意の $0 = \beta_1 \leq \dots \leq \beta_m \leq \pi$ に対して, $\beta_2 = \pi/m, \beta_3 = 2\pi/m, \dots, \beta_m = (m-1)\pi/m$ のとき最小となることがわかる. よって, $t = t_p^* (\equiv t_p^2/\nu)$, $\mathbf{B} = \mathbf{C}$ である対比較のとき, $k=3, m=3$ であり, また, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ が等角度であることと, $d_{ij} = v_{ii} - 2v_{ij} + v_{jj} = d$ (constant) であることは同値であることより, 次の定理が成り立つ.

定理 2.4. $k=3$ のとき, $\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j), 1 \leq i < j \leq k, \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p$ に対して, 多変量 Tukey-Kramer 法による同時信頼区間は保守的である. すなわち,

$$\Pr \{ \mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_j) \pm t_p \sqrt{d_{ij} \mathbf{a}' \mathbf{S} \mathbf{a}}], \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, 1 \leq i < j \leq k \} \geq 1 - \alpha$$

このように, $k=3$ のとき, 多変量一般化 Tukey 予想が成り立つことが理論的に示された.

さらに, 上に述べた定理の証明の中で, 確率 (6) が最大となるのは $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$ ($m=3$ のとき) であることより, 次の定理を得ることができる.

定理 2.5. $k=3$ のとき, 任意の正定値行列 V について次の不等式が成り立つ.

$$1-\alpha = Q(t_p^*, I, C) \leq Q(t_p^*, V, C) < Q(t_p^*, V_0, C).$$

ここで, $t_p^* = t_p^*/\nu$, $C = \{c \in \mathbb{R}^k : c = e_i - e_j, 1 \leq i < j \leq k\}$ で, 行列 V_0 は $\sqrt{d_{ij}} = \sqrt{d_{il}} + \sqrt{d_{jl}}$ (i, j, l は全て異なる) の一つを満たす行列である.

定理 2.5 の行列 V_0 の条件は, Seo (1996) の結果を含む厳密な条件となっている. ここで注意すべきことは, $k=3$ のとき, $\sqrt{d_{ij}} = \sqrt{d_{il}} + \sqrt{d_{jl}}$ (i, j, l は全て異なる) の一つを満たすという条件, すなわち, $\sqrt{d_{12}} = \sqrt{d_{13}} + \sqrt{d_{23}}$, または, $\sqrt{d_{13}} = \sqrt{d_{12}} + \sqrt{d_{23}}$, または, $\sqrt{d_{23}} = \sqrt{d_{12}} + \sqrt{d_{13}}$ を満たす行列 V_0 は正定値行列として存在せず, 半正定値行列として存在することである.

次に, 母集団間に相関がなく各標本数が異なる場合には V は対角行列になるので, $V = \text{diag}(n_1^{-1}, \dots, n_k^{-1})$ の場合の $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量を考える. このとき, $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量は

$$T_{\max \cdot p}^2 = \max_{i < j} \left[\frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)' S^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{n_i^{-1} + n_j^{-1}} \right]$$

となる. 一般性を失うことなく, $n_i \leq n_j$ と仮定することができ, $a_{ij}^2 = n_i/n_j$ とおく. そのとき

$$T_{\max \cdot p}^2 = \max_{i < j} \left[\frac{(\mathbf{u}_i - a_{ij} \mathbf{u}_j)' S^{-1} (\mathbf{u}_i - a_{ij} \mathbf{u}_j)}{1 + a_{ij}^2} \right],$$

となる. ここで, $\mathbf{u}_i = \sqrt{n_i}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \boldsymbol{\mu}_i) \sim N_p(\mathbf{0}, I)$, $\nu S \sim W_p(I, \nu)$ である. よって $a_{ij} \rightarrow 0$ とすると,

$$T_{\max \cdot p}^2 = \tilde{T}_{\max}^2 = \max_{i=1, \dots, k-1} \{\mathbf{u}_i' S^{-1} \mathbf{u}_i\}$$

となる. また $k=3$ のとき, \tilde{T}_{\max}^2 統計量の分布は $\sqrt{d_{12}} = \sqrt{d_{13}} + \sqrt{d_{23}}$, または, $\sqrt{d_{13}} = \sqrt{d_{12}} + \sqrt{d_{23}}$, または, $\sqrt{d_{23}} = \sqrt{d_{12}} + \sqrt{d_{13}}$, つまり, $\sqrt{d_{ij}} = \sqrt{d_{il}} + \sqrt{d_{jl}}$ (i, j, l は全て異なる) の一つを満たす $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量と同じ分布になり, 定理 2.5 より, 任意の対角行列 V について, $Q(t_p^*, V, C) < \Pr\{\tilde{T}_{\max}^2 < t_p^2\}$ が成り立つ. まとめると次の結果が得られる.

系 2.6. $k=3$ のとき, 任意の対角行列 V について, 次の不等式が成り立つ.

$$1-\alpha = Q(t_p^*, I, C) \leq Q(t_p^*, V, C) < \Pr\{\tilde{T}_{\max}^2 < t_p^2\},$$

ここに $\tilde{T}_{\max}^2 = \max_{i=1, \dots, k-1} \{\mathbf{u}_i' S^{-1} \mathbf{u}_i\}$ であり, $\mathbf{u}_i, i=1, \dots, k-1$ は互いに独立に $N_p(\mathbf{0}, I)$ に従い, νS は $W_p(I, \nu)$ に従う.

3. 対照比較における保守的な手法

この節では, 対照比較における保守的な手法について述べる. 対照比較に対する同時信頼係数 $1-\alpha$ をもつ同時信頼区間は, 次のように与えられる.

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) \pm t_{\max \cdot c} \sqrt{d_{ik} \mathbf{a}' S \mathbf{a}}], \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, i=1, \dots, k-1.$$

ここで $t_{\max \cdot c}^2$ は, $T_{\max \cdot c}^2$ 統計量の上側 100α % 点であり, 保守的な同時信頼区間は次のように予想される (Seo (1995)).

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) \pm t_c \sqrt{d_{ik} \mathbf{a}' S \mathbf{a}}], \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, i=1, \dots, k-1. \quad (7)$$

ここで $t_c = t_c(\alpha; p, k, \nu, V_1)$ は $V = V_1$ のときの $T_{\max, c}$ 統計量の上側 100α %点であり, V_1 は $d_{ij} = d_{ik} + d_{jk}$, $1 \leq i < j \leq k-1$ を満たす行列である. この予想は $k=3$ の場合で, Seo (1995) で肯定的に証明されているが, $k \geq 4$ では未解決な問題として残されている.

対照比較の場合, $t = t_c^* = t_c^2/\nu$, $B = D \equiv \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^k : \mathbf{d} = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_k, i = 1, \dots, k-1\}$ とおくことによって, (4) の被覆確率 $Q(t_c^*, V, D)$ は (7) の被覆確率と一致することがわかる. また, 定理 2.2 より, 確率 $Q(t_c^*, V, D)$ を次のように書くことができる.

$$Q(t_c^*, V, D) = E_L[\Pr\{(\mathbf{Y}\boldsymbol{\gamma})'L^{-1}\mathbf{Y}\boldsymbol{\gamma} \leq t_c^* \text{ for any } \boldsymbol{\gamma} \in \Gamma\}],$$

ただし, $\Gamma = \{\boldsymbol{\gamma}; \boldsymbol{\gamma} = (\mathbf{d}'\mathbf{V}\mathbf{d})^{-1/2}\mathbf{D}\mathbf{d}, \mathbf{d} \in D\}$ である.

さらに, $D = \{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_m\}$ によって張られる空間の次元を 2 とすると, 定理 2.3 より確率 $Q(t_c^*, V, D)$ は

$$Q(t_c^*, V, D) = E_{L,R}\left[\Pr\left\{\sum_{i=1}^p \frac{r_i^2}{l_i} \cos^2(\theta_i - \beta_j) \leq t_c^* \text{ for any } j = 1, 2\right\}\right]$$

と表される.

ここで, $Q(t_c^*, V, D)$ に関連して, 任意の $0 = \beta_1 \leq \beta_2 \leq \pi$, $t_c^* > 0$ に対して, 次の確率

$$G(\beta_1, \beta_2) = \Pr\left\{\sum_{i=1}^p \frac{r_i^2}{l_i} \cos^2(\theta_i - \beta_j) \leq t_c^* \text{ for any } j = 1, 2\right\} \quad (8)$$

を考える. このとき確率 (8) は任意の $0 = \beta_1 \leq \beta_2 \leq \pi$ に対して, $\beta_2 - \beta_1 = \pi/2$ のとき最小になることがわかる. よって, $\beta_2 - \beta_1 = \pi/2$ であることと, $d_{12} = d_{13} + d_{23}$ であることは同値であることより, 次の定理が成り立つ.

定理 3.1. $k=3$ のとき, $\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k)$, $i = 1, \dots, k-1$, $\forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p$ に対する (3) 式による同時信頼区間は保守的である. すなわち,

$$\Pr\{\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_k) \in [\mathbf{a}'(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) \pm t_c \sqrt{d_{ik} \mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}], \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p, i = 1, \dots, k-1\} \geq 1 - \alpha$$

このように, $k=3$ のとき, 対照比較に対する保守性の予想が理論的に成り立つことが示された. さらに, 上に述べた定理の証明の中で, 確率 (8) が最大となるのは, $\beta_1 = \beta_2$ であることより, 次の定理を得ることができる.

定理 3.2. $k=3$ のとき, 任意の正定値行列 V について次の不等式が成り立つ.

$$1 - \alpha = Q(t_c^*, V_1, D) \leq Q(t_c^*, V, D) < Q(t_c^*, V_2, D),$$

ここで $t_c^* = t_c^2(\alpha; p, k, \nu, V_1)/\nu$, $D = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^k : \mathbf{d} = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_k, i = 1, \dots, k-1\}$ であり, V_1 は $d_{12} = d_{13} + d_{23}$ を満たす行列, V_2 は $\sqrt{d_{12}} = |\sqrt{d_{13}} - \sqrt{d_{23}}|$ を満たす行列である.

対比較に対する定理 2.5 の行列 V_0 と同様に定理 3.2 の $\sqrt{d_{12}} = |\sqrt{d_{13}} - \sqrt{d_{23}}|$ を満たす行列 V_2 も正定値行列として存在せず, 半正定値行列として存在することに注意する. また, 定理 3.2 では, 対照比較の場合, 対比較の結果と異なり, $V = I$ でなく $V = V_1$ のときの統計量のパーセント点を用いる同時信頼区間が, 常に保守的な同時信頼区間を構成するというを意味している.

対比較の場合と同様に対角行列 V に対する同時信頼区間を考えると次の結果が得られる.

系 3.3. $k=3$ のとき, 任意の対角行列 V について, 次の不等式が成り立つ.

$$1-\alpha = \Pr\{\hat{T}_{\max}^2 < \hat{t}_c^2\} \leq Q(\hat{t}_c^*, V, D) < \Pr\{T_k^2 < \hat{t}_c^2\},$$

ここで $\hat{t}_c^* = \hat{t}_c^2/\nu$, \hat{t}_c^2 は系 2.6 で定義した \hat{T}_{\max}^2 の上側 $100\alpha\%$ である. また T_k^2 は, 自由度 $p, n-p+1$ の $np/(n-p+1)F_{p, n-p+1}$ 分布に従う.

さらに, この結果と系 2.6 より, $t_k^2 < \hat{t}_c^2 < t_p^2$ となることがわかる. ただし $t_k^2 = np/(n-p+1)F_{p, n-p+1}(\alpha)$ であり, $F_{p, n-p+1}(\alpha)$ は自由度 $p, n-p+1$ の F 分布の上側 $100\alpha\%$ 点である.

4. 数値実験

この節では, モンテカルロ・シミュレーションによる $T_{\max \cdot p}^2$ 統計量と $T_{\max \cdot c}^2$ 統計量の上側パーセント点と被覆確率の実験結果を与える. いくつかのパラメータに対して 1,000,000 回のモンテカルロ・シミュレーションを行った. 標本共分散行列 S は毎回独立に $N_p(\mathbf{0}, I_p)$ から $(\nu+1)$ 個の正規乱数を用いて計算している.

表 1 は, シミュレーションによって得られた $T_{\max \cdot p}^2 (= \sqrt{T_{\max \cdot p}^2})$ 統計量の上側パーセント点 $t_p(V) \equiv t_p(\alpha; p, k, \nu, V)$ と被覆確率の上限を与えている. 数値実験におけるパラメータは以下の通りである. $\alpha = 0.1, 0.05, 0.01$, $p = 1, 2, 5$, $k = 3$, $\nu = 20, 40, 60$, また行列 V として単位行列 I と, $\sqrt{d_{12}} = \sqrt{d_{13}} + \sqrt{d_{23}}$ を満たす以下のような半正定値行列

$$V_0 = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

を用いた.

行列 V_0 は半正定値行列なので, $\text{vec}(X)$ の分布は非正則, すなわち退化している. よって, 非正則な多変量正規分布の乱数を得るために, 次のような変形を考えた.

$$V_0 \otimes \Sigma = H \begin{bmatrix} D_\lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} H', \quad H = (H_1, H_2)$$

ここで H は $kp \times kp$ 直交行列, H_1 は $kp \times r$ 行列で, $H_1' H_1 = I$ を満たし, $D_\lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r)$ である. ただし, λ_i は, $V_0 \otimes \Sigma$ の固有値で, すべての $i=1, \dots, r$ について $\lambda_i > 0$ である. さらに, $D_{\sqrt{\lambda}} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_r})$ とし, $F = H_1 D_{\sqrt{\lambda}}$ とおくと, $V_0 = FF'$ が得られる. このような行列 F と $\mathbf{u} \sim N_r(\mathbf{0}, I_r)$ を用いると, $\text{vec}(X) = F\mathbf{u}$ は分散共分散行列 $V_0 \otimes \Sigma$ のランクが $r < kp$ である非正則な kp 変量正規分布に従う確率ベクトルとなる. 表 1 の V_0 の場合は, 例えば $p=1$ のとき $r=2$ で, D_λ と F はそれぞれ,

$$D_\lambda = \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix},$$

となる.

表 1 より, $V=I$ の場合の上側パーセント点 $t_p(=t_p(I))$ は常に最も大きな値をとり, V_0 の場合の上側パーセント点 $t_p(V_0)$ はそれぞれのパラメータに対して, 任意の正定値行列 V の下限の値となっていることがわかる. つまり, 対比較の場合の保守性に対する被覆確率の上限

表1 対比較に対する $T_{\max,p}$ 統計量の上側パーセント点と被覆確率の上限

p	ν	α	$t_p(\mathbf{I})$	$t_p(\mathbf{V}_0)$	$Q(t_p^*, \mathbf{V}_0, \mathbf{C})$
1	20	0.01	3.280	2.843	0.996
		0.05	2.530	2.085	0.980
		0.1	2.177	1.725	0.958
	40	0.01	3.089	2.706	0.996
		0.05	2.434	2.021	0.980
		0.1	2.113	1.684	0.959
	60	0.01	3.027	2.660	0.996
		0.05	2.403	2.000	0.981
		0.1	2.092	1.670	0.959
2	20	0.01	4.006	3.533	0.996
		0.05	3.200	2.723	0.980
		0.1	2.826	2.342	0.958
	40	0.01	3.655	3.265	0.996
		0.05	2.999	2.578	0.980
		0.1	2.678	2.239	0.959
	60	0.01	3.552	3.182	0.996
		0.05	2.936	2.532	0.981
		0.1	2.631	2.206	0.960
5	20	0.01	5.897	5.269	0.996
		0.05	4.835	4.224	0.980
		0.1	4.357	3.746	0.958
	40	0.01	4.893	4.457	0.996
		0.05	4.172	3.709	0.981
		0.1	3.826	3.344	0.960
	60	0.01	4.633	4.245	0.996
		0.05	3.994	3.570	0.981
		0.1	3.680	3.234	0.961

$Q(t_p^*, \mathbf{V}_0, \mathbf{C})$ をシミュレーションより求めることができる (表1参照). 例えば, $p=2$, $\alpha=0.1$, $\nu=20$ の場合では, 任意の正定値行列 \mathbf{V} について, $0.9 \leq Q(t_p^*, \mathbf{V}, \mathbf{C}) < 0.958$ となることを示している.

表2は, $T_{\max,c} (= \sqrt{T_{\max,c}^2})$ 統計量の上側パーセント点 $t_c(\mathbf{V}) \equiv t_c(\alpha; p, k, \nu, \mathbf{V})$ と被覆確率の上限 $Q(t_c^*, \mathbf{V}_2, \mathbf{D})$ を与えている. 数値実験に対するパラメータは以下の通りである. $\alpha=0.1, 0.05, 0.01$, $p=1, 2, 5$, $k=3$, $\nu=20, 40, 60$, また, 行列 \mathbf{V} については単位行列 \mathbf{I} と, 以下の4通りの行列において実験を行った.

$$\mathbf{V}_{11} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0.5 \\ 0 & 1 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_{21} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{V}_{12} = \begin{bmatrix} 2 & 0.5 & 1 \\ 0.5 & 2 & 1.5 \\ 1 & 1.5 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_{22} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix}.$$

表2 対照比較に対する $T_{\max, c}$ 統計量の上側パーセント点と被覆確率の上限

p	ν	α	$t_c(\mathbf{I})$	$t_c(\mathbf{V}_{11})$	$t_c(\mathbf{V}_{12})$	$t_c(\mathbf{V}_{21})$	$t_c(\mathbf{V}_{22})$	$Q(t_c^*, \mathbf{V}_{21}, \mathbb{D})$
1	20	0.01	3.125	3.145	3.146	2.845	2.845	0.995
		0.05	2.377	2.410	2.409	2.086	2.086	0.974
		0.1	2.026	2.064	2.064	1.724	1.724	0.948
	40	0.01	2.951	2.969	2.967	2.705	2.705	0.995
		0.05	2.292	2.321	2.321	2.021	2.021	0.975
		0.1	1.970	2.005	2.006	1.684	1.684	0.948
	60	0.01	2.898	2.913	2.913	2.659	2.659	0.995
		0.05	2.266	2.292	2.291	2.000	2.000	0.975
		0.1	1.951	1.986	1.986	1.671	1.671	0.948
2	20	0.01	3.837	3.858	3.858	3.533	3.533	0.995
		0.05	3.035	3.068	3.068	2.723	2.723	0.974
		0.1	2.661	2.701	2.701	2.342	2.342	0.948
	40	0.01	3.516	3.531	3.531	3.264	3.264	0.995
		0.05	2.853	2.877	2.878	2.577	2.577	0.974
		0.1	2.529	2.561	2.561	2.239	2.239	0.948
	60	0.01	3.421	3.435	3.436	3.184	3.184	0.995
		0.05	2.798	2.820	2.820	2.532	2.532	0.975
		0.1	2.488	2.518	2.518	2.207	2.207	0.948
5	20	0.01	5.672	5.702	5.701	5.270	5.270	0.995
		0.05	4.621	4.660	4.661	4.223	4.223	0.974
		0.1	4.147	4.193	4.193	3.745	3.745	0.948
	40	0.01	4.735	4.751	4.751	4.457	4.457	0.995
		0.05	4.011	4.037	4.037	3.710	3.710	0.975
		0.1	3.661	3.694	3.694	3.345	3.345	0.948
	60	0.01	4.496	4.505	4.506	4.244	4.244	0.995
		0.05	3.847	3.869	3.869	3.571	3.571	0.976
		0.1	3.528	3.556	3.557	3.235	3.235	0.948

$\mathbf{V}_{11}, \mathbf{V}_{12}$ は, $d_{12}=d_{13}+d_{23}$ を満たす正定値行列の 1 例であり, $\mathbf{V}_{21}, \mathbf{V}_{22}$ は, $\sqrt{d_{12}} = |\sqrt{d_{13}} - \sqrt{d_{23}}|$ を満たす半正定値行列の 1 例となっている. \mathbf{V}_{21} の場合は, 例えば $p=1$ のとき, $t_c(\mathbf{V}_{21})$ を求める際には, $r=2$ となり, \mathbf{D}_λ と \mathbf{B} はそれぞれ次のように得られる.

$$\mathbf{D}_\lambda = \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{bmatrix}$$

表 2 より, $\mathbf{V}_{11}, \mathbf{V}_{12}$ の場合の上側パーセント点は同じ ($t_c(\mathbf{V}_{11})=t_c(\mathbf{V}_{12})$) で, かつ常に最も大きな値をとり, $\mathbf{V}_{21}, \mathbf{V}_{22}$ の場合の上側パーセント点も同じ値 ($t_c(\mathbf{V}_{21})=t_c(\mathbf{V}_{22})$) をとり, それぞれのパラメータに対して, 任意の正定値行列 \mathbf{V} の下限の値となっていることがわかる. また, 対比較の場合と同様に, 対照比較の場合の保守性に対する被覆確率の上限 $Q(t_c^*, \mathbf{V}, \mathbb{D})$ が与えられる (表 2 参照). 例えば, $\alpha=0.1, \nu=20$ の場合では, 任意の正定値行列 \mathbf{V} について, $0.9 \leq Q(t_c^*, \mathbf{V}, \mathbb{D}) < 0.948$ となることを示している.

表 3 は, 行列 \mathbf{V} が対角行列の場合の $T_{\max, p}$ 統計量の上側パーセント点 $t_p(\mathbf{I})$ と, 系 2.6 で述べた \tilde{T}_{\max} の上側パーセント点 $\tilde{t}_c, \Pr\{\tilde{T}_{\max}^2 < t_p^2(\mathbf{I})\}$ の値, T_k 統計量の上側パーセント点 t_k , お

表3 対角行列 V における上側パーセント点 t_c と t_k および被覆確率の上限

p	ν	α	$t_p(\mathbf{I})$	\tilde{t}_c	$\Pr\{\tilde{T}_{\max}^2 < t_p^2(\mathbf{I})\}$	t_k	$\Pr\{T_k^2 < \tilde{t}_c^2\}$
1	20	0.01	3.280	3.149	0.993	2.845	0.995
		0.05	2.530	2.411	0.961	2.086	0.974
		0.1	2.177	2.065	0.920	1.725	0.948
	40	0.01	3.089	2.969	0.993	2.704	0.995
		0.05	2.434	2.321	0.962	2.021	0.975
		0.1	2.113	2.005	0.920	1.684	0.948
	60	0.01	3.027	2.913	0.993	2.660	0.995
		0.05	2.403	2.291	0.962	2.000	0.975
		0.1	2.092	1.985	0.921	1.671	0.948
2	20	0.01	4.006	3.860	0.993	3.532	0.995
		0.05	3.200	3.068	0.961	2.723	0.974
		0.1	2.826	2.701	0.921	2.342	0.948
	40	0.01	3.655	3.533	0.993	3.264	0.995
		0.05	2.999	2.879	0.962	2.577	0.975
		0.1	2.678	2.562	0.922	2.239	0.948
	60	0.01	3.552	3.434	0.993	3.184	0.995
		0.05	2.936	2.820	0.962	2.532	0.975
		0.1	2.631	2.519	0.922	2.207	0.948
5	20	0.01	5.897	5.700	0.993	5.266	0.995
		0.05	4.835	4.661	0.962	4.222	0.974
		0.1	4.357	4.193	0.921	3.745	0.948
	40	0.01	4.893	4.751	0.993	4.456	0.995
		0.05	4.172	4.035	0.963	3.710	0.975
		0.1	3.826	3.693	0.923	3.345	0.948
	60	0.01	4.633	4.506	0.993	4.245	0.995
		0.05	3.994	3.869	0.963	3.570	0.975
		0.1	3.680	3.557	0.923	3.235	0.949

よび, $\Pr\{T_k^2 < \tilde{t}_c^2\}$ の値を与えている. 表3より保守性の程度の上限が数値的にみることができ.

表全体を通して被覆確率のとり得る範囲は p に依存しないことがわかる. さらに, 被覆確率のとり得る範囲は ν の値が大きくなるにつれて, 大きくなる傾向があることもわかる. このように, 多変量 Tukey-Kramer 型多重比較法を用いる際に保守性の程度を把握しておくことは, 役立つ情報として参考になるであろう.

謝辞

本論文の作成にあたり, 査読者から有益なコメントをいただき, ここに心より感謝の意を表します.

参考文献

- Brown, L. D. (1984). A note on the Tukey-Kramer procedure for pairwise comparisons of correlated means, in *Design of Experiments: Ranking and Selection* (Essays in Honor of Robert E. Bechhofer), eds. T. J. Santner and A. C. Tamhane. New York: Marcel Dekker, 1-6.

- Hayter, A. J. (1984). A proof of the conjecture that the Tukey-Kramer multiple comparisons procedure is conservative, *Ann. Statist.*, **12**, 61-75.
- Hayter, A. J. (1989). Pairwise comparisons of generally correlated means, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **84**, 208-213.
- Kramer, C. Y. (1956). Extension of multiple range tests to group means with unequal number of replications, *Biometrics*, **12**, 307-310.
- Kramer, C. Y. (1957). Extension of multiple range tests to group correlated adjusted means, *Biometrics*, **13**, 13-18.
- Hochberg, Y. (1974). The distribution of the range in general unbalanced models, *The Amer. Statist.*, **28**, 137-138.
- Okamoto, N. (2005). A modified second order Bonferroni approximation in elliptical populations with unequal sample sizes, *SUT J. Math.*, to appear.
- Okamoto, N. and Seo, T. (2004). Pairwise multiple comparisons of mean vectors under elliptical populations with unequal sample sizes, *J. Japanese Soc. Comp. Statist.*, **17**, 49-66.
- Seo, T. (1995). Simultaneous confidence procedures for multiple comparisons of mean vectors in multivariate normal populations, *Hiroshima Math. J.*, **25**, 387-422.
- Seo, T. (1996). A note on the conservative multivariate Tukey-Kramer multiple comparison procedure, *Amer. J. Math. Manage. Sci.*, **16**, 251-266.
- Seo, T. (2002). The effects of nonnormality on the upper percentiles of T_{\max}^2 statistics in elliptical distributions, *J. Japan Statist. Soc.*, **32**, 57-76.
- Seo, T., Mano, S. and Fujikoshi, Y. (1994). A generalized Tukey conjecture for multiple comparisons among mean vectors, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **89**, 676-679.
- Seo, T. and Siotani, M. (1992). The multivariate Studentized range and its upper percentiles, *J. Japan Statist. Soc.*, **22**, 123-137.
- Siotani, M. (1959). On the extreme value of the generalized distances of the individual points in the multivariate normal sample, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **10**, 183-208.
- Siotani, M., Hayakawa, T. and Fujikoshi, Y. (1985). *Modern Multivariate Analysis : A Graduate Course and Handbook*, American Sciences Press, Ohio.
- Somerville, P. N. (1993). On the conservatism of the Tukey-Kramer multiple comparison procedure. *Statist. Prob. Lett.*, **16**, 343-345.
- Spurner, J. D. and Isham, S. P. (1985). Exact simultaneous confidence intervals for pairwise comparisons of three normal means, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **80**, 438-442.
- Uusipaikka, E. (1985). Exact simultaneous confidence intervals for multiple comparisons among three or four mean values, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **80**, 196-201.