追加データによる仮説診断のベイズ予測法

中央大学　柳本 武美

0. 序

Cornfield (1966) は、科学的推論についての困難の一つとして、仮説検定の適用に関してついたデータの解析が不可能な不条理を指摘をしている。その上で、著者は Bayes 法の利用を主張している。直ぐに分かることであるが、どんな手法も相互に理解しあうことは論理的にあり得ない。どちらの主張もそれなりに妥当性がある一方で、論理的に完全に背反しているからである。お互いに完全に相手を無視し合っているのが現状である。報告者は、提案法を含めて対峙する具体的な手法の比較を通じて、この問題についての貢献を企図している。

1. 既存の方法

問題を簡単にするために、分散が 1 と既知の正規母集団を仮定してその平均値の片側検定を主として扱う。仮説は $\mathrm{H}_0 : \mu = \mu_0, \mathrm{H}_1 : \mu > \mu_0$ とする。問題は二つの試験を想定している。前の試験の観測値は $\boldsymbol{y} = (y_1, \ldots, y_m)$ であり、その後の試験の観測値は $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ とする。初めは有意でなかったから、水準を α とすると $\sqrt{m}(\bar{y} - \mu_0) \leq z_\alpha$ が成り立っていた。後の試験結果を解析する既存の方法として、以下の 3 つがある。ここで $(n+m)\bar{z} = n\bar{x} + m\bar{y}$ とする。

1）解析しない (水準遵守)

2）$\sqrt{n+m}(\bar{z} - \mu_0) > z_\alpha$ の場合に帰無仮説を棄却する (併合法)

3）$\sqrt{n}(\bar{x} - \mu_0) > z_\alpha$ の場合に帰無仮説を棄却する (分割法)。

序の文中の統計家は、検定では予め水準を定めて議論するから、既に一度検定した以上後から追加したデータを解析することは出来ないとする。この考えは、逐次検定での水準の野放図な inflation を防ぐために厳格に守るべきとされて、多くの研究者の支持を得ている。具体的な手順として、α spending function の議論が展開されている。

一方で大多数の研究者は、新しい発見をすることに熱心で、形式主義のような禁欲的な論理は排除する。素朴に科学的に考えると前のデータと後のデータには違いがないから、データを併合して検定するのがごく自然と見なして、併合法を得る。別の考え方として、新しい観測値を全く別の観測として、過去の観察とは分割して解析することが考えられて分割法を得る。多くの研究者は科学的推論を素朴に考えるから、併合法に馴染みやすい。しかし、素朴な推論方式は古くて未熟な科学観であり厳密な推論には耐えられないことについては、多くの指摘を受けている通りである。

2. 提案法とその導出

本報告では、前節の方法に代えて

4）$\sqrt{n}(\bar{z} - \mu_0) > z_\alpha$ の場合に帰無仮説が誤りと診断する

ここで、棄却の用語を用いないのは、検定の論理の枠組みに入らないことを意識しているためである。形式的に見れば、併合法と分割の法の折衷案に見えるが、その導出は全く違う。

標本密度 $p(\boldsymbol{x};\theta), \boldsymbol{x} \in R^n) = \prod p(x_i;\theta)$ に対して、事前密度を

$$\pi(\theta) \propto \prod p(y_i;\, \theta)$$

と仮定する。ロスを $\mathrm{KL}(p(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{u};\,\theta))$ としたとき、Bayes リスクを最小にする予測分布を $p_e(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x})$ と書く。この予測分布から、適当な $b(\theta)$ に対して、θ の密度 $\pi_e(\theta|\,\boldsymbol{x}) \propto \exp(\mathrm{KL}(p_e(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{u};\,\theta)))b(\theta)$ を導入する。検定量に対応する統計量を

$$\mathrm{sgn}(\theta - \theta_0)\sqrt{\mathrm{KL}(p_e(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{u};\,\theta))}$$

として、分布 $\pi_e(\theta|\,\boldsymbol{x})$ の上側 α 点を診断基準とする（Yanagimoto and Ohnishi, 2008）。特に、標本密度関数が指数分布族に属していて、θ が canonical parameter であれば

$$p(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x}) \,=\, p(\boldsymbol{u};\,\hat{\theta})\,\text{with}\ \hat{\theta}\ \text{being the posterior mean}$$

と書ける。我々は正規分布を仮定しているので、$b(\theta)$ は定数が適当であり、計算に困難は無くて上記の規準が導出される。

上の導出から、提案法は原理的にほぼ全ての標本密度に対して診断基準が導出できることが分かる。なお、Bayes 予測理論では通常双対なロス $\mathrm{KL}(p(\boldsymbol{u};\,\theta), p(\boldsymbol{u}|\,\boldsymbol{x}))$ が使われていることに注意する。一般の α-divergence に対して予測分布の議論が展開できる (Corcuera and Giummole, 1999) が、尤度比との関連を考慮するとこのロスでは扱いにくい。

3. 提案法の性能

ここでは提案法と分割法の比較の予備的な結果を示す。簡単のために、$n = m$ とする。代表的な対立仮説の値を μ_1 として、試験計画のための検出力をこの対立仮説 H_1 の下で第２種の過誤を β とする。従って、$z_\beta = \Phi(z_\alpha - \sqrt{n}(\mu_1 - \mu_0))$ が成り立つ。

記号 $P(R_i \otimes R_0^c|\,\mathrm{H}_j),\ i\,=\,3,\,4,\ j\,=\,0,\,1$ により、仮説 H_j の下で前の検定が有意でなく、後の検定（診断で）帰無仮説が棄却（あるいは否定と診断）される確率とする。分割法では、$\mathrm{P}(R_3 \otimes R_0^c|\,\mathrm{H}_0) = \alpha(1-\alpha)$, $\mathrm{P}(R_3 \otimes R_0^c|\,\mathrm{H}_1) = \beta(1-\beta)$ となる。一方、提案法では

$$\mathrm{P}(R_4 \otimes R_0^c|\,\mathrm{H}_0) = 1 - \alpha\, -\, \frac{(1-\alpha)^2 + \Phi(\sqrt{2}z_\alpha)}{2}$$

and

$$\mathrm{P}(R_4 \otimes R_0^c\,|\,\mathrm{H}_1) = \beta\, -\, \frac{\beta^2 + \Phi(\sqrt{2}z_{1-\beta})}{2}.$$

となることが得られる。特に、$\alpha\,=\,0.05$ で $\beta\,=\,0.2$ の場合にこれらの確率を計算すると各々 .0475, .16, .00375 and .122 と計算される。提案法の結果を検定の言葉で述べると、第１種の過誤の超過は分割法よりも遥かに小さいが、検出力は大きくは劣らないことが分かる。例えば、FDR (Benjamini and Hochberg, 1995) の観点からも良い性能である。

References

Benjamini, Y. and Hochberg, Y. (1995). Controlling the false discovery rate: a practical and powerful approach to multiple testing *J. Roy. Statist. Soc. B* **57**, 289-300.

Cornfield, J. (1966). Sequential trials, sequential analysis and the likelihood principle. Ann. Statist., 29, 18-23.

Corcuera, J. M. and Giummole F. (1999). A generalized Bayes rule for prediction, *Scand. J. Statist.*, **26**, 265-279.

Yanagimoto, T. and Ohnishi, T. (2008). Predictive credible region for Bayesian diagnosis of a hypothesis with applications. Manuscript.