岡山大学環境理工学部研究報告
第4巻，第1号，pp.19-35，1999年2月

等式制約を含む統計モデルにおける局所影響の評価

張　方紅*，森　裕一†，田中　豊‡

Assessment of Local Influence in Statistical Modelling with Equality Constraints

F. H. Zhang*, Y. Mori†, Y. Tanaka‡

(Received November 20 , 1998)

Influence analysis in the sense of Cook (1986)'s local influence is derived for statistical modelling with equality constraints. It is a supplement to Tanaka and Zhang (1998) and its formulation is an extension of that of Kwan and Fung (1998) so that it can deal with the influence on an arbitrary subset of parameters. As a special case the influence in principal component analysis is discussed and a numerical example is shown. The numerical results are compared with those by Zhang et al. (1998), in which local influence is evaluated by using the perturbation theory of eigenvalue problems, and the relationship is discussed with the influence functions derived by Tanaka and Watadani (1992).

Keywords: Cook's local influence, equality constraints, principal component analysis, subsets of parameters

1 はじめに

Cook (1986) はモデルへのより一般的な意味での摂動を表す摂動パラメータを定義し，モデルパラメータの摂動パラメータに関する偏微分 (モデルパラメータの偏微分と呼ぶことにする) を用いて摂動の効果を評価している。Cook の local influence にもとづく感度分析については, Lawrance (1991), Wang and Lee (1996), Shi (1997), Kwan and Fung (1998)，Tanaka

*岡山大学大学院自然科学研究科
†岡山理科大学総合情報学部
‡岡山大学環境理工学部

and Zhang (1998), Zhang et al. (1998) などが回帰モデルから多変量解析モデルに至る研究を行っている。

モデルパラメータの偏微分は，固有値問題の摂動論を利用して計算できる場合があるが，一般的に，陰関数定理を利用して陰関数の微分より得られる。Shi (1997) は，主成分分析において，固有値問題の摂動論を利用して修正した Cook の local influence を評価している。Tanaka and Zhang (1998) は定式化の中に出てくるモデルパラメータの偏微分の部分をどのように求めるかには触れずに，Cook の local influence について定式化を行っている。Zhang et al. (1998) は，固有値問題の摂動論を利用してモデルパラメータの偏微分を計算して，Tanaka and Zhang (1998) の定式化により主成分分析の感度分析を行っている。一方，Wang and Lee (1996) と Kwan and Fung (1998) の定式化は，陰関数定理を利用してモデルパラメータの偏微分を計算している。

ところで，統計モデルにおける制約条件には，興味のあるパラメータ (それへの影響を評価したいパラメータ) だけに関係する制約がある場合とない場合がある。例として，因子分析と主成分分析について考えよう。

- 因子分析は，次のような共分散行列 Σ を分解するモデルとして記述することできる：

$$\Sigma = \Lambda\Lambda^T + \Psi.$$

ここで，Λ は $p \times k$ 因子負荷行列で，Ψ は独自分散の対角行列である。因子分析においていわゆる回転の不定性が存在するが，それを解消するため，通常次のような $k(k-1)$ 個の等式制約

$$\Lambda^T\Psi^{-1}\Lambda = \text{diagonal} \tag{1.1}$$

が課せられる。部分パラメータ Λ または Ψ だけに興味がある場合，制約条件 (1.1) は Λ と Ψ 両方に関係していることに注意されたい。

- 主成分分析は，次のように共分散行列 Σ を分解するモデルとして記述することできる：

$$\Sigma = \Gamma\Lambda\Gamma^T. \tag{1.2}$$

ただし，$\Gamma = (\boldsymbol{\gamma}_1, \cdots, \boldsymbol{\gamma}_p)$ は固有ベクトル $\boldsymbol{\gamma}_1, \cdots, \boldsymbol{\gamma}_p$ を列ベクトルとする $p \times p$ 行列，Λ は固有値 $\lambda_1, \cdots, \lambda_p$ を対角要素にもつ対角行列である。ここには通常次の制約が利用されている：

$$\Gamma^T\Gamma = I. \tag{1.3}$$

部分パラメータ，例えば，$\boldsymbol{\gamma}_1$ に興味がある場合を考えると，制約条件 (1.3) のうち，興味のあるパラメータ $\boldsymbol{\gamma}_1$ だけに関係している条件 $\boldsymbol{\gamma}_1^T\boldsymbol{\gamma}_1 = 1$ が存在する。

等式制約を含む統計モデルにおける Cook の local influence については，Tanaka and Zhang (投稿中) が，すべてのパラメータに興味がある場合と任意の部分パラメータに興味がある場合について Cook の local influence を求める定式化を与えている。また，Wang and Lee (1996) は，因子分析を例として，等式制約条件を含むモデルにおけるすべてのパラメータに興味がある場合の Cook の local influence の定式化を行っている。また，Kwan and Fung (1998) は，因子分析を例に，すべてのパラメータと部分パラメータに興味がある場合の定式化を行っている。しかし，Kwan and Fung (1998) の定式化は特殊な部分パラメータにのみ適用可能であり，例えば，主成分分析の部分パラメータ γ_1 に興味がある場合などには適用できない。

本論文では，等式制約を含む統計モデルにおいて，任意の部分パラメータに適用できる形への Kwan and Fung (1998) の定式化の拡張について，Tanaka and Zhang (1998) の結果の概要を示しながら，そこで議論し残した部分，モデルパラメータの偏微分を陰関数定理を利用して計算する部分について補足を行う。得られた定式化を主成分分析へ適用し，数値例を示す。この結果を固有値問題の摂動論を利用した Zhang et al. (1998) の結果と比較することと，Tanaka and Watadani (1992) により求められた影響関数との関係を示すことを行う。

2　等式制約条件を含むモデルにおける Cook の local influence

2.1　一般理論

$\boldsymbol{\theta}$ は $m \times 1$ パラメータベクトルで，$\boldsymbol{\theta} \in R^m$, $L(\boldsymbol{\theta})$ は $\boldsymbol{\theta}$ の対数尤度関数とする。$g(\boldsymbol{\theta}) = -2n^{-1}L(\boldsymbol{\theta})$ と定義しておくと，$\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ は制約つき最尤推定量 (RMLE) で，r 個の制約条件 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\theta}) = (h_1(\boldsymbol{\theta}), \cdots, h_r(\boldsymbol{\theta}))^T = \mathbf{0}$ のもとで $L(\boldsymbol{\theta})$ を最大化，または $g(\boldsymbol{\theta})$ を最小化することにより得られる。Lagrange 乗数法を用い，Lagrange 関数を

$$G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu}) = g(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{h}^T\boldsymbol{\nu}$$

と定義すると，

$$\left.\frac{\partial G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})}{\partial(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T}\right|_{(\tilde{\boldsymbol{\theta}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}})} = \mathbf{0}$$

となる。ただし，$\boldsymbol{\nu}$ は Lagrange 乗数ベクトルである。$n \times 1$ ベクトル $\boldsymbol{w} \in \Omega$ (Ω: R^n の開部分集合) を導入し，モデルへの摂動を表す (Cook, 1986)。$L(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w})$ を摂動後の対数尤度関数とし，$g(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}) = -2n^{-1}L(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w})$ と定義する。非摂動状態を $\boldsymbol{w}_0$ ($\boldsymbol{w}_0 \in \Omega$ とする) で表し，$L(\boldsymbol{\theta}) = L(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}_0)$ とする。ここで，摂動は制約条件に及ばないと仮定する。摂動後の Lagrange 関数を

$$G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu}|\boldsymbol{w}) = g(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}) + \boldsymbol{h}^T\boldsymbol{\nu}$$

と定義すると，

$$\left.\frac{\partial G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu}|\boldsymbol{w})}{\partial(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T}\right|_{(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{w}})} = \mathbf{0} \tag{2.1}$$

となる，ただし，$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{w}}$ は摂動後の RMLE である。

ここで，2 つの場合に分け，Cook の local influence を評価する。

(i) すべてのパラメータに興味がある場合

尤度距離を

$$\begin{aligned} D(\boldsymbol{w}) &= 2[L(\tilde{\boldsymbol{\theta}}|\boldsymbol{w}_0) - L(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}|\boldsymbol{w}_0)] \\ &= -n[g(\tilde{\boldsymbol{\theta}}|\boldsymbol{w}_0) - g(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}|\boldsymbol{w}_0)] \end{aligned}$$

と定義する。Cook (1986) は $(n+1) \times 1$ ベクトルの影響グラフ

$$\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{w}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w} \\ D(\boldsymbol{w}) \end{pmatrix}$$

を定義し，摂動の情報を示す方法として，$\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{w})$ の $\boldsymbol{w}_0$ における法曲率が最大となる方向 $\boldsymbol{d}_{max}$ を影響最大の方向と考え，$\boldsymbol{d}_{max}$の絶対値の大きい要素に対応する個体を影響の大きい観測値の集合 (influential subset) とみなすことを提案した。Wang and Lee (1996) により，$\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{w})$ の法曲率は，摂動 $\boldsymbol{w}$ が制約条件 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\theta})$ に影響しない場合，

$$\begin{aligned} C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}) &= |\boldsymbol{d}^T \ddot{D} \boldsymbol{d}|_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{w}_0} \\ &= n \left| \boldsymbol{d}^T \left(\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}^T}{\partial \boldsymbol{w}} \right) G_{\boldsymbol{\theta\theta}} \left(\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}}{\partial \boldsymbol{w}^T} \right) \boldsymbol{d} \right|_{\boldsymbol{w} = \boldsymbol{w}_0} \end{aligned} \tag{2.2}$$

になることがわかっている。ただし，$\ddot{D} = \partial^2 D(\boldsymbol{w}) / \partial \boldsymbol{w} \partial \boldsymbol{w}^T$, $G_{\boldsymbol{\theta\theta}} = \partial^2 G / \partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^T$ である。$\partial \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}} \big/ \partial \boldsymbol{w}^T$ が固有値問題の摂動論などの方法で直接計算できる場合，(2.2) を利用すれば，Cook の local influence が評価できる。一般に，$\partial \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}} \big/ \partial \boldsymbol{w}^T$ は，陰関数定理を利用して，決定方程式の組 (2.1) を $\boldsymbol{w}^T$ に関して微分すれば得られる。すなわち，$\ddot{G}$ を G の $(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T$ に関する 2 階微分とし，

$$\ddot{G} = \begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta\theta}} & G_{\boldsymbol{\theta\nu}} \\ G_{\boldsymbol{\nu\theta}} & G_{\boldsymbol{\nu\nu}} \end{pmatrix}, \qquad \ddot{G}^{-1} = \begin{pmatrix} G^{\boldsymbol{\theta\theta}} & G^{\boldsymbol{\theta\nu}} \\ G^{\boldsymbol{\nu\theta}} & G^{\boldsymbol{\nu\nu}} \end{pmatrix}$$

を分割 $(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T$ に対応させ，

$$\Delta_{\boldsymbol{\theta}} = \left. \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu}|\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{w}^T} \right|_{\boldsymbol{w} = \boldsymbol{w}_0}$$

とすると，

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}}{\partial \boldsymbol{w}^T} = -G^{\boldsymbol{\theta\theta}} \Delta_{\boldsymbol{\theta}} \tag{2.3}$$

となる。$G_{\boldsymbol{\theta\theta}}$ が $G^{\boldsymbol{\theta\theta}}$ の 1 つの一般化逆行列であることに注意すれば，法曲率は

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}) = n \left| \boldsymbol{d}^T \Delta_{\boldsymbol{\theta}}^T G^{\boldsymbol{\theta\theta}} \Delta_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{d} \right| \tag{2.4}$$

と導かれる (Kwan and Fung, 1998)。これより，最大法曲率 $C_{max}(\boldsymbol{\theta})$ と診断統計量 $\boldsymbol{d}_{max}$ は，固有値問題

$$\left\{ n\Delta_{\boldsymbol{\theta}}^T G^{\boldsymbol{\theta\theta}} \Delta_{\boldsymbol{\theta}} - \lambda I_n \right\} \boldsymbol{d} = 0 \tag{2.5}$$

を解くことにより得られる最大固有値 λ_{max} とこれに対応する固有ベクトル $\boldsymbol{d}_{max}$ になる。

(ii) 部分パラメータに興味がある場合

Tanaka and Zhang (1998) は影響関数にもとづく接近法と Cook の local influence にもとづく接近法の関係を示すため，$\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}} \big/ \partial \boldsymbol{w}^T$ の計算に触れず，部分パラメータに興味がある場合の Cook の local influence の定式化を行っている。それは次の通りである。

パラメータを $\boldsymbol{\theta}^T = (\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T)$ と分割し，$\boldsymbol{\theta}_1$ だけに興味がある場合を考える。制約条件は $\boldsymbol{h}^T = (\boldsymbol{h}_2^T, \boldsymbol{h}_1^T)$ に分割する。$\boldsymbol{h}_1$ はパラメータ $\boldsymbol{\theta}_1$ だけに関係する制約条件で，$\boldsymbol{\theta}_2$ に関係していないものとする。$\boldsymbol{h}_2$ はそれ以外の制約条件である ($\boldsymbol{\theta}_2$ だけあるいは $\boldsymbol{\theta}_2$ と $\boldsymbol{\theta}_1$ の両方に関係する制約条件)。これに対応して，Lagrange 乗数を $\boldsymbol{\nu}^T = (\boldsymbol{\nu}_2^T, \boldsymbol{\nu}_1^T)$ と分割する。尤度距離を

$$\begin{aligned} D_s(\boldsymbol{w}) &= 2\left[L(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1, \boldsymbol{\theta}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1)|\boldsymbol{w}_0) - L(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}}, \boldsymbol{\theta}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}})|\boldsymbol{w}_0)\right] \\ &= -n\left[g(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1, \boldsymbol{\theta}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1)|\boldsymbol{w}_0) - g(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}}, \boldsymbol{\theta}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}})|\boldsymbol{w}_0)\right] \end{aligned}$$

と定義する。ただし，関数 $\boldsymbol{\theta}_2(\boldsymbol{\theta}_1)$ は，固定的な $\boldsymbol{\theta}_1$ に対して，

$$\frac{\partial G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})}{\partial(\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T)^T} = 0$$

より得られる。$\boldsymbol{h}_1$ はパラメータ $\boldsymbol{\theta}_2$ に関係していないから，$G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_1} = \partial \boldsymbol{h}_1^T / \partial \boldsymbol{\theta}_2 = 0$ となり，このことに注意すれば，$(\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T, \boldsymbol{\nu}_1^T)^T$ のような分割に対応して $\ddot{G}$ は

$$\ddot{G} = \begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\nu}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\nu}_1} \\ G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_2} & 0 \\ G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 & 0 \\ G_{\boldsymbol{\nu}_1\boldsymbol{\theta}_1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

のように分割できる。制約条件 $(\boldsymbol{h}_2^T, \boldsymbol{h}_1^T)$ の $(\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T)^T$ に関する微分を

$$\frac{\partial \boldsymbol{h}^T}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{h}_2^T}{\partial \boldsymbol{\theta}_1} & \dfrac{\partial \boldsymbol{h}_1^T}{\partial \boldsymbol{\theta}_1} \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{h}_2^T}{\partial \boldsymbol{\theta}_2} & \dfrac{\partial \boldsymbol{h}_1^T}{\partial \boldsymbol{\theta}_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{2\boldsymbol{\theta}_1} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ H_{2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 \end{pmatrix}$$

とし，$(\boldsymbol{\theta}_1^T, (\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T), \boldsymbol{\nu}_1^T)^T$ のような分割に対応して $\ddot{G}$ を

$$\ddot{G} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ Q_{12}^T & Q_{22} & 0 \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

のように分割する。ただし，

$$Q_{11} = G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_1}, \qquad Q_{12} = \begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\nu}_2} \end{pmatrix},$$

$$Q_{22} = \begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_2} \\ G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 \end{pmatrix}, \qquad H_{1\boldsymbol{\theta}_1} = G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\nu}_1}$$

である。法曲率は

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1) = n\left|\boldsymbol{d}^T\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]^T Q_{11\cdot2}\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]\boldsymbol{d}\right| \tag{2.6}$$

となる (Tanaka and Zhang, 1998)。ただし，$Q_{11\cdot2} = Q_{11} - Q_{12}Q_{22}^{-1}Q_{21}$ である。

我々は，Appendix で示しているように，陰関数定理を利用して $\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}\big/\partial\boldsymbol{w}^T$ を計算する。分割 $(\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T)^T$ に対応させて

$$Q_{22}^{-1} = \begin{pmatrix} Q_{22}^{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} & Q_{22}^{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_2} \\ Q_{22}^{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_2} & Q_{22}^{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\nu}_2} \end{pmatrix}$$

と表せば，法曲率は

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1) = n\left|\boldsymbol{d}^T\Delta_{\boldsymbol{\theta}}^T\left(G^{\boldsymbol{\theta\theta}} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Q_{22}^{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} \end{bmatrix}\right)\Delta_{\boldsymbol{\theta}}\boldsymbol{d}\right| \tag{2.7}$$

になる。C_{max}, d_{max} を求める固有値問題は

$$\left\{\Delta_{\boldsymbol{\theta}}^T\left(G^{\boldsymbol{\theta\theta}} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Q_{22}^{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} \end{bmatrix}\right)\Delta_{\boldsymbol{\theta}} - \lambda I\right\}\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0} \tag{2.8}$$

となる。

ところで，Kwan and Fung (1998) により導かれた定式化には，行列 B^{-1} ($\boldsymbol{\nu} = (\boldsymbol{\nu}_1^T, \boldsymbol{\nu}_2^T)^T$ とすると，B は G の $(\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T$ に関する 2 階微分) が利用されている。主成分分析の場合，$\boldsymbol{\theta}_2$ に関係していない制約条件 $\boldsymbol{h}_1$ が存在するが，$G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_1} = \partial\boldsymbol{h}_1^T/\partial\boldsymbol{\theta}_2 = 0, G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\nu}_1} = G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\nu}_2} = 0$ であるから，

$$B = \begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_2} \\ 0 & 0 & 0 \\ G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となり，B が退化行列となる。すなわち，主成分分析の場合，制約条件 $\boldsymbol{h}_1$ を無視するのは適切ではないので，彼らの式 (6)(Kwan and Fung, 1998, P.37) は利用できなくなる。我々は，B の代わりに非退化行列 Q_{22} を利用しているので，$\boldsymbol{\gamma}_1$ のような部分パラメータだけに興味がある場合に計算ができない Kwan and Fung (1998) の定式化と異なり，主成分分析のような場合も計算が可能である。この我々の定式化は，因子分析の場合で，Λ または Ψ だけに興味があるような場合も計算可能である。それは，$\boldsymbol{h}_1$ と $\boldsymbol{\nu}_1$ がないので，Q_{22} および式 (2.7) は，それぞれ Kwan and Fung (1998) の B と (6) に相当する。

2.2 主成分分析への応用

式 (2.2) と (2.6) は，$\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}/\partial\boldsymbol{w}^T$ が直接計算できる場合，すべてのパラメータに興味がある場合および部分パラメータに興味がある場合の Cook の local influence を提供する。Zhang et al. (1998) は，主成分分析の場合について，固有値問題の摂動論を利用して，(2.2)，(2.6) よりすべての固有値・固有ベクトル，あるいは部分固有値・固有ベクトルの様々な組み合わせについて法曲率を求めている。一方，式 (2.4) と (2.7) は，一般的な等式制約を含むモデルにおいて，$\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}/\partial\boldsymbol{w}^T$ が直接計算しにくいときも含めて Cook の local influence の算出が可能である。ここでは，このことを主成分分析を例にして確認しおく。

$\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ は互いに独立の n 個の p 変量確率ベクトルで，$\boldsymbol{x}_i \sim N(\boldsymbol{\mu},\Sigma),\ n>p$ とする。個体に対する重みを表す摂動を考え，$\boldsymbol{w}_0$ から $\boldsymbol{w}$ に，或いは個体の分散を

$$\begin{aligned}\{V(\boldsymbol{x}_i)=\Sigma,\ i=1,\ldots,n\} &\rightarrow \{V(\boldsymbol{x}_i)=w_i^{*\,-1}\Sigma,\ i=1,\ldots,n\},\\ w_i^* &= nw_i/\sum_i w_i\end{aligned} \tag{2.9}$$

のように変化させる。(2.9) の形の重みを利用するのは，次節で述べる影響関数と対応させるためである。摂動後，個体 $\boldsymbol{x}_i$ は $N(\boldsymbol{\mu},\ w_i^{*\,-1}\Sigma),\ i=1,\ldots,n$ に従う。(1.2) の Σ のスペクトル分解を利用すると，$\boldsymbol{\theta}=(\Lambda,\Gamma)$ の間に，次の $p(p+1)/2$ 個の制約条件

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\theta}) = (\boldsymbol{\gamma}_1^T\boldsymbol{\gamma}_1-1,\ 2\boldsymbol{\gamma}_1^T\boldsymbol{\gamma}_2,\cdots,2\boldsymbol{\gamma}_1^T\boldsymbol{\gamma}_p;\ \boldsymbol{\gamma}_2^T\boldsymbol{\gamma}_2-1,\ 2\boldsymbol{\gamma}_2^T\boldsymbol{\gamma}_3,\cdots,\ 2\boldsymbol{\gamma}_2^T\boldsymbol{\gamma}_p;\cdots;\boldsymbol{\gamma}_p^T\boldsymbol{\gamma}_p-1) = 0$$

が存在する。摂動後，$g(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w})$ は

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}) &= -\frac{2}{n}L(\boldsymbol{\theta})\\ &= \sum_{i=1}^{p}\left(\log\lambda_i+\frac{\boldsymbol{\gamma}_i^T S_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{\gamma}_i}{\lambda_i}\right)-\frac{p}{n}\sum_{i=1}^{n}\log w_i^* - p\log 2\pi\end{aligned}$$

となる。ただし，

$$S_{\boldsymbol{w}} = (\sum_{i=1}^n w_i)^{-1}\sum_{i=1}^n w_i(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{w}})(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{w}})^T,\quad \bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{w}} = (\sum_{i=1}^n w_i)^{-1}\sum_{i=1}^n w_i\boldsymbol{x}_i$$

である。$g(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w})$ は，$\boldsymbol{w}$ を $\boldsymbol{w}_0=(1,\cdots,1)^T$ でおきかえると $g(\boldsymbol{\theta})$ になる。$\tilde{\boldsymbol{\theta}},\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}$ は，それぞれ，$S_{\boldsymbol{w}_0}$ と $S_{\boldsymbol{w}}$ の固有値・固有ベクトルになる (Flury, 1988)。$\boldsymbol{\gamma}_1$に興味ある場合，$\ddot{G}$ と $\Delta_{\boldsymbol{\theta}}$ の具体的な要素はそれぞれ表 1 と表 2 のようになる。これらより，必要な行列を計算し，Cook の local influence にもとづく接近法の診断統計量を求める固有値問題 (2.5) と (2.8) を解くことができる。部分パラメータに興味がある場合は，(2.8) 式の $\ddot{G}$ と $\Delta_{\boldsymbol{\theta}}$ の要素を興味のある部分パラメータに対応させて配置すればよい。

$\ddot{G}$	λ_1	$\cdots$	λ_p	$\boldsymbol{\gamma}_1'$	$\cdots$	$\boldsymbol{\gamma}_p'$	δ_1	$\cdots$	δ_{1p}	$\cdots$	δ_p
λ_1	$\frac{1}{\lambda_1^2}$	$\cdots$	0	$-\frac{2\boldsymbol{\gamma}_1'}{\lambda_1}$	$\cdots$	$\mathbf{0}'$	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
λ_p	0	$\cdots$	$\frac{1}{\lambda_p^2}$	$\mathbf{0}'$	$\cdots$	$-\frac{2\boldsymbol{\gamma}_p'}{\lambda_p}$	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0
$\boldsymbol{\gamma}_1$	$\frac{-2\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_1}$	$\cdots$	$\mathbf{0}$	$\frac{2(S-\lambda_1 I)}{\lambda_1}$	$\cdots$	0	$2\boldsymbol{\gamma}_1$	$\cdots$	$2\boldsymbol{\gamma}_p$	$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$\boldsymbol{\gamma}_p$	$\mathbf{0}$	$\cdots$	$-\frac{2\boldsymbol{\gamma}_p}{\lambda_p}$	0	$\cdots$	$\frac{2(S-\lambda_p I)}{\lambda_p}$	$\mathbf{0}$	$\cdots$	$2\boldsymbol{\gamma}_1$	$\cdots$	$2\boldsymbol{\gamma}_p$
δ_1	0	$\cdots$	0	$2\boldsymbol{\gamma}_1'$	$\cdots$	$\mathbf{0}$	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
δ_{1p}	0	$\cdots$	0	$2\boldsymbol{\gamma}_p'$	$\cdots$	$2\boldsymbol{\gamma}_1'$	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
δ_p	0	$\cdots$	0	0	$\cdots$	$2\boldsymbol{\gamma}_p'$	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0

Table 1. Second-order partial derivatives of the Lagrange function G with respect to $(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T$

$\Delta_{\boldsymbol{\theta}}$	w_1	$\cdots$	w_n
λ_1	$-\frac{\boldsymbol{\gamma}_1'\left((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_1}{n\lambda_1^2}$	$\cdots$	$-\frac{\boldsymbol{\gamma}_1'\left((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_1}{n\lambda_1^2}$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
λ_p	$-\frac{\boldsymbol{\gamma}_p'\left((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_p}{n\lambda_p^2}$	$\cdots$	$-\frac{\boldsymbol{\gamma}_p'\left((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_p}{n\lambda_p^2}$
$\boldsymbol{\gamma}_1$	$\frac{2\left((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_1}{n\lambda_1}$	$\cdots$	$\frac{2\left((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_1}{n\lambda_1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$\boldsymbol{\gamma}_p$	$\frac{2\left((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_1}{n\lambda_p}$	$\cdots$	$\frac{2\left((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\right)\boldsymbol{\gamma}_p}{n\lambda_p}$

Table 2. Quantity $\Delta_{\boldsymbol{\theta}}$ in the case of PCA

3 モデルパラメータの偏微分と影響関数の関係

等式制約を含む構造方程式モデルにおいて，Tanaka and Watadani (1992) は陰関数定理を利用して，パラメータの影響関数を求める方法を提案している。Wang and Lee (1996) は一般化最小二乗法のもとで，モデルパラメータの偏微分と影響関数の関係を示している。本節では，制約つき最尤法のもとで，両者の関係を示す。

$S = n^{-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^T$ を摂動前の経験分布関数 $\hat{F}$ のもとでの共分散行列 Σ の推定量とする。また，$\boldsymbol{s} = \mathrm{vech}(S) = (s_{11},\cdots,s_{p1};s_{22},\cdots,s_{p2};\cdots;s_{pp})$ とする。2 節で用いた

$L(\boldsymbol{\theta}), g(\boldsymbol{\theta})$, $G(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})$ を本節では，それぞれ $L(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\theta}), g(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\theta}), G(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})$ と記すると，RMLS $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ は

$$\left.\frac{\partial G(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})}{\partial(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T}\right|_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}} = \mathbf{0}$$

より得られる。

ここで，経験分布 $\hat{F}$ に対して，摂動 $\hat{F} \to \hat{F}(\varepsilon_i) = (1-\varepsilon_i)\hat{F} + \varepsilon_i \delta_{\boldsymbol{x}_i}$ を加える。ただし，$\delta_{\boldsymbol{x}_i}$ は値 $\boldsymbol{x}_i$ を確率 1 でとるような確率変数の分布関数である。Σ の推定は S から S_{ε_i} になり，S_{ε_i} にもとづくパラメータの RMLE $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\varepsilon_i}$ は

$$\left.\frac{\partial G(\boldsymbol{s}_{\varepsilon_i}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu})}{\partial(\boldsymbol{\theta}^T, \boldsymbol{\nu}^T)^T}\right|_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}} = \mathbf{0} \tag{3.1}$$

より得られる，ただし，$\boldsymbol{s}_{\varepsilon_i} = \mathrm{vech}(S_{\varepsilon_i}), S_{\varepsilon_i} = S + \varepsilon_i[(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^T - S] - \varepsilon_i^2(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^T$ である。$\boldsymbol{x}_i (i = 1, \cdots, n)$ の経験影響関数を

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_i^{(1)} = \left.\frac{d\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\varepsilon_i}}{d\varepsilon_i}\right|_{\varepsilon_i = 0}$$

と定義する。Tanaka and Watadani (1992) に従って，(3.1) を $\varepsilon_i = 0$ に関して微分すると

$$\begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta\theta}} & G_{\boldsymbol{\theta\nu}} \\ G_{\boldsymbol{\nu\theta}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\theta}}_i^{(1)} \\ \tilde{\boldsymbol{\nu}}_i^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta_{\boldsymbol{s}} \boldsymbol{s}_i^{(1)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

となる。ただし，

$$\Delta_{\boldsymbol{s}} = \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{s}, \tilde{\boldsymbol{\theta}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}})}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{s}^T}, \quad \boldsymbol{s}_i^{(1)} = \mathrm{vech} S_i^{(1)}, \quad S_i^{(1)} = (\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^T - S$$

である。(3.2) から経験影響関数が

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_i^{(1)} = -G^{\boldsymbol{\theta\theta}} \Delta_{\boldsymbol{s}} \boldsymbol{s}_i^{(1)} \tag{3.3}$$

で与えられる。

経験影響関数と比較するため，Cook の local influence においてのモデルパラメータの偏微分を式 (2.3) の代わりに式

$$\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}}{\partial w_i} = -G^{\boldsymbol{\theta\theta}} \Delta_{\boldsymbol{s}} \dot{\boldsymbol{s}}_i \tag{3.4}$$

で表現する。ただし，

$$\dot{\boldsymbol{s}}_i = \mathrm{vech}\dot{S}_i, \quad \dot{S}_i = \left.\frac{\partial S_{\boldsymbol{w}}}{\partial w_i}\right|_{\boldsymbol{w}_0}$$

である。

特殊な分散摂動 (2.10) を加えたとき，関係式 $S_i^{(1)} = n\dot{S}_i$ が容易的にわかる (Kwan and Fung, 1998)。ゆえに，(3.3) と (3.4) から

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_i^{(1)} = n\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}/\partial w_i|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0}$$

Δ_{ε_i}	ε_1	$\cdots$	ε_n
λ_1	$-\dfrac{\boldsymbol{\gamma}_1'\big((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_1^2}$	$\cdots$	$-\dfrac{\boldsymbol{\gamma}_1'\big((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_1^2}$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
λ_p	$-\dfrac{\boldsymbol{\gamma}_p'\big((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_p}{\lambda_p^2}$	$\cdots$	$-\dfrac{\boldsymbol{\gamma}_p'\big((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_p}{\lambda_p^2}$
$\boldsymbol{\gamma}_1$	$\dfrac{2\big((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_1}$	$\cdots$	$\dfrac{2\big((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$\boldsymbol{\gamma}_p$	$\dfrac{2\big((\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_1}{\lambda_p}$	$\cdots$	$\dfrac{2\big((\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}})^T-S\big)\boldsymbol{\gamma}_p}{\lambda_p}$

Table 3. Quantity Δ_{ε_i} in the case of PCA

固有値	82.3082683	6.7389072	0.4478332	0.2455163
固有ベクトル	0.955785266	0.28801387	0.05901046	0.006348304
	0.293681185	-0.94519099	-0.14154620	-0.018166560
	0.014971757	0.15381233	-0.97857851	-0.136021005
	0.001316516	0.00194084	-0.13735552	0.990519036
寄与率	0.917180597	0.075093245	0.004990312	0.002735846

Table 4. Eigenvalues and eigenvectors of the covariance matrix (Kendall, 1975)

が成り立つことがわかる。

注：式 (3.3) (Tanaka and Watadani, 1992) には共分散行列 S が含まれているので，計算は不便といわれている (Wang and Lee, 1996) ので，(3.3) の代わりに，$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_i^{(1)} = -G^{\boldsymbol{\theta\theta}}\Delta_{\varepsilon_i}$，$\Delta_{\varepsilon_i} = \partial^2 G(\boldsymbol{s}_{\varepsilon_i}, \tilde{\boldsymbol{\theta}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}})/\partial\boldsymbol{\theta}\partial\varepsilon_i\big|_{\varepsilon_i=0}$ を利用した方が便利になる。例えば，主成分分析の場合，Δ_{ε_i} の具体的な要素は容易に得られ表 3 のようになる。さらに，2 節の表 1 を利用すれば，影響関数が計算できる。

4　数値例

我々の方法を Kendall (1975) の Soil composition データの主成分分析に適用する。Soil データは 20 個体で，変数は Kendall に従い，第 1 変数を除いた 4 変数である。このデータを用いて，Zhang et al. (1998) は，主成分分析における固有値問題の摂動論にもとづいたモデルパラメータの偏微分 $\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{\boldsymbol{w}}/\partial\boldsymbol{w}^T$ を求めている。

固有値と固有ベクトルは表 4 の通りで，主成分数は 2 とする。

$(\boldsymbol{\gamma}_1^T, \boldsymbol{\gamma}_2^T)$ に興味がある場合を例に，我々の方法を利用して，Cook の local influence にもとづく影響分析を行うため，固有値問題 (2.8) を解く。非零固有値は $\tau_1 = 4.202545 > \tau_2 = 3.663575 > \tau_3 = 1.307665 > \tau_4 = 0.7707062 > \tau_5 = 0.4234361$ となり，Cook の最大法曲率は

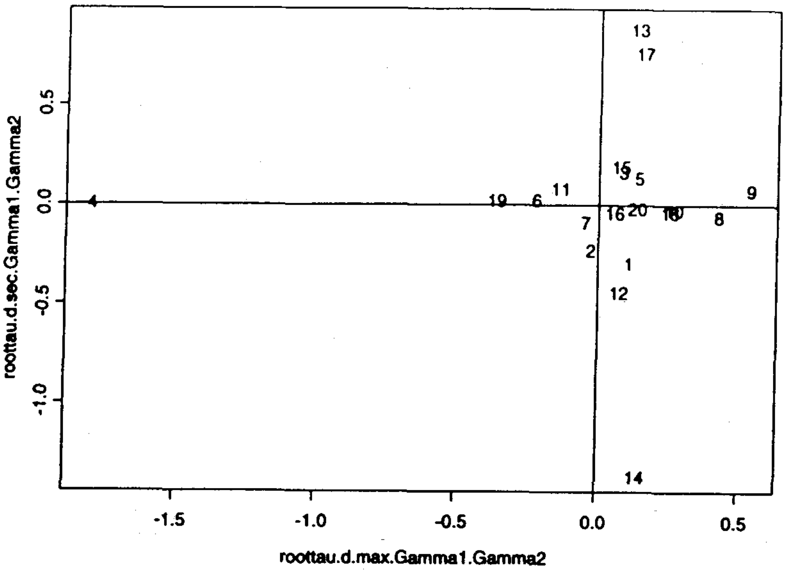

Fig. 1 Scatter diagram of the elements of $(\sqrt{\tau_1}\boldsymbol{d}_1, \sqrt{\tau_2}\boldsymbol{d}_2)$

$C_{max} = \tau_1 = 4.202545$ となる。これらの固有値に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_5$ が得られ，$\boldsymbol{d}_{max}$ は $\boldsymbol{d}_1$ となる。Cook (1986) は，影響の大きい観測値を探索するため，$\boldsymbol{d}_{max}$ のインデックスプロットを利用している。Tanaka (1994) や Tanaka and Zhang (1998) は Cook の local influence にもとづく接近法と影響関数にもとづく接近法が基本的に同じ結果を得ることを示している。Tanaka et al. (1990) や Tanaka (1994) により提案されている方法から，散布図 $(\sqrt{\tau_1}\boldsymbol{d}_1, \sqrt{\tau_2}\boldsymbol{d}_2)$ を描くと，図 1 のようになる。これを見ると，原点から遠く離れた観測値として #4 と #14 が確認できる。この 2 つは単独で影響の大きい観測値とみなすことができる。また，お互い近くにある観測値 #13 と #17 は，原点から離れてしかも類似的な方向を持っていることから，$\{\#13, \#17\}$ は同時に影響の大きい観測値集合の候補と考えられる。

次に，Zhang et al (1998) の手法と我々の手法から得られた診断統計量を比較してみる。図 2 は両手法から選られた $\boldsymbol{d}_{max}$ の散布図である。これを見ると，すべての点は，直線 $y = x$ 上に並んでおり，両手法の結果が等しいことがわかり，他の診断統計量も一致することが同様に確認できる。

以上をもとに実際の影響を確認する。見つかった #4, #14, $\{\#13, \#17\}$ を実際に削除して，主成分分析を行ってみる。図 3〜5 は，それぞれ #4, #14, $\{\#13, \#17\}$ を削除した前と後の第 1,2 負荷 $(\sqrt{\lambda_1}\gamma_1, \sqrt{\lambda_2}\gamma_2)$ の布置の変化を示したものである。それを見ると，変化しているが，解釈に影響するほどではなかった。

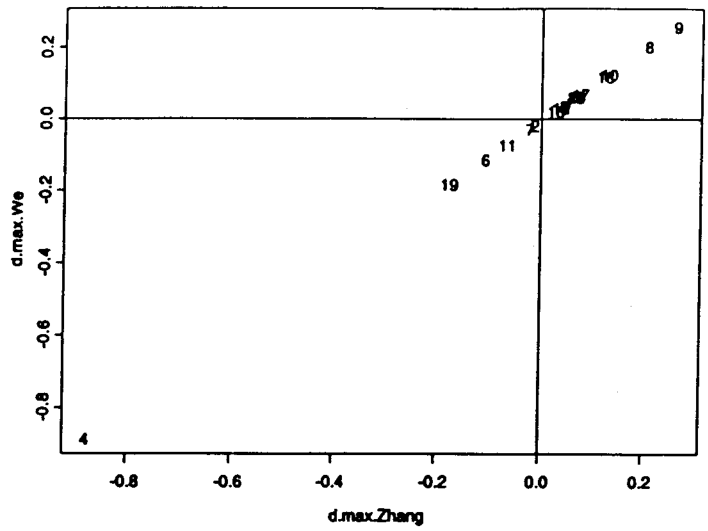

Fig. 2 Scatter diagram of the elements of d_{max} obtained by Zhang et al.(1998) and those obtained by our method

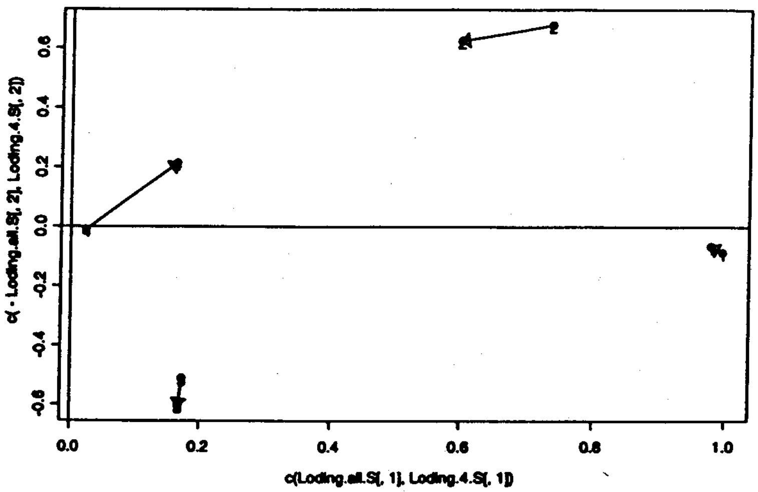

Fig. 3 Changes of the principal component loadings due to omitting individual #4

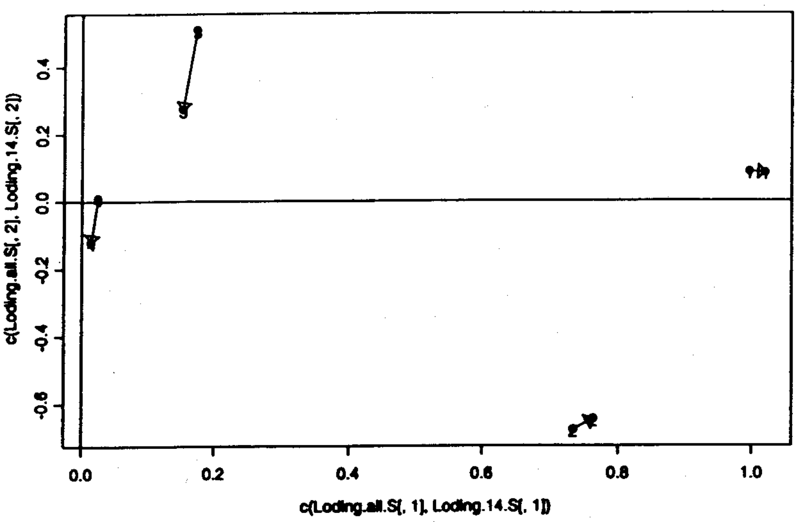

Fig. 4 Changes of the principal component loadings due to omitting individual #14

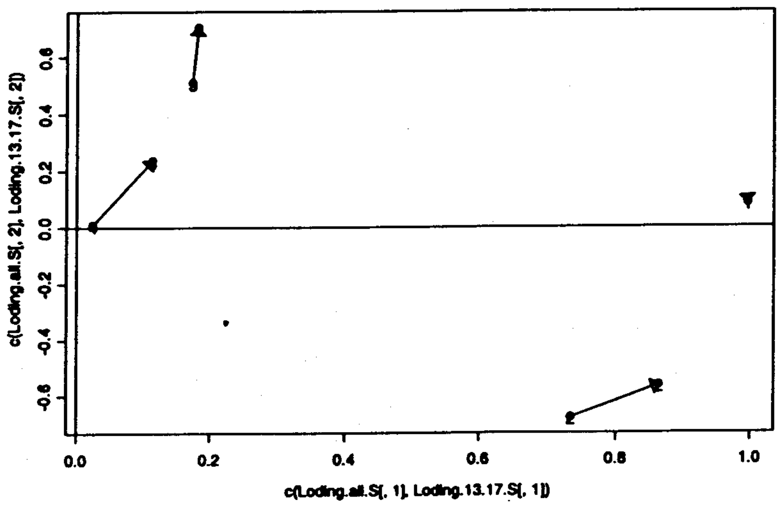

Fig. 5 Changes of the principal component loadings due to omitting individuals {#13, #17}

Appendix

定理 $\boldsymbol{\theta}^T = (\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2)^T$ のうち，$\boldsymbol{\theta}_1$ だけに興味があるとき，法曲率は

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1) = n\left|\boldsymbol{d}^T\Delta_{\boldsymbol{\theta}}^T\left(G^{\boldsymbol{\theta\theta}} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Q_{22}^{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} \end{bmatrix}\right)\Delta_{\boldsymbol{\theta}}\boldsymbol{d}\right| \tag{A0}$$

となる。

証明 $\boldsymbol{\theta}_1$ だけに興味があるとき，$\boldsymbol{\theta}_2$ は局外パラメータで，$\boldsymbol{\theta}_1$ を固定し，制約条件 $\boldsymbol{h}_2 = \mathbf{0}$ のもとで，$g(\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2)$ を最小化することにより得られる。Lagrange 乗数法を利用すれば，$\boldsymbol{\theta}_2$ は

$$\frac{\partial G(\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \boldsymbol{\nu}_2, \boldsymbol{\nu}_1)}{\partial(\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T)^T} = \mathbf{0} \tag{A1}$$

より得られる。$(A1)$ を $\boldsymbol{\theta}_1$ に関して微分し，$\boldsymbol{\theta}_2$ と $\boldsymbol{\nu}_2$ が $\boldsymbol{\theta}_1$ の関数であることに注意すれば，関係式

$$Q_{22}\left(\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2^T}{\partial\boldsymbol{\theta}_1}\right]_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1} \quad \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\nu}}_2^T}{\partial\boldsymbol{\theta}_1}\right]_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1}\right)^T = -Q_{21}$$

が得られる。ただし，Q_{22} は，G の $(\boldsymbol{\theta}_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T)^T$ に関する 2 階微分である。$\boldsymbol{\theta}_2$ は $\boldsymbol{\theta}_1$ が固定されるときの RMLE であるから，Q_{22} が非退化行列である。したがって，

$$\left(\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2^T}{\partial\boldsymbol{\theta}_1}\right]_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1} \quad \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\nu}}_2^T}{\partial\boldsymbol{\theta}_1}\right]_{\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1}\right)^T = -Q_{22}^{-1}Q_{21}$$

である。法曲率を求める式は (2.2) から

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1) = n\left|\boldsymbol{d}^T\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]^T\left(I \quad \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right]^T\right)G_{\boldsymbol{\theta\theta}}\left(\begin{array}{c} I \\ \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right]\end{array}\right)\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]\boldsymbol{d}\right|$$

となる。さらに，

$$\frac{\partial\boldsymbol{h}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\theta}_2(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}))}{\partial\boldsymbol{w}^T} = \frac{\partial\boldsymbol{h}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T} + \frac{\partial\boldsymbol{h}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_2^T}\frac{\partial\boldsymbol{\theta}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T} = \mathbf{0}$$

であるので，$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1)$ は

$$\begin{aligned} & n\left|\boldsymbol{d}^T\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]^T\left(I\ \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right]^T\ \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\nu}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right]^T\right)\begin{pmatrix} G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\nu}_2} \\ G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\theta}_2} & G_{\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{\nu}_2} \\ G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_1} & G_{\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\theta}_2} & 0 \end{pmatrix}\left(\begin{array}{c} I \\ \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right] \\ \left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\nu}}_2}{\partial\boldsymbol{\theta}_1^T}\right]\end{array}\right)\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]\boldsymbol{d}\right| \\ & = n\left|\boldsymbol{d}^T\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]^T Q_{11\cdot2}\left[\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_1\boldsymbol{w}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right]\boldsymbol{d}\right| \end{aligned} \tag{A2}$$

となる (Tanaka and Zhang, 1998)。

次に，$\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}}/\partial\boldsymbol{w}^T$ を求める。$\boldsymbol{\phi}^T = (\boldsymbol{\theta}_1^T, (\theta_2^T, \boldsymbol{\nu}_2^T), \boldsymbol{\nu}_1^T)^T$ とすると，

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{1\boldsymbol{w}}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = (I \quad 0 \quad 0)\left(\dfrac{\partial\tilde{\boldsymbol{\phi}}_{\boldsymbol{w}}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right)\Bigg|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} \\ \left.\dfrac{\partial\tilde{\boldsymbol{\phi}}}{\partial\boldsymbol{w}^T}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = -\ddot{G}^{-1}\Delta_{\boldsymbol{\phi}} \end{cases} \tag{A3}$$

となる。ただし，

$$\Delta_{\boldsymbol{\phi}} = \left.\frac{\partial^2 G(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{w})}{\partial\boldsymbol{\phi}\partial\boldsymbol{w}^T}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = \begin{pmatrix} \Delta_{\boldsymbol{\theta}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{A4}$$

である。(A3) を (A2) に代入すると，

$$C_{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{\theta}_1) = n\left|\boldsymbol{d}^T\Delta_{\boldsymbol{\phi}}^T\ddot{G}^{-1}\begin{pmatrix} Q_{11\cdot2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ddot{G}^{-1}\Delta_{\boldsymbol{\phi}}\boldsymbol{d}\right| \tag{A5}$$

になる。2 節より，

$$\ddot{G} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ Q_{12}^T & Q_{22} & 0 \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

であるので，$\ddot{G}^{-1}$ を次のようにして求める。まず，$\ddot{G}$ を対角化すると，

$$\ddot{G} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & -Q_{12}Q_{22}^{-1} & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ Q_{12}^T & Q_{22} & 0 \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ -Q_{22}^{-1}Q_{21} & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11\cdot2} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} & 0 \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q_{22} \end{pmatrix}$$

となるので，

$$\ddot{G}^{-1} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ -Q_{22}^{-1}Q_{21} & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11\cdot2} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 \end{pmatrix}^{-1} & 0 \\ & 0 \\ 0 \quad 0 & Q_{22}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \\ 0 & I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & -Q_{12}Q_{22}^{-1} & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} V_{11} & -V_{11}Q_{12}Q_{22}^{-1} & V_{12} \\ -Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{11} & Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{11}Q_{12}Q_{22}^{-1} + Q_{22}^{-1} & -Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{12} \\ V_{12}^T & -V_{12}^TQ_{12}Q_{22}^{-1} & V_{22} \end{pmatrix}$$

が得られる。ただし,

$$\begin{pmatrix} Q_{11\cdot2} & H_{1\boldsymbol{\theta}_1} \\ H_{1\boldsymbol{\theta}_1}^T & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{12}^T & V_{22} \end{pmatrix}$$

である。よって,

$$\ddot{G}^{-1}\begin{pmatrix} Q_{11\cdot2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ddot{G}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} V_{11} & -V_{11}Q_{12}Q_{22}^{-1} & V_{11}Q_{11\cdot2}V_{12} \\ -Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{11} & Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{11}Q_{12}Q_{22}^{-1} & -Q_{22}^{-1}Q_{21}V_{11}Q_{11\cdot2}V_{12} \\ V_{12}^TQ_{11\cdot2}V_{11} & -V_{12}^TQ_{11\cdot2}V_{11}Q_{12}Q_{22}^{-1} & V_{12}^TQ_{11\cdot2}V_{12} \end{pmatrix} \quad (A6)$$

となる。($A6$) を ($A5$) に代入し,($A4$) に注意すると,($A0$) が得られる。

参考文献

Cook, R. D. (1986). Assessment of local influence. *J. R. Statist. Soc.*, **B48**, 133-169.

Flury, B. (1988). *Common Principal Components and Related Multivariate Models.* John Wiley & Sons, Inc., 13-17.

Hampel, F. R. (1974). The influence curve and its role in robust estimation. *J. Amer. Statist. Assoc.*, **69**, 383-393.

Kwan, C. W. and Fung, W. K. (1998). Assessing local influence for specific restricted likelihood: Application to factor analysis. *Psychometrika*, **63**, 35-46.

Lawrance, A. J. (1991). Local and deletion influence. In W. Stahel and S. Weisberg (Eds.), *Directions in Robust Statistics and Diagnostics*, Part I, Berlin: Springer-Verlag, 141-158.

Shi, L. (1997). Local influence in principal component analysis. *Biometrika*, **84**, 175-186.

Tanaka, Y. (1994). Recent advance in sensitivity analysis in multivariate methods. *J. Jpn. Soc. Comp. Statist.*, **7**, 1-25.

Tanaka, Y., and Watadani, S. (1992). Sensitivity analysis in covariance structure analysis with equality constraints. *Comm. Statist.*, **A21**, 1501-1515.

Tanaka, Y., Castaño-Tostado, E. and Odaka, Y. (1990). Sensitivity analyses in factor analysis: Methods and software. In K. Momirovic and V. Milder (Eds.), *Compstat 1990*, Heidelberg: Physica-Verlag, 205-210.

Tanaka, Y. and Zhang, F. H. (1998). R-mode and Q-mode Influence Analyses in Statistical Modelling: Relationship between Influence Function Approach and Local Influence Approach. Submitted for publication in *Comp. Statist. & Data Analysis.*

Wang, S. J. and Lee S. Y. (1996). Sensitivity analysis of structural equation models with equality function constraints. *Comp. Statist. & Data Analysis*, **23**, 239-256.

Zhang, F. H., Tanaka, Y. and Mori, Y (1998). Local Influence in Principal Component Analysis. Submitted for publication in *Psychometrika*.