

多項式回帰モデルにおける
正值性の検定に関する研究

加藤 直広
博士(統計科学)

総合研究大学院大学
複合科学研究科
統計科学専攻

平成23年度
2011年

多項式回帰モデルにおける
正值性の検定に関する研究

加藤 直広
博士(統計科学)

総合研究大学院大学
複合科学研究科
統計科学専攻

平成23年度
2011年

目次

第 1 章	序章	5
1.1	研究の歴史	5
1.2	本論文の概要	6
1.3	本論文の構成	9
第 2 章	正值性検定とチューブ法	11
2.1	正值性の検定に関する問題設定	11
2.2	尤度比統計量の導出	13
2.3	チューブ法の概要	16
2.4	同時信頼区間への応用	20
第 3 章	チェビシェフ系	23
3.1	チェビシェフ系の定義	23
3.2	チェビシェフ系に対する非負多項式の性質	25
3.3	モーメント錐のパラメーター表示	28
第 4 章	2 次多項式に対する正值性を対立仮説とする検定	35
4.1	$\partial K[2, T], \partial K^*[2, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示	35
4.2	$\text{Vol}_1(\partial K[2, T] \cap \mathbb{S}^2), \text{Vol}_1^*(\partial K^*[2, T] \cap (\mathbb{S}^2)^*)$ の数値積分	40
4.3	射影 \hat{c}_K の数値計算	42
4.4	数値例	44
第 5 章	4 次までの多項式回帰に対する正值性を対立仮説とする検定	51
5.1	$K[n, T], K^*[n, T]$ およびそれらの境界のパラメーター表示	51
5.2	重み w_i の数値計算	56
5.3	一般の n に対する射影 \hat{c}_K の数値計算	59
5.4	単一区間の場合の数値例	61

第 6 章 今後の課題	65
参考文献	69

第 1 章

序章

1.1 研究の歴史

2つの確率変数の間の関連を調べる方法として回帰モデルが広く用いられている。ここで、あらかじめ標本に対してなんらかの情報を持っている場合、回帰式に対して制約を設けることが考えられる。

例えば薬の効能を調べる状況において、説明変数を投与する薬の量、目的変数を薬の効能とする回帰モデルを考える。この場合、説明変数が大きくなるほど目的変数が大きくなることが予測される。ここで、説明変数と目的変数のベクトルが (X_i, Y_i) , $i = 1, 2, \dots, l$ と表されているとする。ここでは特別な場合として、説明変数 X_i の取り得る値が $\{d_1, d_2, \dots, d_m \mid d_1 \leq d_2 \leq \dots \leq d_m\}$ となっている場合を考える。この標本を表すモデルの例として、目的変数をパラメーター θ_j と正規誤差の和によって表すモデルが挙げられる。ここで、 θ_j は説明変数 d_j によって定まるパラメーターとする。このとき、説明変数が大きくなるほど目的変数が大きくなるという制約は

$$\theta_1 \leq \theta_2 \leq \dots \leq \theta_m \quad (1.1)$$

と書き換えられる。ここで、パラメーターの空間は

$$\Theta = \{\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m) \mid \theta_1 \leq \theta_2 \leq \dots \leq \theta_m\}$$

となる。また、 Θ は閉凸錐になっている。

上の回帰モデルにおける θ の最尤推定量 $\hat{\theta}$ を考える。制約 (1.1) がない場合の θ の最尤推定量を $\bar{\theta}$ とすると、 $\hat{\theta}$ は $\bar{\theta}$ の Θ への射影で表されることが確認される。

ここで、制約 (1.1) の下での最尤推定量 $\hat{\theta}$ の分布について考える。 $\bar{\theta}$ が Θ に属している場合 $\hat{\theta} = \bar{\theta}$ となる。それ以外の場合 $\hat{\theta}$ は $\bar{\theta}$ の Θ への射影により表される。すなわち、 $\hat{\theta}$ は Θ の境界に属している。以上のように、 $\hat{\theta}$ は正規分布とは異なった分布に従う。

上の例のようにパラメーター空間が境界を持つ場合、通常モデルとは異なる手法が必要となる。ここで、パラメーター空間の境界は特異点と呼ばれる。また、このようなモデルは特異モデルと呼ばれる。

特異モデルにおける解析方法としてチューブ法が知られている。チューブ法は Hotelling(1939) により提案された手法である。これはもともと非線形回帰において、帰無仮説を

真の回帰関数が恒等的に 0 である

とする検定の尤度比統計量の帰無分布を得る方法として導出された。

チューブ法の応用例として、正規分布に従う確率変数 c および閉凸錐 K に対して以下の仮説を検定することが挙げられる。

帰無仮説： $c = 0$,

対立仮説： $c \in K$.

この検定の尤度比統計量の帰無分布はチューブ法により導かれる。この手法はパラメーター空間からの距離が一定値以下の集合 (チューブ) の体積を用いて尤度比統計量の帰無分布を導出することからチューブ法と呼ばれる。また、チューブ法は正規確率場の最大値の分布の導出にも応用される。チューブ法についてまとめた本として Gray(1990), Adler and Taylor(2007) および栗木, 竹村 (2008) 等がある。

1.2 本論文の概要

1.2.1 正值性の検定の理論

本論文ではチューブ法の応用例として多項式回帰モデルにおける正值性の検定を扱う。この検定は高々 n 次の多項式回帰モデルにおいて、推定された回帰曲線に基づいて、真の回帰曲線が与えられた説明変数の定義域 T 上で常に非負の値をとるか否かの検定である。ここで n は与えられた自然数である。このように常に非負の値をとる多項式は非負多項式と呼ばれる。つまり、この検定は非負多項式を対立仮説とする検定である。また、この検定に対する適合度の検定を併せて扱う。これらの検定を正值性の検定と呼ぶ。

この検定の具体例として 2 群間の比較が考えられる。2 つの群に分けられている標本が与えられていると仮定する。それぞれの群に対して多項式回帰曲線を計算することにより、それらの差が得られる。また 2 群それぞれに対して回帰曲線を計算しなくても、2 群間の差を多項式で表わすことができる。この差に対して正值性の検定を適用すると、これは一方の群の目的変数が他方の群の目的変数より常に大きいか検定することに対応する。

すなわち，2群間の多重比較となっている．多重比較とは複数の検定を同時に考えることである．このとき，通常どおり検定を行うと全体での有意水準が保たれない．この問題を解決するため多重比較が用いられている．

以下 n 次多項式をその係数ベクトルと同一視することにより， \mathbb{R}^{n+1} の要素として扱う．説明変数の定義域上で常に非負の値をとる n 次多項式の係数ベクトル全体の集合を $K[n, T]$ とすると，上の検定は回帰係数のベクトル c が $K[n, T]$ に属しているか検定することに対応する．ここで $K[n, T]$ は閉凸錐であり，非負多項式錐と呼ばれている (Karlin and Studden(1966))． $K[n, T]$ が閉凸錐であるのでチューブ法を適用することができる．

チューブ法の理論を用いることによりこの検定の尤度比統計量は c の (無制約での) 推定量 \hat{c} の $K[n, T]$ への射影 \hat{c}_K を用いて表わされる．さらに，尤度比統計量の帰無仮説の下での分布は $n + 1$ 次までの重み付きのカイ 2 乗分布で与えられることが知られている (Shapiro(1988))．これらの重みは $K[n, T]$ の境界での第 2 基本形式の積分によって与えられる (Takemura and Kuriki(2002))．一般にこの積分は数値的に不安定であり，数値計算することは困難である．

一方， $0, 1, n, n + 1$ 次の重みは第 2 基本形式を含まない比較的扱いやすい形で与えられる．この数値計算を行うためには $K[n, T]$ およびその法錐 $K[n, T]^*$ ，またそれぞれの境界 $\partial K[n, T]$ ， $\partial K[n, T]^*$ の 1 対 1 のパラメーター表示が必要となる．ここで， $K[n, T]^*$ はモーメント錐と呼ばれる．また本論文ではチューブ法の理論およびその由来についても解説する．

説明変数の定義域 T として複数区間を考える．これは特別な場合として，単一区間や孤立点の集合を含んでいる．本論文では特別な場合として以下の 2 つの場合を扱う．

1. 多項式の次数 n が 2 の場合 (加藤，栗木 (2012))
2. 多項式の次数 n が 4 以下かつ説明変数の定義域が単一区間の場合 (Kato and Kuriki(2011))

また最終章で今後の課題として，より一般的な場合に対する展望を述べる．

説明変数の定義域が複数区間の場合にはこれらのパラメーター表示は導出されていない．そこで，2 次の多項式の場合に対する $\partial K[n, T]$ ， $\partial K[n, T]^*$ の 1 対 1 のパラメーター表示の導出を行う．これらのパラメーター表示を用いることにより重みの数値計算の具体的な方法を導出する．

一方 T が単一区間の場合，チェビシェフ系の一般論を用いて非負多項式錐およびモーメント錐のパラメーター表示が与えられている．ここで，チェビシェフ系とは多項式の

一般化である。 t に対する多項式は $f(t)$ は以下により定義される。

$$f(t) = \sum_{i=0}^n a_i t^i.$$

ある条件を満たす関数 $u_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) を用いることによって多項式を以下のように一般化する。

$$f(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t).$$

このとき、 $u_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) はチェビシェフ系という。本論文ではチェビシェフ系の定義を紹介する。さらに、その性質をいくつか紹介する。この議論を用いることにより、 T が単一区間の場合に $K[n, T]$ および $K[n, T]^*$ の1対1のパラメーター表示が与えられる (Karlin and Studden(1966))。このパラメーター表示より $\partial K[n, T]$, $\partial K[n, T]^*$ の(測度0を除いた)1対1のパラメーター表示が導かれる。これらのパラメーター表示を用いることにより重みの数値計算の具体的な方法を導出する。

さらに、数値例として実データに対して正值性の検定を行う。また、尤度比統計量の計算法について扱う。正值性の検定に対する尤度比統計量は係数ベクトル \hat{c} の非負多項式錐 $K[n, T]$ への射影 \hat{c}_K の2乗距離により与えられる。 \hat{c}_K を計算する手法として、本論文では対称錐計画と円筒代数分解を紹介する。さらにこれらの手法に適した $K[n, T]$ の別のパラメーター表記を導出する。

1.2.2 正值性の検定の応用

次に正值性の検定の応用について考える。その一例として、適合度の検定の尤度比統計量の帰無分布の応用として回帰曲線の同時信頼区間の構成を行う。同時信頼区間の構成法として、一般に Working and Hotelling(1929) の方法を用いたものが知られている。しかし、この同時信頼区間は回帰曲線の次数が1かつ説明変数の定義域が実数全体の場合において導出されたものである。よってそれ以外のモデルでは、より狭い同時信頼区間を与えることができる。例えば、Wynn and Bloomfield(1971) では2次式による回帰モデルに対する同時信頼区間を構成している。本論文ではより一般的な場合に対する同時信頼区間を導出する。この同時信頼区間は Working and Hotelling(1929) のものより狭い同時信頼区間となっている。

さらに多項式以外の曲線に対する正值性の検定を考える。例えば、チェビシェフ系による多項式の一般化が考えられる (Karlin and Studden(1966))。この場合、多項式の場合と同様の議論により正值性の検定における尤度比統計量の分布を導出することができる。

次に、成長曲線モデルに対する正值性の検定を扱う。成長曲線モデルを扱っている論文として Wishart(1938) 等がある。成長曲線モデルに対しても、多項式回帰と同様に正值性の検定を行うことができることを示す。

またモデル選択への応用を考える。モデル選択の方法として例えば AIC(詳しくは Akaike(1974) 等を参照) が知られている。AIC はパラメーターの最尤推定量の漸近正規性を用いて導出されている。一方、特異モデルに対しては最尤推定量の漸近正規性が成立しない。よって、本論文で扱うモデルに対しては AIC をそのまま適用することができない(福水, 他 (2004) 等を参照)。特異モデルに対する AIC については Anraku(1999) 等で研究されている。

1.3 本論文の構成

本論文で新たに導出する結果として以下が挙げられる。

1. $\partial K[2, T]$ および $\partial K^*[2, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示の導出
2. 尤度比統計量の帰無分布の具体的な計算法
3. \hat{c}_K の数値計算法
4. 同時信頼区間の構成

本論文の構成は以下のとおりである。2 章では多項式回帰モデルにおける非負多項式を対立仮説とする検定およびその適合度の検定を定式化する。またチューブ法の概要を解説し、それを本論文で扱う検定 (2.3) に当てはめる。また適合度の検定の応用として、回帰曲線の同時信頼区間の構成を行う。3 章ではチェビシェフ系の定義を行う。またチェビシェフ系に関する先行研究を紹介する。これらは 5 章での非負多項式錐およびモーメント錐のパラメーター表示の導出に用いられる。4 章では $n = 2$ の場合に対し $\partial K[n, T]$, $\partial K[n, T]^*$ の (測度 0 を除いた) 1 対 1 のパラメーター表示を導出し、それを用いて検定 (2.3) の尤度比統計量の帰無分布の導出を行う。また数値例として、実データに対する解析を行う。5 章では $n \leq 4$, $T = [a, b]$ に対し, $K[n, T]$, $K[n, T]^*$, $\partial K[n, T]$ および $\partial K[n, T]^*$ の (測度 0 を除いた) 1 対 1 のパラメーター表示を用いて尤度比統計量の帰無分布の導出を行う。また数値例として、実データに対する解析を行う。6 章では今後の展望としてより一般的な n, T に対する考察を行う。

第 2 章

正值性検定とチューブ法

この章では多項式回帰モデルにおける非負多項式を対立仮説とする検定およびその適合度の検定の定式化を行う。また、それらの検定に対する尤度比統計量の導出を行う。これらは正規ランダムベクトル \hat{c} の $K[n, T]$ への直交射影を用いて与えられることを示す。これらの帰無仮説の下での分布を導出するため、チューブ法の概要を紹介し本論文で扱う形に適用することを考える。また、(2.4) の検定に対する尤度比統計量の帰無仮説の下での分布が同時信頼区間に応用できることを示す。

この章の構成は以下のとおりである。2.1 節では多項式回帰モデルおよびその下での正值性の検定に対する問題設定を行う。2.2 節では検定 (2.3), (2.4) に対する尤度比統計量の導出を行う。2.3 節ではチューブ法の紹介を行う。2.4 節では $f(t; c)$ の $t \in T$ に対する凸結合の同時信頼区間の導出を行う。

2.1 正值性の検定に関する問題設定

始めに、多項式回帰モデルにおける正值性を対立仮説とする検定の定式化を行う。説明変数を t_i 、目的変数を y_i とする高々 n 次の多項式回帰モデル

$$y_i = f(t_i; c) + \varepsilon_i, \quad f(t; c) = \sum_{h=0}^n c_h t^h = c^\top \psi_n(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.1)$$

を考える。ここで $c = (c_0, c_1, \dots, c_n)^\top$, $\psi_n(t) = (1, t, \dots, t^n)^\top$ はともに $(n+1) \times 1$ 列ベクトルとする。各 i に対して ε_i はそれぞれ独立に平均 0、分散 σ^2 の正規分布に従うものとする。

本論文では、 n 次多項式 $f(t; c)$ の $t \in T$ における正值性：

$$\text{任意の } t \in T \text{ に対して } f(t; c) \geq 0 \quad (2.2)$$

を対立仮説とする検定を考える。ここで、帰無仮説を

$$\text{任意の } t \in T \text{ に対して } f(t; c) = 0$$

とする。ここで $T \subset \mathbb{R}$ は説明変数 t_i の定義域であり、複数個の区間の和集合

$$T = \bigcup_{j=1}^m [a_j, b_j]$$

の形で与えられているとする。ただし $-\infty \leq a_1 \leq b_1 < a_2 \leq \dots \leq b_{m-1} < a_m \leq b_m \leq \infty$ とし、 $a_1 = -\infty$ のときは $[a_1, b_1]$ を $(-\infty, b_1]$ 、 $b_m = \infty$ のときは $[a_m, b_m]$ を $[a_m, \infty)$ と読みかえる。この T は特別な場合として単一区間 $[a, b]$ や孤立点の集合 $\bigcup_{j=1}^m \{a_j\}$ を含んでいる。

(2.2) を満たす c の集合は以下のように表される。

$$K[n, T] = \{c \mid \text{任意の } t \in T \text{ に対して } f(t; c) \geq 0\}.$$

この $K[n, T]$ は閉凸錐であり、非負多項式錐と呼ばれている。

例えば、 $n = 2$ 、 T が有界単一区間 $[a, b]$ の場合 $K[2, T]$ は図 2.1 のように描ける。

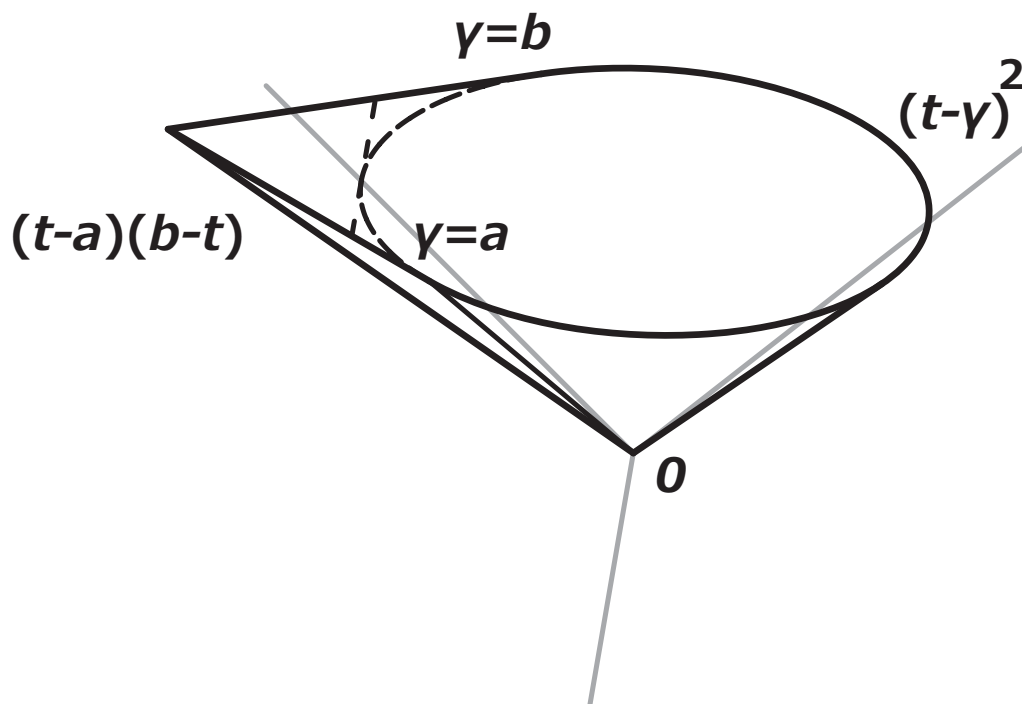


図 2.1 非負多項式錐 $K[2, [a, b]]$

$K[n, T]$ を用いて正値性を対立仮説とする検定を c に対して書き直すと以下の H_0 を帰

無仮説, H_1 を対立仮説とする検定である.

$$H_0 : c = 0, \quad H_1 : c \in K[n, T]. \quad (2.3)$$

本論文では (2.3) に対する適合度の検定を併せて扱う. このとき帰無仮説と対立仮説はそれぞれ下の H_1, H_2 で表される.

$$H_1 : c \in K[n, T], \quad H_2 : c \in \mathbb{R}^{n+1} \quad (2.4)$$

で表される.

本論文では検定 (2.3), (2.4) の特別な場合として

1. $n = 2$
2. $n \leq 4, T = [a, b]$

の 2 つの場合を扱う. また今後の課題として, より一般的な n, T の場合に対する展望を述べる.

以下 c の最小 2 乗推定量を \hat{c} と書く. また \hat{c} の共分散行列を Σ とする. ここで Σ が既知の場合 \hat{c} が, 未知の場合共分散行列の推定値 $\hat{\Sigma}$ に対して $(\hat{c}, \hat{\Sigma})$ がそれぞれ十分統計量となっている. よって, 本論文では c に対して書きなおされた形 (2.3), (2.4) を扱う.

応用上, 正值性を対立仮説とする検定は特に 2 標本問題について大きな役割を果たす. 1 群, 2 群に分割されている標本に対して多項式回帰曲線 $f(t; \hat{c}_k)$, $k = 1, 2$ がそれぞれ推定されているとする. このとき,

$$f(t; \hat{c}) = f(t; \hat{c}_2) - f(t; \hat{c}_1) \quad (2.5)$$

とすると, 検定 (2.3) は 2 群間の優越性の検定である. 特に $\bigcup_{j=1}^m \{a_j\}$ の場合, これは多重比較に対応する. また \hat{c}_K を計算せずに, 群間の差を直接計算することもできる. これについては 4.4 節で解説する.

2.2 尤度比統計量の導出

この節では検定 (2.3), (2.4) に対する尤度比統計量の導出を行う. また, 検定 (2.4) において帰無仮説 H_1 の中で $c = 0$ が最も保守的であることを証明する.

始めに正定値行列 Q に対して計量 Q による内積およびノルムを以下のように定義する.

$$\langle x, y \rangle_Q = x^\top Q y, \quad \|x\|_Q = \sqrt{\langle x, x \rangle_Q}$$

多項式回帰モデル (2.1) の下で回帰係数 c の推定量 \hat{c} は平均 c , 共分散行列 $\Sigma = \sigma^2 \Sigma_0$ の $n+1$ 次元正規分布に従う. ここで, $\Sigma_0 = \left(\sum_{i=1}^N \psi_n(t_i) \psi_n(t_i)^\top \right)^{-1}$ である.

(2.3), (2.4)における H_0, H_1 および H_2 での対数尤度を考える. 最初に, σ^2 が既知の場合を扱う. c に対する定数項を除いた (-2) 倍の対数尤度は以下のように書ける.

$$l = (\hat{c} - c)^\top \Sigma^{-1} (\hat{c} - c).$$

このとき, c の H_0, H_2 の下での最尤推定量はそれぞれ $0, \hat{c}$ である. また, ベクトル x の凸錐 K への (計量 Q による) 直交射影を

$$\Pi_Q(x|K) = \operatorname{argmin}_{c \in K} \|x - c\|_Q$$

と定義すると H_1 の下での c の最尤推定量は $\hat{c}_K := \Pi_{\Sigma^{-1}}(\hat{c}|K[n, T])$ である. 以上より H_0, H_1, H_2 の下での定数項を除いた (-2) 倍の最大対数尤度はそれぞれ以下のように書ける.

$$\begin{aligned} l_0 &= \hat{c}^\top \Sigma^{-1} \hat{c}, \\ l_1 &= (\hat{c} - \hat{c}_K)^\top \Sigma^{-1} (\hat{c} - \hat{c}_K), \\ l_2 &= 0. \end{aligned}$$

以上より次の命題が示される.

命題 1 (Shapiro(1988))

σ^2 が既知のとき, H_0 vs. H_1 , H_1 vs. H_2 の検定における尤度比統計量はそれぞれ以下で与えられる:

$$\lambda_{01} = \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2, \quad \lambda_{12} = \|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2. \quad (2.6)$$

尤度比統計量 $\lambda_{01}, \lambda_{12}$ が棄却点より大きいとき帰無仮説が棄却される. ここで, λ_{01} は

$$\langle \hat{c}_K, \hat{c} \rangle_{\Sigma^{-1}} = \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2$$

を用いて導出される.

次に, σ^2 が未知の場合を考える. ここで σ^2 の推定量を s とすると, $\nu s / \sigma^2$ は自由度 ν のカイ 2 乗分布に従う. ただし, $\nu = N - n - 1$ である. このとき定数項を除いた c, s に対する (-2) 倍の対数尤度関数は以下のように書ける.

$$l = (n+1) \log \sigma^2 + (\hat{c} - c)^\top (\sigma^2 \Sigma_0)^{-1} (\hat{c} - c) + \nu \log \sigma^2 + \frac{\nu s}{\sigma^2}.$$

これを σ^2 に関して最大化することにより σ^2 の最尤推定量 $\hat{\sigma}^2$ は

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n + \nu + 1} \left\{ (\hat{c} - c)^\top \Sigma_0^{-1} (\hat{c} - c) + \nu s \right\}$$

と書ける.

これを対数尤度関数に代入することにより定数項を除いた (-2) 倍の最大尤度は

$$(n + \nu + 1) \log \left\{ (\hat{c} - c)^\top \Sigma_0^{-1} (\hat{c} - c) + \nu s \right\}$$

と書ける. 以上より H_0, H_1, H_2 の下での定数項を除いた (-2) 倍の最大対数尤度はそれぞれ以下のように書ける.

$$\begin{aligned} l_1 &= (n + \nu + 1) \log \left\{ \hat{c}^\top \Sigma_0^{-1} \hat{c} + \nu s \right\}, \\ l_2 &= (n + \nu + 1) \log \left\{ (\hat{c} - \hat{c}_K)^\top \Sigma_0^{-1} (\hat{c} - \hat{c}_K) + \nu s \right\}, \\ l_3 &= (n + \nu + 1) \log(\nu s). \end{aligned}$$

ただし,

$$\begin{aligned} \hat{c}_K &= \Pi_{\hat{\Sigma}}(\hat{c}|K) \\ &= \operatorname{argmin}_{c \in K} \|\hat{c} - c\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}. \end{aligned}$$

これを用いると H_0 vs. H_1 の検定における尤度比統計量は以下のように書ける.

$$\log \frac{\hat{c}^\top \Sigma_0^{-1} \hat{c} + \nu s}{(\hat{c} - \hat{c}_K)^\top \Sigma_0^{-1} (\hat{c} - \hat{c}_K) + \nu s} = -\log \left\{ 1 - \frac{\|\hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2}{\|\hat{c}\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2 + \nu} \right\}.$$

よって, H_0 vs. H_1 の検定における尤度比統計量は

$$\frac{\|\hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2}{\|\hat{c}\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2 + \nu}$$

である. 同様に, H_1 vs. H_2 の検定における尤度比統計量は

$$\frac{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2}{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2 + \nu}$$

である. 以上をまとめることにより次の命題が導かれる.

命題 2 (Shapiro(1988))

σ^2 が未知のとき, H_0 vs. H_1 , H_1 vs. H_2 の検定における尤度比統計量はそれぞれ以下で与えられる:

$$\beta_{01} = \frac{\|\hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2}{\|\hat{c}\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2 + \nu}, \quad \beta_{12} = \frac{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2}{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\hat{\Sigma}^{-1}}^2 + \nu}. \quad (2.7)$$

ここで, $\hat{\Sigma} = \hat{\sigma}^2 \Sigma_0$ である.

尤度比統計量 β_{01}, β_{12} が棄却点より大きいとき帰無仮説が棄却される.

H_1 vs. H_2 の検定において帰無仮説 H_1 は複合帰無仮説となっている. 以下の命題 3 は最も保守的な場合を特定するものである. この証明は Robertson, et al.(1988) の 2.3 節と同様のものである.

命題3 H_1 vs. H_2 の検定において σ^2 が既知, 未知いずれの場合でも帰無仮説 $H_1 : c \in K$ の中で $c = 0$ の場合が最も保守的である.

(証明) 始めに σ^2 が既知の場合を考える.

$$A = \left\{ x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \min_{y \in K} \|x - y\| < d \right\}$$

に対し $\hat{c} \in A$ のとき帰無仮説 H_1 が容認される. ここで, d は有意水準に対応する定数である.

$A - c = \{x - c \mid x \in A\}$ とすると, K が凸錐なので任意の $c \in K$ に対し,

$$\begin{aligned} A - c &= \left\{ x - c \mid \min_{y \in K} \|x - y\| < d \right\} \\ &= \left\{ x \mid \min_{y \in K} \|x + c - y\| < d \right\} \\ &= \left\{ x \mid \min_{y \in K - c} \|x - y\| < d \right\} \supseteq \left\{ x \mid \min_{y \in K} \|x - y\| < d \right\} = A \end{aligned}$$

が成り立つ. よって $\hat{c} \sim N_{n+1}(c, \Sigma)$ に対し

$$\begin{aligned} P(\hat{c} \in A \mid c) &= P(\hat{c} + c \in A \mid c = 0) \\ &= P(\hat{c} \in A - c \mid c = 0) \geq P(\hat{c} \in A \mid c = 0) \end{aligned}$$

となる.

以上より $c = 0$ の場合が最も保守的である.

次に σ^2 が未知の場合を考える. このとき, 尤度比統計量 β_{12} は以下のように書ける.

$$\beta_{12} = \frac{\|\hat{c}\|_{\Sigma^{-1}}^2 - \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2}{\|\hat{c}\|_{\Sigma^{-1}}^2 - \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2 + \nu \hat{\sigma}^2 / \sigma^2} = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{12} + \nu \hat{\sigma}^2 / \sigma^2}.$$

これは λ_{12} に対する増加関数である. よって, σ^2 が既知の場合と同様に証明される. \square

2.3 チューブ法の概要

この節ではチューブ法の概要を説明する. チューブ法の一般論より (2.6) の $\lambda_{01}, \lambda_{12}$ の帰無仮説の下での分布が重み付きカイ2乗分布で表わされ, その重みが $K[n, T]$ とその法錐およびそれらの境界の体積を用いて表わされることを示す.

チューブ法はもともと正規確率場での最大値の分布として研究されてきた (栗木, 竹村 (2008) など). 始めに, 正規確率場に対するチューブ法の概要を説明する.

多様体 \tilde{M} 上で正規確率場 $X(p)$, $p \in \tilde{M}$ が与えられているとする. ここで各 $p \in \tilde{M}$ に

対し, $X(p)$ は標準正規分布に従うものとする. このとき, Adler(1990) より $X(p)$ は

$$X(p) = \sum_{i=1}^{\infty} \xi_k \psi^k(p) \quad (2.8)$$

と表される. ここで $\{\xi_k\}_{k=1}^{\infty}$ はそれぞれ独立に標準正規分布に従う. また, $X(p)$ の分散が 1 であることより

$$\sum_{i=1}^{\infty} \psi^k(p)^2 = 1$$

である.

(2.8) が n 個の和となるときに $X(p)$ の最大値の分布

$$P\left(\max_{p \in M} X(p) \geq c\right), \quad M \subset \tilde{M} \quad (2.9)$$

を求める方法としてチューブ法が導出される. ここで, M は区分的に滑らかなものとする.

以下 $\psi(M)$ を M , $\psi(\tilde{M})$ を \mathbb{S}^{n-1} と同一視する. M からの (円周上の) 距離が一定以下の集合は

$$M_\theta = \left\{x \in \mathbb{S}^{n-1} \mid \min_{y \in M} \text{dist}(x, y) \leq \theta\right\}, \quad \text{dist}(x, y) = \cos^{-1}\langle x, y \rangle.$$

と表される. これは中心 M , 半径 θ のチューブと呼ばれる. これを用いて (2.9) の分布を導出することからチューブ法と呼ばれる.

$\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ は n 次元標準正規分布に従う. ここで $\|\xi\|$ と $\zeta = \xi/\|\xi\|$ は独立であり, ζ は球面上一様分布に従う. これを用いると (2.9) は

$$\begin{aligned} P\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) &= E\left[P\left(\max_{p \in M} \langle \zeta, p \rangle \geq \frac{c}{\|\xi\|}\right)\right] \\ &= E\left[P\left(\text{dist}(\zeta, M) \leq \cos^{-1} \frac{c}{\|\xi\|} \mid \|\xi\|\right)\right] \\ &= \frac{1}{\text{Vol}(\mathbb{S}^{n-1})} E\left[\text{Vol}\left(M_{\cos^{-1} \frac{c}{\|\xi\|}}\right)\right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

と書ける. よって, チューブの体積の期待値をとることにより (2.9) の確率が計算できる. ここで, $\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle$ は (2.6) における尤度比統計量 λ_{01} と同様の形となっている. よって, (2.10) により λ_{01} の分布を導出することができる.

$\|\xi\|$ が自由度 n のカイ 2 乗分布に従うことより

$$\frac{P(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c)}{c^n e^{-c^2/2}} = \frac{1}{2(2\pi)^{n/2}} \int_0^\infty \text{Vol}\left(M_{\cos^{-1} \frac{c}{\sqrt{\eta+1}}}\right) (\eta+1)^{n/2-1} e^{-c^2\eta/2} d\eta$$

と書ける.

次にチューブ M_θ の体積について考える. q を M に含まれない \mathbb{S}^{n-1} の点とする.

$$\min_{p \in M} \text{dist}(p, q)$$

を達成する p を q の M への射影と呼ぶ. このとき $\psi = \text{dist}(p, q)$, $v = (q - p \cos \psi) / \sin \psi$ を用いて q は

$$q = p \cos \psi + v \sin \psi \quad (2.11)$$

と表される.

ψ が M により定まる定数 θ より小さいとき (2.11) のパラメーター表記が一意となることが知られている. このとき (2.11) はチューブ座標 (またはフェルミ座標) と呼ばれる.

このパラメーター表記を用いてチューブの体積を計算することができる. これが全ての θ に対して成り立つものとして (2.9) を計算する方法がチューブ法である.

特に M が凸のとき, (2.9) は重み付きのカイ 2 乗分布となる. 本論文で扱う検定はこれに対応する. このように正規ランダムベクトルの凸錐への直交射影の長さの分布の導出として多くの先行研究がある (例えば Robertson (1988) 等).

チューブ法を用いることにより $H_0 : c = 0$ の下での $\lambda_{01}, \lambda_{12}$ の分布は以下のように書ける.

$$P_{H_0}(\lambda_{01} \geq a, \lambda_{12} \geq b) = \sum_{i=0}^{n+1} w_i \bar{G}_i(a) \bar{G}_{n+1-i}(b). \quad (2.12)$$

ここで \bar{G}_i は自由度 i のカイ 2 乗分布の上側確率である. ただし $\bar{G}_0(a) = 0$ ($a \geq 0$), 1 ($a < 0$) とする.

また, $H_0 : c = 0$ の下での (2) の β_{01}, β_{12} の分布は以下のように書ける.

$$P_{H_0}(\beta_{01} \geq a, \beta_{12} \geq b) = \sum_{i=0}^{n+1} w_i \bar{B}_{\frac{i}{2}, \frac{n+1-i+\nu}{2}}(a) \bar{B}_{\frac{n+1-i}{2}, \frac{\nu}{2}}(b). \quad (2.13)$$

ただし $\bar{B}_{a,b}$ はパラメータ (a, b) のベータ分布の上側確率である. ここで (2.12) と (2.13) の w_i は同一のものである. また各 i に対し $w_i \geq 0$ であり, $\sum_{i=0}^{n+1} w_i = 1$ である. ここで $a = -\infty$ または $b = -\infty$ とすることで, $\lambda_{01}, \lambda_{12}$ の周辺分布が

$$P_{H_0}(\lambda_{01} \geq a) = \sum_{i=0}^{n+1} w_i \bar{G}_i(a), \quad (2.14)$$

$$P_{H_0}(\lambda_{12} \geq b) = \sum_{i=0}^{n+1} w_{n+1-i} \bar{G}_i(b)$$

で与えられることがわかる.

同様に β_{01}, β_{12} の周辺分布は以下で与えられる.

$$\begin{aligned} P_{H_0}(\beta_{01} \geq a) &= \sum_{i=0}^{n+1} w_i \bar{B}_{\frac{i}{2}, \frac{n+1-i+\nu}{2}}(a), \\ P_{H_0}(\beta_{12} \geq b) &= \sum_{i=0}^{n+1} w_{n+1-i} \bar{B}_{\frac{n+1-i}{2}, \frac{\nu}{2}}(b). \end{aligned} \quad (2.15)$$

区分的に滑らかな凸錐に対して, Takemura and Kuriki (1997, 2002) より w_i は $K[n, T]$ の境界での第 2 基本形式を用いた積分で表わされる. 一般に, この数値積分を行うのは容易ではない. 一方 $i = 0, 1, n, n+1$ の場合, w_i は以下のような比較的扱い易い形となる.

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= \frac{\text{Vol}_n(K[n, T] \cap \mathbb{S}^n)}{\Omega_{n+1}}, & w_n &= \frac{\text{Vol}_{n-1}(\partial K[n, T] \cap \mathbb{S}^n)}{2\Omega_n}, \\ w_1 &= \frac{\text{Vol}_{n-1}^*(\partial K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*)}{2\Omega_n}, & w_0 &= \frac{\text{Vol}_n^*(K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*)}{\Omega_{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

ここで $K^*[n, T]$ は $K[n, T]$ の法錐であり, モーメント錐

$$M[n, T] = \text{co} \left(\left\{ \psi_n(t) \mid t \in T \right\} \right)$$

の閉包により与えられる (Barvinok (2002)). ここで集合 A に対し, $\text{co}(A)$ は A の錐包を表わす. また $\partial K[n, T], \partial K^*[n, T]$ はそれぞれ $K[n, T], K^*[n, T]$ の境界を表わす.

例えば $n = 2$, T が有界単一区間 $[a, b]$ の場合 $K^*[n, T]$ は図 2.2 のように描ける.

さらに,

$$\mathbb{S}^n = \{x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|x\|_{\Sigma^{-1}} = 1\}, \quad (\mathbb{S}^n)^* = \{x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|x\|_{\Sigma} = 1\}$$

はそれぞれ計量 Σ^{-1}, Σ による n 次元単位球面である. $\text{Vol}_d, \text{Vol}_d^*$ はそれぞれ計量 Σ^{-1}, Σ による体積である. また,

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$$

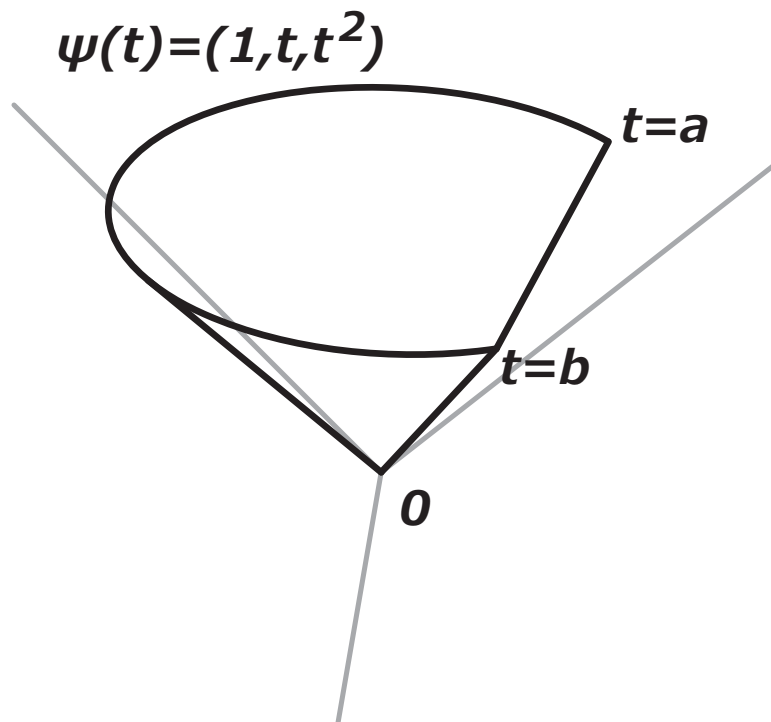
は $d-1$ 次元単位球面の体積を表わす.

さらに, ガウス・ボンネの定理より

$$\sum_{i:\text{even}} w_i = \sum_{i:\text{odd}} w_i = \frac{1}{2} \quad (2.17)$$

が成り立つ (Takemura and Kuriki (2002)).

4 章では $n = 2$ に対し, w_2, w_1 を (2.16) により数値計算し, w_3, w_0 を (2.17) により求める. 5 章では $T = [a, b], n \leq 4$ に対し w_{n+1}, w_n, w_1, w_0 を (2.16) により数値計算し, 残りの w_i を (2.17) により求める.

図 2.2 非負多項式錐 $K^*[2, [a, b]]$

2.4 同時信頼区間への応用

この節では (2.14) の λ_{12} の分布の応用として同時信頼区間の導出を行う。一般には $f(t; c)$, $t \in T$ に対して同時信頼区間を導出するが、本論文ではより一般的に $f(t; c)$ の $t \in T$ に対する凸結合に対して同時信頼区間を導出する。

一般に、多項式回帰の同時信頼区間は

$$|f(t; c) - f(t; \hat{c})| = |(c - \hat{c})^\top \psi_n(t)| \quad (2.18)$$

を各 $t \in T$ に対し同時に評価することにより導出される。

(2.18) の右辺をコーシー-シュヴァルツの不等式を用いて評価する方法が最も有名である。しかし、この不等式において等号が成立するのは

$$\{\alpha \psi_n(t) \mid t \in T, \alpha \in \mathbb{R}\}$$

が \mathbb{R}^{n+1} と一致する場合のみである。本論文で扱う多項式回帰モデル (2.1) においてこれは $n = 1$ かつ $T = \mathbb{R}$ の場合のみである (詳しくは Working and Hotelling(1929) を参照)。それ以外の n, T に対しては限定的な結果しか得られていない (Uusipaikka (1983), Wynn and Bloomfield(1971) 等)。

$\mu(dt)$ を T 上の非負の測度とする。このとき、

$$\mu[f] = \int_T f(t) \mu(dt)$$

と定義すると $\mu[\psi_n] \in K^*[n, T]$ となる。

$f(t; c)$ を $f_c(t)$ と表記することにより

$$\begin{aligned} \mu[f_{\hat{c}}] - \mu[f_c] &= \int_T (\hat{c} - c)^\top \psi(t) \mu(dt) = \langle \Sigma^{-1}(\hat{c} - c), \mu[\psi] \rangle_\Sigma \\ &\leq \|\mu[\psi]\|_\Sigma \cdot \|\Pi_\Sigma(\Sigma^{-1}(\hat{c} - c) | K^*[n, T])\|_\Sigma \end{aligned} \quad (2.19)$$

が成り立つ。ただし、 $\hat{c} - c \notin -K[n, T] \setminus \{0\}$ とする。(2.19)における不等号は射影 Π_Σ を用いたコーシー-シュヴァルツの不等式の改良である。さらに $\hat{c} - c \notin -K \setminus \{0\}$ の場合、適当な μ に対して等号が成り立つ。

ここで (2.19) の $\|\Pi_\Sigma(\Sigma^{-1}(\hat{c} - c) | K^*[n, T])\|_\Sigma$ は

$$\begin{aligned} &\|\Sigma^{-1}(\hat{c} - c)\|_\Sigma^2 - \min_{x \in K^*[n, T]} \|\Sigma^{-1}(\hat{c} - c) - x\|_\Sigma^2 \\ &= \|\hat{c} - c\|_{\Sigma^{-1}}^2 - \min_{y \in \Sigma K^*[n, T]} \|\hat{c} - c - y\|_{\Sigma^{-1}}^2 \\ &= \|\Pi_{\Sigma^{-1}}(\hat{c} - c | \Sigma K^*[n, T])\|_{\Sigma^{-1}}^2 \\ &= \|\hat{c} - c\|_{\Sigma^{-1}}^2 - \|\Pi_{\Sigma^{-1}}(\hat{c} - c | K[n, T])\|_{\Sigma^{-1}}^2 \end{aligned}$$

と書きかえられる。これは $H_0 : c = 0$ の下で (2.14) の λ_{12} と同じ分布に従う。

λ_{12} の分布の上側 α パーセント点を $\lambda_{12, \alpha}$ と置くことで以下の命題が成り立つ。

命題 4 T 上の任意の非負の測度 $\mu(dt)$ に対し、 $\mu[f_c]$ の $1 - \alpha$ パーセント片側同時信頼区間は以下のように書ける。

$$\mu[f_c] \in (\mu[f_{\hat{c}}] - \sqrt{\lambda_{12, \alpha}} \|\mu[\psi_n]\|_\Sigma, \infty). \quad (2.20)$$

(2.20) の具体的な例として

$$\begin{aligned} f(t, c) &\in (f(t, \hat{c}) - \sqrt{\lambda_{12, \alpha}} \|\psi_n(t)\|_\Sigma, \infty), \\ \int_{t_0}^t f(t, c) dt &\in \left(\int_{t_0}^t f(t, \hat{c}) dt - \sqrt{\lambda_{12, \alpha}} \left\| \int_{t_0}^t \psi_n(t) dt \right\|_\Sigma, \infty \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

などが挙げられる。ここで $t \in T$ は任意とする。

第 3 章

チェビシェフ系

本論文では多項式回帰に対する正值性の検定を扱う。非負多項式の性質を調べることによって、尤度比統計量の帰無仮説の下での分布が導出される。この章では多項式の一般化であるチェビシェフ系の性質を扱う。チェビシェフ系に関しては多くの研究が行われている (Karlin and Studden(1966), Faybusovich(2002) など)。この章ではチェビシェフ系に関する基本的な事実を要約する。この章の結果は 5 章で扱う $K[n, T], K^*[n, T]$ およびそれらの境界のパラメーター表示に応用される。

この章の構成は以下の通りである。3.1 節ではチェビシェフ系の定義を行う。また、チェビシェフ系の性質をいくつか紹介する。3.2 節ではチェビシェフ系に対する非負多項式の性質を扱う。3.3 節ではチェビシェフ系に対するモーメント錐の 1 対 1 のパラメーター表示を行う。

3.1 チェビシェフ系の定義

この節ではチェビシェフ系の定義を行う。 u_0, u_1, \dots, u_n をパラメーター t に対する関数とする。この章ではパラメーター t の定義域 T を $[a, b]$ とする。ここで、 $a \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq b$ に対して

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_0) & u_0(t_1) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & u_1(t_1) & \dots & u_1(t_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_n(t_0) & u_n(t_1) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

が常に正となるとき u_0, u_1, \dots, u_n はチェビシェフ系 (または T-システム) と定義される。 (3.1) が常に負となるとき、順番を入れ替えることによって u_0, u_1, \dots, u_n はチェビシェフ系となる。また (3.1) が常に非負となるとき u_0, u_1, \dots, u_n は弱チェビシェフ系 (または WT-システム) と定義される。

上の定義より以下の性質が導かれる.

命題 5 u_0, u_1, \dots, u_n をチェビシエフ系とする. このとき,

$$f(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t) \quad (3.2)$$

とすると $f(t)$ が恒等的に 0 となることと $a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0$ となることは同値である.

(証明)

この命題は Karlin and Studden(1966) 等で紹介されている.

$f(t)$ が恒等的に 0 と仮定する. ここで $a_j \neq 0$ とすると,

$$u_j(t) = -\frac{1}{a_j} \sum_{i \neq j} a_i u_i(t)$$

と書ける. これを (3.1) に代入すると 0 になる. これはチェビシエフ系の定義に矛盾する. よって, $a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0$ が成り立つ. \square

(3.2) の $f(t)$ は多項式の一般化になっている.

多項式がチェビシエフ系の例となっていることを示す. 各 i に対して $u_i(t) = t^i$ とする. このとき行列式 (3.1) は

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_0^n & t_1^n & \dots & t_n^n \end{pmatrix} = \prod_{0 \leq i < j \leq n} (t_j - t_i) > 0$$

となる. よって多項式はチェビシエフ系であることが示される. 多項式以外にも例えば以下の関数がチェビシエフ系であることが知られている (Karlin and Studden(1966), Faybusovich(2002)などを参照).

1. 三角関数

$$1, \cos(t), \sin(t), \dots, \cos(mt), \sin(mt)$$

2. 指数関数

$$\exp(\alpha_0 t), \exp(\alpha_1 t), \dots, \exp(\alpha_n t)$$

3. 有理式

$$\frac{1}{t + \alpha_0}, \frac{1}{t + \alpha_1}, \dots, \frac{1}{t + \alpha_n}$$

チェビシエフ系により一般化された多項式 $f(t)$ の性質として以下の命題 6 が知られている。この命題は 3.2 節および 3.3 節で用いられている。この命題は Karlin and Studden(1966) の 1 章 4 節等で与えられている。

命題 6 u_0, u_1, \dots, u_n をチェビシエフ系とする。このとき, (3.2) の $f(t)$ の互いに異なる零点は高々 n 個である。ただし, $f(t)$ が恒等的に 0 の場合は除く。

(証明)

$f(t)$ が $n+1$ 個の互いに異なる零点を持つと仮定する。その零点を $t_0 < t_1 < \dots < t_n$ と置く。ここで命題 5 よりある j に対して $a_j \neq 0$ となる。このとき,

$$u_j(t_k) = -\frac{1}{a_j} \sum_{i \neq j} a_i u_i(t_k), \quad k = 0, 1, \dots, n$$

が成り立つ。よって上の t_0, t_1, \dots, t_n に対して (3.1) は 0 になる。これはチェビシエフ系の定義に矛盾する。以上より, $f(t)$ の零点は高々 n 個である。□

命題 6 において u_0, u_1, \dots, u_n が滑らかなとき, 重複を数えても零点は高々 n 個となる。

逆に u_0, u_1, \dots, u_n を一般の関数としたとき任意の $(a_0, a_1, \dots, a_n) \neq (0, 0, \dots, 0)$ に対して (3.2) の $f(t)$ の零点が高々 n 個となるとき u_0, u_1, \dots, u_n がチェビシエフ系であることが証明できる。

3.2 チェビシエフ系に対する非負多項式の性質

この章ではチェビシエフ系 $u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)$, $t \in [a, b]$ に対して正多項式

$$f(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t)$$

ただし任意の $t \in [a, b]$ に対して $f(t) > 0$ (3.3)

の性質を扱う。

命題 7 (3.3) の $f(t)$ に対して以下を満たす $u(t) = \sum_{i=0}^n a'_i u_i(t)$ が一意に存在する。

1. 任意の $t \in [a, b]$ に対して $f(t) \geq u(t) \geq 0$.
2. $u(t)$ は $[a, b]$ で $\frac{n}{2}$ 個の互いに異なる零点を持つ。
ただし, a, b が零点の場合は $\frac{1}{2}$ 個の零点として数える。
3. $f(t) - u(t)$ は $u(t)$ の各零点の間, 及び $u(t)$ の零点と a, b の間で零点を持つ。
4. $u(b) > 0$.

図 3.1 は命題 7 における $f(t), u(t)$ の例として 4 次の多項式を考えたものである。ここで、実線と破線はそれぞれ $f(t), u(t)$ に対応している。

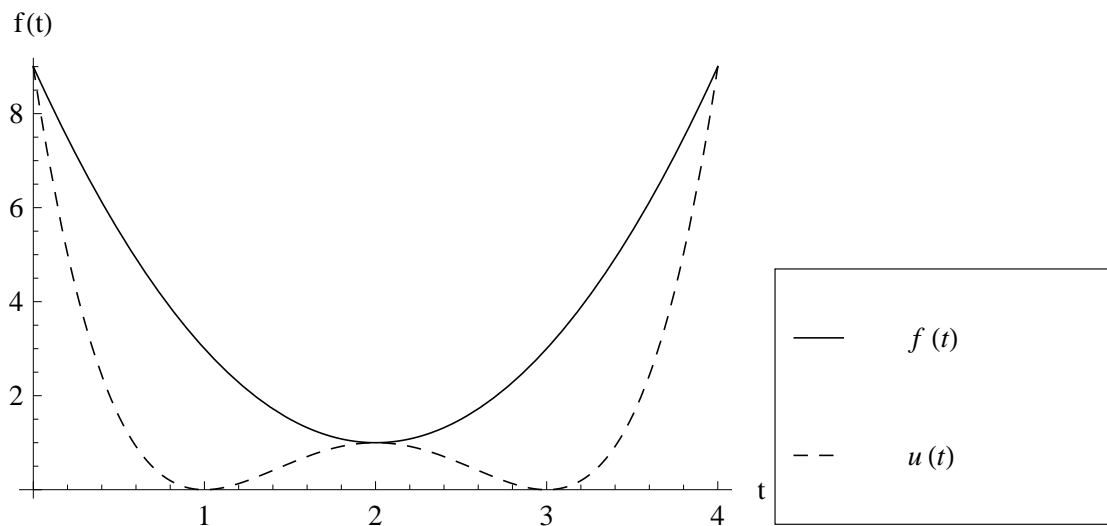


図 3.1 命題 7 の例 (実線 : $f(t)$, 破線 : $u(t)$)

(証明) $n = 2m$ の場合を証明する. $n = 2m + 1$ の場合も同様に証明される. この証明は Karlin and Studden(1966) の定理 10. 1 と同様のものである.

Ξ^m を以下のように定義する.

$$\Xi^m = \left\{ (\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_m) \mid \sum_{i=0}^m \xi_i = b - a, \xi_i \geq 0, i = 0, 1, \dots, m \right\}.$$

$u_\xi(t)$ を以下の t_i でそれぞれ零点を持つ関数とする.

$$t_i = a + \sum_{k=0}^{i-1} \xi_k, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.4)$$

さらに,

$$\delta_i(\xi) = \min\{\delta \mid \delta f(t) \geq u_\xi(t), t \in [t_i, t_{i+1}]\}$$

と定義する.

ここで,

$$F_i(\xi) = \delta_i(\xi) - \min_k \delta_k(\xi), \quad i = 0, \dots, m,$$

$$F_{m+1}(\xi) = F_0(\xi).$$

と定義する.

今, 任意の ξ に対し

$$\sum_{i=0}^m F_i(\xi) > 0 \quad (3.5)$$

と仮定する. このとき,

$$\xi'_i = \frac{F_{i+1}(\xi)}{\sum_{k=0}^m F_k(\xi)} (b-a).$$

が定義できる. さらに, $\xi' = (\xi'_0, \xi'_1, \dots, \xi'_m)$ とすると $\xi' \in \Xi^m$ である.

$\xi^* = (\xi_0^*, \xi_1^*, \dots, \xi_m^*)$ を数列 $\xi, \xi', (\xi')', \dots$ の極限とする. F_i の定義より $i = \operatorname{argmin}_k \delta_k(\xi^*)$ に対して $F_i(\xi^*) = 0$ が成り立つ. ξ^* が極限であることより, 各 i に対して

$$\begin{aligned} (\xi_{i-1}^*)' &= \xi_{i-1}^* \\ &= \frac{F_i(\xi^*)}{\sum_{k=0}^m F_k(\xi^*)} (b-a) \\ &= 0 \end{aligned}$$

が成り立つ. 各 i に対して, (3.4) と ξ^* によって定義される t_i を t_i^* と置くと

$$t_{i-1}^* = t_i^*$$

が成り立つ. よって,

$$\begin{aligned} \delta_{i-1}(\xi^*) &= \min\{\delta \mid \delta f(t_i) \geq u_\xi(t_i) = 0\} \\ &= 0 \end{aligned}$$

である. すなわち

$$F_{i-1}(\xi^*) = 0.$$

である.

以上の議論を繰り返すことにより, 各 $i = 0, 1, \dots, m+1$ に対して $F_i(\xi^*) = 0$ となる. これは仮定 (3.5) に矛盾する. 以上より

$$\sum_{i=0}^m F_i(\xi) = 0$$

となる $\xi \in \Xi^m$ が存在する.

上の ξ に対して

$$\delta_i(\xi) = \delta, \quad i = 0, \dots, m$$

と置くことができる. このとき $u(t) = 1/\delta u_\xi(t)$ と置くと条件 1 ~ 4 を満たしている.

次に $u(t)$ の一意性を証明する. $u(t), \underline{u}(t)$ を条件 1 ~ 4 を満たす多項式と仮定する. ここで $u(t)$ の零点を

$$t_1 < t_2 < \dots < t_m,$$

$\underline{u}(t)$ の零点を

$$t'_1 < t'_2 < \dots < t'_m$$

とそれぞれ定義する. このとき一般性を失わずに $t'_1 \leq t_1$ とできる.

$$g(t) = u(t) - \underline{u}(t)$$

と定義すると $u(t_i) = 0$ より $g(t_i) \leq 0$ となる ($i = 1, \dots, m$). また条件 3 より, (t_i, t_{i+1}) で $u(s_i) = f(s_i)$ となる s_i が存在する ($i = 1, \dots, m-1$). このとき, $g(s_i) \geq 0$ となる. 以上より, $g(t)$ は $[t_i, t_{i+1}]$ で (重複を含めて) 少なくとも 2 つ零点を持つ ($i = 1, \dots, m-1$).

次に, $[a, t_1]$ について考える. $\underline{u}(t'_1) = 0$ より $g(t'_1) \geq 0$ である. また, $\underline{u}(s'_1) = f(s'_1)$ となる $s'_1 < t'_1$ が存在する. このとき, 条件 1 より

$$\begin{aligned} g(s'_1) &= u(s'_1) - f(s'_1) \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

が成り立つ. $g(t_1) \leq 0$ と併せることにより $g(t)$ は $[a, t_1]$ で少なくとも 2 つ零点を持つ.

最後に, $[t_m, b]$ について考える. 条件 1 より $u(s_m) = f(s_m)$ となる $s_m > t_m$ が存在する. このとき,

$$\begin{aligned} g(s_m) &= f(s_m) - \underline{u}(s_m) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

である. $g(t_m) \leq 0$ と併せることにより $g(t)$ は $[t_m, b]$ で少なくとも 1 つ零点を持つ.

以上より $g(t)$ は $[a, b]$ で少なくとも $n + 1$ 個の零点を持つ. よって命題 6 より任意の $t \in [a, b]$ に対し $g(t) = 0$, すなわち $u(t) = \underline{u}(t)$ となる. \square

3.3 モーメント錐のパラメーター表示

この節ではチェビシエフ系に対してモーメント錐およびその境界のパラメーター表示を考える. この節では, $\psi_n(t) = (u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t))$ とし, これに対応するモーメント錐を K^* とする.

始めにモーメント錐の境界 ∂K^* のパラメーター表示を考える。ここで $c \in K^*$ は以下のように表される。

$$c = \sum_{i=1}^p \lambda_i (u_0(t_i), \dots, u_n(t_i)).$$

このとき必要な t_i の数を $I(c)$ と定義する。(ただし, $t_i = a, b$ のとき $\frac{1}{2}$ 個と数える。) ここで次の命題が成り立つ。

命題 8 $c^0 = (c_0^0, c_1^0, \dots, c_n^0)$ とする。このとき,

$$c^0 \in \partial K^*$$

であることと

$$I(c^0) \leq \frac{n}{2}$$

となることは同値である。

(証明) この証明は Karlin and Studden(1966) の定理 2. 1 と同様のものである。

始めに十分性の証明を行う。 $c^0 \in \partial K^*$ と仮定する。このとき, ∂K^* の c^0 での支持半空間が存在する。これを

$$S = \left\{ (c_0, c_1, \dots, c_n) \mid \sum_{i=0}^n a_i c_i \geq 0 \right\}.$$

と置く。

上の a_i に対して

$$u^0(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t)$$

と定義する。ここで, $t \in [a, b]$ に対して $(u_0(t), \dots, u_n(t)) \in K^* \subset S$ より $u^0(t) \geq 0$ が成り立つ。

c^0 が非負の測度 $d\sigma^0(t)$ を用いて

$$c^0 = \int_a^b (u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)) d\sigma^0(t)$$

と表されているとする。このとき,

$$\begin{aligned} \int_a^b u^0(t) d\sigma^0(t) &= \int_a^b \sum_{i=0}^n a_i u_i(t) d\sigma^0(t) \\ &= \sum_{i=0}^n a_i c_i^0 \\ &= 0 \end{aligned}$$

が成り立つ. すなわち, $d\sigma^0(t) > 0$ のとき $u^0(t) = 0$ である. ここで $u^0(t) \geq 0$ より $u^0(t)$ の零点は高々 $n/2$ 個なので, $d\sigma^0(t) > 0$ となる t は高々 $n/2$ 個である. この t をそれぞれ t_1, t_2, \dots, t_p と置くことにより

$$c^0 = \sum_{i=1}^p \lambda^i(u_0(t_i), u_1(t_i), \dots, u_n(t_i))$$

が成り立つ. すなわち, $I(c^0) \leq n/2$ である.

次に必要性を証明する. $c^0 = (c_0^0, c_1^0, \dots, c_n^0) \in K^*$ に対し

$$\begin{aligned} I(c^0) &\leq \frac{n}{2}, \\ c^0 &= \sum_{j=1}^p \lambda_j(u_0(t_j), u_1(t_j), \dots, u_n(t_j)) \end{aligned} \quad (3.6)$$

と仮定する.

$$u^0(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t)$$

を (3.6) の t_j ($j = 1, 2, \dots, p$) でそれぞれ零点を持つ非負の多項式とする. このとき,

$$\begin{aligned} c &= (c_0, c_1, \dots, c_n) \\ &= \sum_{j=1}^p \lambda'_j(u_0(t'_j), u_1(t'_j), \dots, u_n(t'_j)) \in K^* \end{aligned}$$

に対し,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n a_i c_i &= \sum_{i=0}^n a_i \sum_{j=1}^p \lambda'_j u_i(t'_j) \\ &= \sum_{j=1}^p \lambda'_j u^0(t'_j) \geq 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

が成り立つ.

さらに,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n a_i c_i^0 &= \sum_{i=0}^n a_i \sum_{j=1}^p \lambda_j u_i(t_j) \\ &= \sum_{j=1}^p \lambda_j u^0(t_j) = 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

が成り立つ.

(3.7), (3.8) より

$$\left\{ c \mid \sum_{i=0}^n a_i c_i \geq 0 \right\}$$

は c^0 での K^* の支持半空間となっている. 以上より $c^0 \in \partial K^*$ である. \square

次に, $c^0 \in \text{int } K^*$ のパラメーター表示を行う. これは Karlin and Studden(1966) の 2.3 章と同様の方法である.

始めに, $n = 2m$ の場合を考える. $\tilde{c} = \lambda(u_0(a), u_1(a), \dots, u_n(a))$ とし, \tilde{c} から c^0 を通る線と ∂K^* の交点を c^* と置く. このとき

$$c^0 = \alpha \tilde{c} + (1 - \alpha)c^*, \quad \alpha \in (0, 1)$$

と書ける.

命題 8 より $I(c^*) \leq m$ および $I(c^0) > m$ が成り立つ. 以上より

$$c^0 = \lambda_0(u_0(a), u_1(a), \dots, u_n(a)) + \sum_{i=1}^m \lambda_i(u_0(t_i), u_1(t_i), \dots, u_n(t_i)) \quad (3.9)$$

と表される. 同様の議論により,

$$c^0 = \sum_{i=1}^m \lambda_i(u_0(t_i), u_1(t_i), \dots, u_n(t_i)) + \lambda_{m+1}(u_0(b), u_1(b), \dots, u_n(b)) \quad (3.10)$$

と表される.

次に $n = 2m + 1$ の場合を考える. 同様に,

$$\begin{aligned} c^0 &= \lambda_0(u_0(a), u_1(a), \dots, u_n(a)) + \sum_{i=1}^m \lambda_i(u_0(t_i), u_1(t_i), \dots, u_n(t_i)) \\ &\quad + \lambda_{m+1}(u_0(b), u_1(b), \dots, u_n(b)) \end{aligned} \quad (3.11)$$

と書ける.

さらに

$$K^*(d) = \text{co}\{(u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)) \mid t \in [d, b]\}$$

に対し, $c^0 \in \partial K^*(d')$ となる d' を用いることにより

$$c^0 = \sum_{i=0}^m \lambda_i(u_0(t_i), u_1(t_i), \dots, u_n(t_i)) \quad (3.12)$$

と書ける. ここで $t_0 = d$ となっている.

以上より $n = 2m$, $n = 2m + 1$ のそれぞれの場合に対して 2 通りのパラメーター表示が与えられた. 次に $c^0 \in \text{int } K^*$ のパラメーター表示がこれらに限られるということを示す. その証明のために次の命題を用いる.

命題 9 σ, σ^* を互いに異なる非負の測度とする. さらに, $I(\sigma^*) = I(\sigma) = (n + 1)/2$ とする. ここで,

$$\begin{aligned} c^0 &= \int_a^b (u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)) d\sigma^*(t) \\ &= \int_a^b (u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)) d\sigma(t) \in \text{int } K^*, \\ d\sigma(t_j) &> 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

と仮定する. このとき, 各 j に対して $d\sigma^*(t) > 0$ となる $t \in (t_j, t_{j+1})$ が存在する.

(証明) この証明は Karlin and Studden(1966) の補題 3. 1 と同様のものである.

$d\sigma^*(t) > 0$ となる $t \in (t_j, t_{j+1})$ が存在しないと仮定する. $u(t)$ を以下を満たす $u_i(t)$ の多項式とする.

$$\begin{aligned} u(t_j) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, \\ u(t) &\geq 0, \quad t \notin [t_j, t_{j+1}], \\ u(t) &< 0, \quad t \in (t_j, t_{j+1}). \end{aligned}$$

ここで, (3.13) より $\int_a^b u(t)(d\sigma^* - d\sigma) = 0$ が成り立つ.

一方, $d\sigma(t) > 0 \Leftrightarrow u(t) = 0$ なので

$$\begin{aligned} \int_a^b u(t)(d\sigma^* - d\sigma) &= \int_a^b u(t)d\sigma^* \\ &= \int_a^{t_j} u(t)d\sigma^* + \int_{t_{j+1}}^b u(t)d\sigma^* \\ &= 0 \end{aligned}$$

が成り立つ. よって

$$\int_a^{t_j} u(t)d\sigma^* = \int_{t_{j+1}}^b u(t)d\sigma^* = 0$$

である. すなわち, $d\sigma^*(t) > 0 \Rightarrow u(t) = 0$ が成り立つ. $I(\sigma^*) = I(\sigma)$ と併せることにより $d\sigma^*(t) > 0 \Leftrightarrow u(t) = 0$ が成り立つ. これは仮定に矛盾する. \square

以下, 命題 9 を用いてパラメーター表示の一意性を証明する.

命題 10 $c^0 \in \text{int } K^*$ に対して $I(\sigma) = (n+1)/2$ となるパラメーター表記は $n = 2m$ のとき (3.9), (3.10), $n = 2m+1$ のとき (3.11), (3.12) のそれぞれ 2 通りに限る.

(証明) この証明は Karlin and Studden(1966) の系 3. 1 と同様のものである.

$I(\sigma^*) = (n+1)/2$ となる単調な測度 σ^* を用いて $c = \sum_{i=0}^p \lambda_i^*(u_0(t_i^*), u_1(t_i^*), \dots, u_n(t_i^*))$ と表されているとする. ここで, t_i^* の中に a, b が含まれる場合, 命題 9 より上のいずれかに一致する. t_i^* の中に a, b が含まれない場合を考える ($n = 2m+1$). このとき, 命題 9 より $t_1^* < t'_1 < t_2^* < \dots$ となる. ここで, $u(t)$ を t_1^* で 1 次の零点, t_2^*, t_3^*, \dots で 2 次の零点を持つ $u_i(t)$ の多項式とする. このとき,

$$\begin{aligned} \int_a^b u(t)(d\sigma^* - d\sigma) &= \int_a^b u(t)d\sigma \\ &= \int_{t_1^*}^b u(t)d\sigma \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる. $[t_1^*, b]$ で $u(t) \geq 0$ なので, $d\sigma^*(t) > 0$ のとき $u(t) = 0$ となる. 以上より, $\sigma = \sigma^*$ である. □

第 4 章

2 次多項式に対する正值性を対立仮説とする検定

この章では検定 (2.3), (2.4) の特別な場合として $n = 2$ の場合を扱う. この章の内容は加藤, 栗木 (2012) をまとめたものである.

尤度比統計量の帰無仮説の下での分布は (2.14), (2.15) により与えられる. ここで (2.16) より w_3, w_0 の数値計算には 2 次元の数値積分 $\text{Vol}_2(K[2, T] \cap \mathbb{S}^2), \text{Vol}_2^*(K^*[2, T] \cap (\mathbb{S}^2)^*)$ が必要になる. 一方 w_2, w_1 は 1 次元の数値積分 $\text{Vol}_1(\partial K[2, T] \cap \mathbb{S}^2), \text{Vol}_1^*(\partial K^*[2, T] \cap (\mathbb{S}^2)^*)$ により数値計算される. よって, 重み $w_i, i = 0, 1, 2, 3$ の数値計算は w_2, w_1 を (2.16) により数値計算し, w_3, w_0 をガウス-ボンネの定理 (2.17) を用いて計算するのが効率的である.

この章の構成は以下のとおりである. 4.1 節で w_2, w_1 の数値計算を行うため $\partial K[2, T], \partial K^*[2, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示を導出する. 4.2 節でパラメーター表示を用いて数値計算の具体的な手順を導出する. 4.3 節で \hat{c} の非負多項式錐 $K[2, T]$ への直交射影 \hat{c}_K の具体的な数値計算方法について説明する. これは尤度比統計量の数値計算に必要となる. 4.4 節で数値例として Potthoff and Roy(1964) の標本に対して正值性を対立仮説とする検定を適用する.

4.1 $\partial K[2, T], \partial K^*[2, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示

この節では $\partial K[2, T], \partial K^*[2, T]$ のパラメーター表示の導出を行う.

始めに非負多項式錐の境界に関する補題を示す. この補題は一般の n に対しても成り立つ.

命題 11 $f(t; c)$ を T 上の非負多項式 ($c \in K[n, T]$) とする. $c \in \partial K[n, T]$ であることと

以下の (a) または (b) が成り立つことは同値である。

- (a) $f(t; c)$ は T で少なくとも 1 つ零点を持つ。
- (b) “ $a_1 = -\infty$ または $b_m = \infty$ ” かつ $f(t; c)$ は高々 $n - 1$ 次式。

(証明) Karlin and Studden(1966) の 5 章定理 9.1 に $T = [0, \infty)$ の場合の結果が示されている。同様の方法で証明が与えられる。

はじめに十分性を示す。(a) が成り立つと仮定し、 $f(t; c)$ の零点を $t_0 \in T$ とする。このとき任意の $\varepsilon > 0$ に対し

$$f(t_0; c - \varepsilon(1, 0, \dots, 0)) = f(t_0; c) - \varepsilon f(t_0; (1, 0, \dots, 0)) = -\varepsilon < 0.$$

よって $c - \varepsilon(1, 0, \dots, 0) \notin K[n, T]$ である。(b) が成り立つとき、

$$f(t; c - \varepsilon(0, \dots, 0, 1)) = f(t; c) - \varepsilon f(t; (0, \dots, 0, 1)) = -\varepsilon t^n + o(t^n)$$

は $|t|$ が十分大きいとき負になる。よって $c - \varepsilon(0, \dots, 0, 1) \notin K[n, T]$ である。以上より $c \in \partial K[n, T]$ となる。

次に必要性を示すために (a), (b) が成り立たないと仮定する。 a_1, b_m が有限の場合は任意の有限の $t \in T$ に対して $f(t; c) > 0$ より、十分小さな ε と $c' \in \mathbb{R}^3$ に対して

$$f(t; c + \varepsilon c') = f(t; c) + \varepsilon f(t; c')$$

の右辺は正となる。 $a_1 = -\infty$ または $b_m = \infty$ の場合は、 $t \rightarrow \pm\infty$ としても十分小さな ε に対して $f(t; c + \varepsilon c') > 0$ となる。以上より $c + \varepsilon c' \in K[n, T]$, すなわち $c \in \text{int } K[n, T]$ となる。□

この命題は 5 章で扱う n 次式の場合にも適用できる。

以下 $a_1 = -\infty$ や $b_m = \infty$ の場合を扱うため次の 4 つに T を場合分けする。

- (i) $a_1 > -\infty, b_m < \infty, T = \bigcup_{j=1}^m [a_j, b_j]$.
- (ii) $a_1 > -\infty, b_m = \infty, T = \bigcup_{j=1}^{m-1} [a_j, b_j] \cup [a_m, \infty)$.
- (iii) $a_1 = -\infty, b_m < \infty, T = \bigcup_{j=2}^m [a_j, b_j] \cup (-\infty, b_1]$.
- (iv) $a_1 = -\infty, b_m = \infty, T = \bigcup_{j=2}^{m-1} [a_j, b_j] \cup (-\infty, b_1] \cup [a_m, \infty)$.

以下の命題はそれぞれの T に対して $K[1, T]$ のパラメーター表示を与えるものである。

命題 12 (i),(ii),(iii),(iv) それぞれに対して高々 1 次の非負多項式は以下のように書ける。

$$f(t; c) = \begin{cases} \alpha(t - a_1) + \beta(b_m - t) & (a_1 > -\infty, b_m < \infty), \\ \alpha(t - a_1) + \beta & (a_1 > -\infty, b_m = \infty), \\ \alpha + \beta(b_m - t) & (a_1 = -\infty, b_m < \infty), \\ \alpha & (a_1 = -\infty, b_m = \infty). \end{cases}$$

命題 11, 12 を用いて以下の定理が示される.

命題 13 2 次非負多項式錐の境界を構成する非負多項式 $f(t; c)$, $c \in \partial K[n, T]$ は次のいずれかの表現をもつ. ただし $\alpha, \beta \geq 0$ とする. 特に $\alpha, \beta > 0$ の範囲では表現は一意である.

$$\begin{aligned} & \alpha(t - \gamma)^2, \quad \gamma \in T \quad (\gamma \text{ に 2 次の零点}), \\ & \alpha(t - b_j)^2 + \beta(t - b_j)(t - a_{j+1}) \quad (b_j \text{ に 1 次の零点}), \quad j = 1, \dots, m - 1, \\ & \alpha(t - a_{j+1})^2 + \beta(t - b_j)(t - a_{j+1}) \quad (a_{j+1} \text{ に 1 次の零点}), \quad j = 1, \dots, m - 1. \end{aligned}$$

これらに加えて (i) $a_1 > -\infty, b_m < \infty$ の場合,

$$\begin{aligned} & \alpha(t - b_m)^2 + \beta(b_m - t)(t - a_1) \quad (b_m \text{ に 1 次の零点}), \\ & \alpha(b_m - t)(t - a_1) + \beta(t - a_1)^2 \quad (a_1 \text{ に 1 次の零点}). \end{aligned}$$

(ii) $a_1 > -\infty, b_m = \infty$ の場合,

$$\begin{aligned} & \alpha + \beta(t - a_1) \quad (b_m = \infty \text{ に 1 次の零点}), \\ & \alpha(t - a_1) + \beta(t - a_1)^2 \quad (a_1 \text{ に 1 次の零点}). \end{aligned}$$

(iii) $a_1 = -\infty, b_m < \infty$ の場合,

$$\begin{aligned} & \alpha(b_m - t) + \beta(b_m - t)^2 \quad (b_m \text{ に 1 次の零点}), \\ & \alpha + \beta(b_m - t) \quad (a_1 = -\infty \text{ に 1 次の零点}). \end{aligned}$$

(iv) $a_1 = -\infty, b_m = \infty$ の場合,

$$\alpha \quad (a_1 = -\infty, b_m = \infty \text{ に 2 次の零点}).$$

(証明) 命題 11 に示したように, 非負多項式錐の境界に含まれる非負多項式 $f(t; c)$, $c \in \partial K[2, T]$ は命題 11 の条件 (a) あるいは (b) のいずれかをみたす.

はじめに条件 (a), すなわち $f(t; c)$ が T で零点を持つ場合を考える. $f(t; c)$ が $\gamma \in \text{int } T$ で零点を持つ場合, 十分小さな $\varepsilon > 0$ に対して $f(\gamma - \varepsilon; c), f(\gamma + \varepsilon; c) \geq 0$ より γ は 2 次の零点である. よって $f(t; c) = \alpha(t - \gamma)^2$ と書くことができる.

$\gamma = a_{j+1}, b_j$ ($j = 1, \dots, m - 1$) または $\gamma = a_1, b_m$ で零点を持つ場合, γ が 2 次の零点のときは, $\gamma \in \text{int } T$ の場合と同様であるので, 以下では γ で 1 次の零点を持つ場合を考える.

$\gamma = b_j$ で 1 次の零点を持つ場合: $f(t; c)$ が 1 次式のとき, $f(a_j; c) < 0$ または $f(a_{j+1}; c) < 0$ である. よって $f(t; c)$ は 2 次式となる. $f(a_{j+1}; c) \geq 0$ より, $f(t; c)$ は

b_j と $\gamma \in (b_j, a_{j+1}]$ に零点を持つ 2 次式

$$\begin{aligned} (t - b_j)(t - \gamma) &= (t - b_j) \left(t - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} b_j - \frac{\beta}{\alpha + \beta} a_{j+1} \right) \\ &\propto \alpha(t - b_j)^2 + \beta(t - b_j)(t - a_{j+1}) \end{aligned}$$

である.

$\gamma = a_{j+1}$ で 1 次の零点を持つ場合: 同様に, $f(t; c)$ は a_{j+1} と $\gamma \in [b_j, a_{j+1})$ に零点を持つ 2 次式

$$\begin{aligned} (t - a_{j+1})(t - \gamma) &= (t - a_{j+1}) \left(t - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} b_j - \frac{\beta}{\alpha + \beta} a_{j+1} \right) \\ &\propto \alpha(t - b_j)(t - a_{j+1}) + \beta(t - a_{j+1})^2 \end{aligned}$$

である.

$\gamma = a_1$ で 1 次の零点を持つ場合: a_1 で 1 次の零点を持つ多項式とは, 補題 12 より $b_m < \infty$ の場合は

$$\begin{aligned} (T \text{ 上で非負の高々 1 次の多項式}) \times (t - a_1) &= \{\alpha(t - a_1) + \beta(b_m - t)\} \times (t - a_1) \\ &= \alpha(t - a_1)^2 + \beta(b_m - t)(t - a_1), \end{aligned}$$

$b_m = \infty$ の場合は

$$\begin{aligned} (T \text{ 上で非負の高々 1 次の多項式}) \times (t - a_1) &= \{\alpha(t - a_1) + \beta\} \times (t - a_1) \\ &= \alpha(t - a_1)^2 + \beta(t - a_1) \end{aligned}$$

である.

$\gamma = b_m$ で 1 次の零点を持つ場合: b_m に 1 次の零点を持つ多項式とは, 補題 12 より $a_1 > -\infty$ の場合は

$$\begin{aligned} (T \text{ 上で非負の高々 1 次の多項式}) \times (b_m - t) &= \{\alpha(t - a_1) + \beta(b_m - t)\} \times (b_m - t) \\ &= \alpha(b_m - t)^2 + \beta(b_m - t)(t - a_1), \end{aligned}$$

$a_1 = -\infty$ の場合は

$$\begin{aligned} (T \text{ 上で非負の高々 1 次の多項式}) \times (b_m - t) &= \{\alpha + \beta(b_m - t)\} \times (b_m - t) \\ &= \alpha(b_m - t) + \beta(b_m - t)^2 \end{aligned}$$

である.

最後に $f(t; c)$ が T で零点を持たない場合を考える. これは補題 11 の条件 (b) より, $a_1 = -\infty$ または $b_m = \infty$ の場合に限られ, $f(t; c)$ の形は補題 12 で与えた $\alpha(t - a_1) + \beta$

($a_1 > -\infty, b_m = \infty$ の場合), $\alpha(b_m - t) + \beta$ ($a_1 = -\infty, b_m < \infty$ の場合), α ($a_1 = -\infty, b_m = \infty$ の場合) である. 以上を整理し, $f(t; c)$ の全ての可能性が列挙される. $\alpha, \beta > 0$ のときに表現が一意であることは, 容易に確認できる. \square

命題 13 は $\{f(t; c) \mid c \in K[2, T]\}$ のパラメーター表示を表している. これを用いて $K[2, T]$ のパラメーター表示を与える.

$$\varphi_2(t) = (t^2, -2t, 1)^\top, \quad \varphi_j = (b_j a_{j+1}, -b_j - a_{j+1}, 1)^\top, \quad j = 1, \dots, m-1,$$

と定義すると

$$(t - t_0)^2 = \varphi_2(t_0)^\top \psi_2(t), \quad (t - b_j)(t - a_{j+1}) = \varphi_j^\top \psi_2(t)$$

が成り立つ. さらに,

$$\varphi_m = \begin{cases} (-b_m a_1, b_m + a_1, -1)^\top & (a_1 > -\infty, b_m < \infty), \\ (-a_1, 1, 0)^\top & (a_1 > -\infty, b_m = \infty), \\ (b_m, -1, 0)^\top & (a_1 = -\infty, b_m < \infty), \\ (1, 0, 0)^\top & (a_1 = -\infty, b_m = \infty) \end{cases}$$

と定義すると $(t - a_1)(b_m - t), \alpha(t - a_1), \alpha(b_m - t), \alpha$ はそれぞれ $\varphi_m^\top \psi_2(t)$ と表わされる. 命題 13 と併せることにより ∂K のパラメーター表示を得る.

命題 14 α, β は非負の範囲を動くパラメータとする.

$$\partial K[2, T] = \bigcup_{j=1}^m \left(\left\{ \alpha \varphi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j] \right\} \cup \left\{ \alpha \varphi_j + \beta \varphi_2(b_j) \right\} \cup \left\{ \alpha \varphi_j + \beta \varphi_2(a_{j+1}) \right\} \right). \quad (4.1)$$

ただし $a_{m+1} = a_1$ とし, $t = \pm\infty$ のとき $\psi_2(t) = (1, 0, 0)$ とする. また上式 (4.1) 右辺においてパラメータを $\alpha, \beta > 0$ に制限すると, 括弧 $\{ \}$ 内の各集合は互いに排反となる.

(4.1) におけるパラメーター表示は $\alpha, \beta > 0$ に対して 1 対 1 である. 一方 $\alpha = 0$ もしくは $\beta = 0$ の場合 1 対 1 になっていない. しかし, これらの場合パラメーター表示の重複は測度 0 である. よって (4.1) を $\partial K[2, T]$ の体積の数値計算に用いることができる.

次に, $\partial K^*[2, T]$ のパラメーター表示を考える. $\partial K^*[2, T]$ は $\{\psi_2(t) \mid t \in T\}$ の錐包の閉包である. ここで, $\{\alpha \psi_2(t) \mid t \in T, \alpha \geq 0\}$ と平面 $\{(x, y, z)^\top \mid x + z = 1\}$ の交わり (x, y) 座標を考える. ある $t \in T$ に対して半直線 $\{\alpha \psi_2(t) \mid \alpha \geq 0\}$ と平面との交点は $\psi_2(t)/(1 + t^2)$ である. この (x, y) 座標は

$$\left(\frac{1}{1+t^2}, \frac{t}{1+t^2} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{1-t^2}{1+t^2}, \frac{2t}{1+t^2} \right) + \left(\frac{1}{2}, 0 \right)$$

と書ける。これは中心 $(1/2, 0)$ 、半径 $1/2$ の弧である。よって、半直線 $\{\alpha\psi_2(t) \mid t \in T, \alpha \geq 0\}$ は $K^*[2, T]$ の端点である。また、 $\{\alpha\psi_2(b_j) \mid \alpha \geq 0\}$ と $\{\alpha\psi_2(a_{j+1}) \mid \alpha \geq 0\}$ を含む半平面も $K^*[2, T]$ の端点であることが解る。以上より次の命題が成り立つ。

命題 15 α, β は非負の範囲を動くパラメータとする。

$$\partial K^*[2, T] = \bigcup_{j=1}^m \left(\left\{ \alpha\psi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j] \right\} \cup \left\{ \alpha\psi_2(b_j) + \beta\psi_2(a_{j+1}) \right\} \right). \quad (4.2)$$

ただし $a_{m+1} = a_1$ とし、 $t = \pm\infty$ のとき $\psi_2(t) = (0, 0, 1)^\top$ とする。また上式 (4.2) 右辺においてパラメータを $\alpha, \beta > 0$ に制限すると、括弧 $\{ \}$ 内の各集合は互いに排反となる。

命題 15 における $\partial K^*[2, T]$ においてパラメーター表示の重複は $\alpha = 0$ もしくは $\beta = 0$ のときであり、これらは測度 0 である。よって、これを用いて $\partial K^*[2, T]$ の体積の数値計算を行うことができる。

4.2 $\text{Vol}_1(\partial K[2, T] \cap \mathbb{S}^2), \text{Vol}_1^*(\partial K^*[2, T] \cap (\mathbb{S}^2)^*)$ の数値積分

(4.1), (4.2) によりそれぞれ $\partial K[2, T], \partial K^*[2, T]$ のパラメーター表示が与えられている。この節ではこれらのパラメーター表示と (2.16) を用い w_2, w_1 を数値計算することを考える。

(2.16) を $n = 2$ の場合に適用すると

$$w_2 = \frac{\text{Vol}_1(\partial K[2, T] \cap \mathbb{S}^2)}{4\pi}, \quad w_1 = \frac{\text{Vol}_1^*(\partial K^*[2, T] \cap (\mathbb{S}^2)^*)}{4\pi}$$

と書ける。

始めに w_2 の数値計算を扱う。(4.1) における $\partial K[2, T]$ のパラメーター表示は以下の集合の和集合で表わされている。

$$\left\{ \alpha\varphi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j] \right\}, \quad \left\{ \alpha\varphi_j + \beta\varphi_2(b_j) \right\}, \quad \left\{ \alpha\varphi_j + \beta\varphi_2(a_{j+1}) \right\}.$$

それぞれに対して \mathbb{S}^2 との交わりの長さを数値計算することで w_2 の数値計算を行う。始めに

$$\left\{ \alpha\varphi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j] \right\}$$

に対して \mathbb{S}^2 との交わりを考える。これは

$$\xi_2(t) = \frac{\varphi_2(t)}{\|\varphi_2(t)\|_{\Sigma^{-1}}}$$

とすることで以下のように書ける.

$$\{\alpha\varphi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j]\} \cap \mathbb{S}^2 = \{\xi_2(t) \mid t \in [a_j, b_j]\}.$$

これを用いることで, この部分に対応した長さは以下のように書ける.

$$\int_{a_j}^{b_j} \left\| \frac{d\xi_2(t)}{dt} \right\|_{\Sigma^{-1}} dt.$$

次に,

$$\{\alpha\varphi_j + \beta\varphi_2(b_j)\}$$

を扱う. これと \mathbb{S}^2 との交わりは $\varphi_j/\|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}}$ と $\varphi_2(b_j)$ を結ぶ \mathbb{S}^2 上の弧である. よって, この部分に対応する長さは

$$\cos^{-1} \frac{\langle \varphi_2(b_j), \varphi_j \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi_2(b_j)\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}}}$$

と書ける. 同様に,

$$\{\alpha\varphi_j + \beta\varphi_2(a_{j+1})\} \cap \mathbb{S}^2$$

の長さは

$$\cos^{-1} \frac{\langle \varphi_j, \varphi(a_{j+1}) \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi(a_{j+1})\|_{\Sigma^{-1}}}$$

と書ける.

以上より, w_2 は以下により数値計算される.

$$w_2 = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{a_j}^{b_j} \left\| \frac{d\xi(t)}{dt} \right\|_{\Sigma^{-1}} dt + \cos^{-1} \frac{\langle \varphi(b_j), \varphi_j \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi(b_j)\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}}} \right. \\ \left. + \cos^{-1} \frac{\langle \varphi_j, \varphi(a_{j+1}) \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi(a_{j+1})\|_{\Sigma^{-1}}} \right\}. \quad (4.3)$$

次に w_1 の数値計算を扱う. $\eta_2(t) = \psi_2(t)/\|\psi_2(t)\|_{\Sigma}$ と置くと, 上と同様の議論により

$$w_1 = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{a_j}^{b_j} \left\| \frac{d\eta_2(t)}{dt} \right\|_{\Sigma} dt + \cos^{-1} \frac{\langle \psi_2(b_j), \psi_2(a_{j+1}) \rangle_{\Sigma}}{\|\psi_2(b_j)\|_{\Sigma} \|\psi_2(a_{j+1})\|_{\Sigma}} \right\} \quad (4.4)$$

が成り立つ.

命題 16 $n = 2$ のとき, (2.14) における w_2, w_1 はそれぞれ (4.3), (4.4) により数値計算される.

w_3, w_0 はそれぞれ

$$w_3 = \frac{1}{2} - w_1, \quad w_0 = \frac{1}{2} - w_2$$

により導出される.

4.3 射影 \widehat{c}_K の数値計算

尤度比統計量 $\lambda_{01}, \lambda_{12}, \beta_{01}, \beta_{12}$ は係数ベクトルの無制約の推定量 \widehat{c} の $K[2, T]$ への射影 \widehat{c}_K により計算される. この節では \widehat{c}_K の数値計算の具体的な方法として対称錐計画と円筒代数分解を紹介する.

始めに対称錐計画を扱う. この方法は $c \in K[2, T]$ に対する $f(t; c)$ のパラメーター表示を用いて導出される. 命題 (13) より以下の命題が証明される.

命題 17 $c \in K[2, T]$ に対して $f(t; c)$ は以下の関数の錐包により表される.

$$\begin{aligned} (t - \gamma)^2, \quad \gamma \in T, \\ (t - b_j)(t - a_{j+1}), \quad j = 1, 2, \dots, m - 1, \end{aligned}$$

これらに加えて (i) $a_1 > -\infty, b_m < \infty$ の場合, $(b_m - t)(t - a_1)$,

(ii) $a_1 > -\infty, b_m = \infty$ の場合, $(t - a_1)$, 1,

(iii) $a_1 = -\infty, b_m < \infty$ の場合, $(b_m - t)$, 1,

(iv) $a_1 = -\infty, b_m = \infty$ の場合, 1.

ここで, $(t - \gamma)^2$ の緩和を考える. 半正定値行列 Q に対し 2 次形式

$$\psi_1(t)^\top Q \psi_1(t)$$

を考える.

$$Q_0 = \begin{pmatrix} \gamma^2 & -\gamma \\ -\gamma & 1 \end{pmatrix}$$

と置くと $\psi_1(t)^\top Q_0 \psi_1(t) = (t - \gamma)^2$ が成り立つ. さらに, 任意の $(c_1, c_2)^\top \in \mathbb{R}^2$ に対して

$$(c_1, c_2)^\top Q_0 (c_1, c_2) = (c_1 - c_2 \gamma)^2 \geq 0$$

が成り立つので, Q_0 は半正定値行列である. また,

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

と置くことで, $\psi_1(t)^\top Q_1 \psi_1(t) = 1$ となる.

任意の $t \in T$ に対して $\psi_1(t)^\top Q \psi_1(t) \geq 0$ が成り立つことと併せて以下の命題を得る.

命題 18 $c \in K[2, T]$ に対して $f(t; c)$ は以下のようにパラメーター表示される (1対1ではない).

$$f(t; c) = \psi_1(t)^\top Q \psi_1(t) + \sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j (t - b_j)(t - a_{j+1}) + \begin{cases} \alpha_m (b_m - t)(t - a_1) & (a_1 > -\infty, b_m < \infty), \\ \alpha_m (t - a_1) & (a_1 > -\infty, b_m = \infty), \\ \alpha_m (b_m - t) & (a_1 = -\infty, b_m < \infty). \end{cases} \quad (4.5)$$

パラメーター表示 (4.5) を用いて射影 \hat{c}_K を数値計算することを考える. (4.5) の $f(t; c)$ の係数ベクトル $e(Q, \alpha)$ を

$$f(t; c) = e(Q, \alpha)^\top \psi_2(t) \\ \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$$

により定義する. ここで, $e(Q, \alpha)$ は Q, α の線形式となっている.

射影

$$\hat{c}_K = \operatorname{argmin}_{x \in K} \|\hat{c} - x\|_{\Sigma^{-1}}$$

の数値計算は以下のように定式化される.

$$\begin{aligned} \text{目的関数} & \quad -d \rightarrow \text{最大化} \\ \text{制約条件} & \quad d \geq \|\hat{c} - c\|_{\Sigma^{-1}} \quad (2 \text{ 次錐制約}), \\ & \quad c = e(Q, \alpha) \quad (\text{線形制約}), \\ & \quad Q : \text{半正定値行列} \quad (\text{半正定値制約}), \\ & \quad \alpha_1, \dots, \alpha_m \geq 0 \quad (\text{不等式制約}) \end{aligned}$$

これは多くの計算ソフトウェア, 例えば SeDuMi (Sturm(1999)) で計算することができる. 2次錐制約を満たす c, d の集合が対称な錐となっていることからこの手法は対称錐計画と呼ばれる.

次に, 円筒代数分解について説明する. 円筒代数分解は線形式を目的関数とする最適化に用いられている手法である. この手法は大域的な最適解を与える.

射影 \hat{c}_K の最適化に対する目的関数は

$$\|\hat{c} - e(Q, \alpha)\|_{\Sigma^{-1}}^2 \quad (4.6)$$

と書ける. $e(Q, \alpha)$ は Q, α の各成分の線形式となっているので, この最適化は円筒代数分解を用いて数値計算される. この手法は Mathematica 等で実装されている (詳しくは穴井, 横山 (2011) およびその引用文献を参照).

4.4 数値例

本論文で扱う非負多項式を対立仮説とする検定は多項式回帰モデル (2.1) だけでなく以下のような成長曲線モデルにも適用することができる。

$$x_{it} = f(t; c) + \varepsilon_{it}, \quad f(t; c) = c_0 + c_1 t + c_2 t^2.$$

ここで x_{it} は被験者 i の時点 t での観測とする。一方成長曲線モデルにおいては、各 t に対して ε_{it} が独立とならないので共分散行列の推定値 $\widehat{\Sigma}$ が Σ_0 の定数倍とならない。よって σ^2 が未知の場合の尤度比統計量 (2.7) を用いることができず、(2.6) による近似を用いることになる。

この節では $n = 2$ の場合の数値例として Potthoff and Roy(1964) の標本について扱う。この標本は男子、女子それぞれの群に対して 8, 10, 12, 14 才で測定されたものである。数値計算を安定させるため、以下年齢から 11 を引いたものを説明変数 t とする。ここで、男子の群を 2 群、女子の群を 1 群として (2.5) の $f(t; \hat{c})$ を用いて男女の差を表わすことができる。一方、各群に対して直接成長曲線を計算しなくても両群間の差を以下の $f(t; c)$ のように表わすことができる。

$$\begin{aligned} x_{2ht} &= \mu_t + f(t; c) + \varepsilon_{2ht}, \quad h = 1, 2, \dots, n_2 (= 16) \\ x_{1ht} &= \mu_t + \varepsilon_{1ht}, \quad h = 1, 2, \dots, n_1 (= 11) \end{aligned} \quad (4.7)$$

ただし、 x_{1ht} , x_{2ht} はそれぞれ女子および男子の説明変数 t , 被験者 h に対する目的変数を表わし、 μ_t を未知のパラメーターとする。また $\varepsilon_{1h} = (\varepsilon_{1h,-3}, \varepsilon_{1h,-1}, \varepsilon_{1h,1}, \varepsilon_{1h,3})^\top$, $\varepsilon_{2h} = (\varepsilon_{2h,-3}, \varepsilon_{2h,-1}, \varepsilon_{2h,1}, \varepsilon_{2h,3})^\top$ はそれぞれ独立に平均 0, 共分散行列 Σ_1, Σ_2 の正規分布に従うと仮定する。本論文では共分散行列 Σ_j として下の一様共分散構造を仮定する。

$$\Sigma_j = \tau_j \{(1 - \rho_j)I + \rho_j J\}. \quad (4.8)$$

ここで、 J は全ての要素が 1 である行列を表わし、 τ_j, ρ_j は未知パラメーターとする。この一様共分散構造は経時データに対する解析等で広く用いられている（詳しくは Crowder and Hand (1990), Kato, Yamada and Fujikoshi (2010) 等を参照）。

本論文では (4.7) における両群間の差 $f(t; c)$ として 3 次式を扱う。このとき、両群間の差の導関数 $\partial f(t; c)/\partial t$ は 2 次式で表わされる。この節では、数値例として $\partial f(t; c)/\partial t$ に対して、非負多項式を対立仮説とする検定を行う。応用上、これは男子の成長が女子の成長より 8 才から 14 才の間で常に速いか否かを検定することに対応する。

ここでは、説明変数の定義域として

$$T = [-3, 3] \quad (4.9)$$

を考える。これは 8 才から 14 才の間で正值性の検定を行うことに対応する。

Potthoff and Roy(1964) の標本に対してモデル (4.7) を当てはめた結果、両群間の差 $f(t; c)$ の係数 c の推定量は

$$\begin{aligned}\hat{c} &= (\hat{c}_0, \hat{c}_1, \hat{c}_2, \hat{c}_3)^\top \\ &= (2.053, 0.551, 0.0536, -0.0301)^\top\end{aligned}\quad (4.10)$$

となった。このとき、 $f(t; \hat{c})$ のグラフは図 4.1 のように描ける。

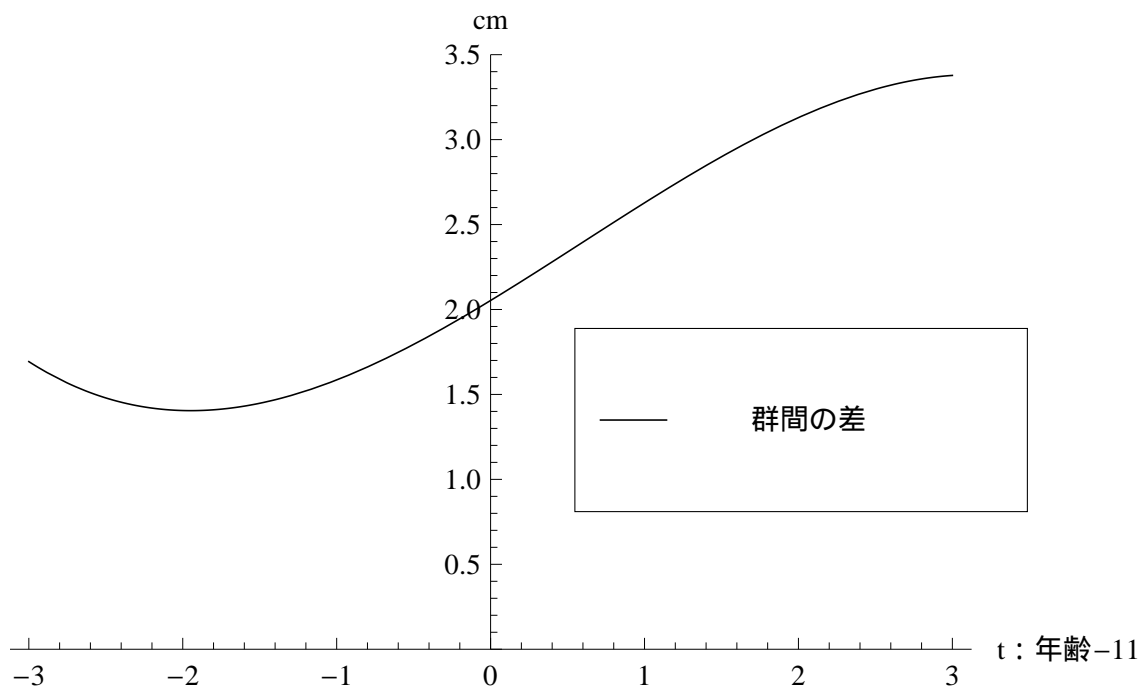


図 4.1 群間の差の推定量 $f(t; \hat{c})$

またモデル (4.8) を仮定した下でのパラメーター $\tau_1, \rho_1, \tau_2, \rho_2$ の推定値は

$$\hat{\tau}_1 = 4.469, \quad \hat{\rho}_1 = 0.868, \quad \hat{\tau}_2 = 5.147, \quad \hat{\rho}_2 = 0.479.$$

である。すなわち、 Σ_1, Σ_2 の推定値は

$$\hat{\Sigma}_1 = \begin{pmatrix} 4.469 & 3.881 & 3.881 & 3.881 \\ 3.881 & 4.469 & 3.881 & 3.881 \\ 3.881 & 3.881 & 4.469 & 3.881 \\ 3.881 & 3.881 & 3.881 & 4.469 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\Sigma}_2 = \begin{pmatrix} 5.147 & 2.465 & 2.465 & 2.465 \\ 2.465 & 5.147 & 2.465 & 2.465 \\ 2.465 & 2.465 & 5.147 & 2.465 \\ 2.465 & 2.465 & 2.465 & 5.147 \end{pmatrix}$$

である。これを用いて、両群間の差 $f(t; c)$ の係数 c の共分散行列は以下の $\widehat{\Sigma}$ のように推定される。

$$\begin{aligned}\widehat{\Sigma} &= (F^\top V^{-1} F)^{-1}, \\ &= \begin{pmatrix} 0.649 & 0 & -0.017 & 0 \\ 0 & 0.140 & 0 & -0.016 \\ -0.017 & 0 & 0.003 & 0 \\ 0 & -0.016 & 0 & 0.002 \end{pmatrix} \\ V &= \frac{1}{n_1} \widehat{\Sigma}_1 + \frac{1}{n_2} \widehat{\Sigma}_2, \\ F &= (\psi_3(-3), \psi_3(-1), \psi_3(1), \psi_3(3))^\top.\end{aligned}\tag{4.11}$$

ここでは共分散行列の推定値 $\widehat{\Sigma}$ を真の値とみなした近似的な解析を行う。

両群間の差 $f(t; c)$ に対して係数とその共分散行列の推定量はそれぞれ (4.10) の \widehat{c} , (4.11) の $\widehat{\Sigma}$ で表わされる。このとき両群間の差の導関数 $\partial f(t; c)/\partial t$ は以下のように書ける。

$$\frac{\partial f(t; c)}{\partial t} = \widehat{c}_1 + 2\widehat{c}_2 t + 3\widehat{c}_3 t^2.$$

よって、

$$\widehat{d} = L\widehat{c}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

と置くことにより、

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(t; c)}{\partial t} &= f(t; \widehat{d}) \\ &= \widehat{d}^\top \psi_2(t)\end{aligned}$$

となる。さらに、 d の共分散行列 Σ_d の推定値は

$$\begin{aligned}\widehat{\Sigma}_d &= L\widehat{\Sigma}L^\top \\ &= \begin{pmatrix} 0.140 & 0 & -0.047 \\ 0 & 0.014 & 0 \\ -0.047 & 0 & 0.017 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

である。ここで、 $f(t; \widehat{d})$ は図 4.2 のように表わされる。

(4.9) の T に対して、図 4.2 より $f(t; \widehat{d})$ は非負多項式ではない。従って、非負多項式錐 $K[2, T]$ への直交射影 \widehat{d}_K を数値計算する必要がある。(4.6) を用いて数値計算を行った結果

$$\widehat{d}_K = (0.348, 0.0776, -0.0128)^\top$$

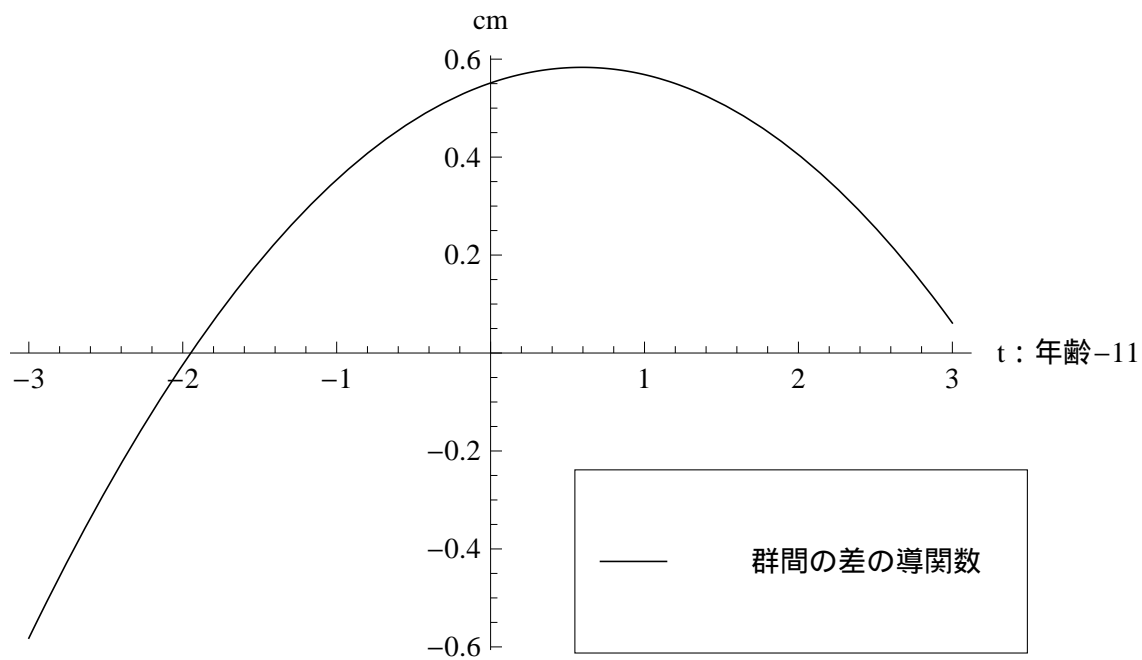


図 4.2 群間の差の導関数の推定量 $f(t; \hat{d})$

となった. $f(t; \hat{d}_K)$ は図 4.3 のように描ける.

以上より, 非負多項式を対立仮説とする検定 (2.3) に対する尤度比統計量は

$$\begin{aligned} \lambda_{01} &= \|\hat{d}_K\|_{\Sigma_d^{-1}}^2 \\ &= 9.293 \end{aligned}$$

である.

次に重み w_i ($i = 0, 1, 2, 3$) の数値計算を考える. (4.3), (4.4) 式による w_2, w_1 の数値計算にはベクトル $\xi(t), \eta_2(t)$ の微分およびそれらの積分が必要となる. 本論文では, Mathematica に実装されている関数を用いてそれらの数値計算を行った. この関数は 2 重指数求積法等いくつかの手法から被積分関数に適したものを自動的に選択するようになっている.

数値計算の結果, 尤度比統計量の帰無分布の重みが

$$(w_0, w_1, w_2, w_3) = (0.332, 0.479, 0.168, 0.021) \quad (4.12)$$

と得られる.

以上より, 非負多項式を対立仮説とする検定に対する p 値は 0.00325 となる.

次に適合度の検定 (2.4) について考える. この検定に対する尤度比統計量は以下のように

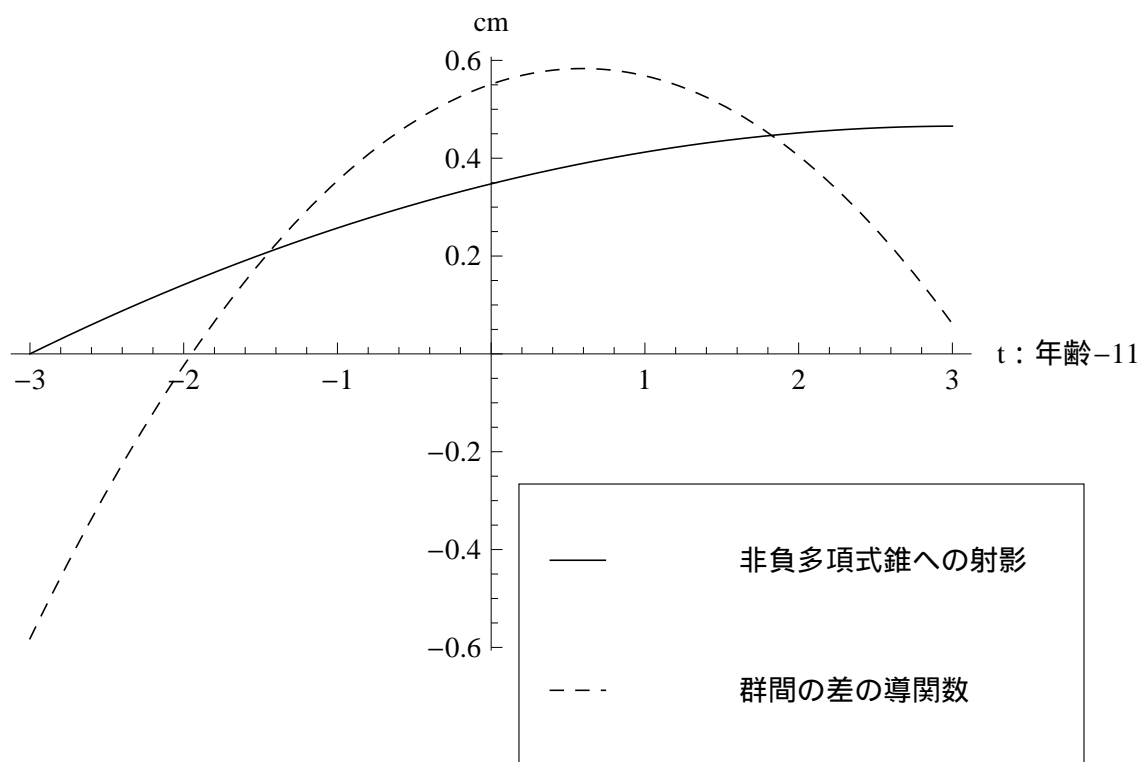


図 4.3 非負多項式錐への射影 (点線：群間の差の導関数の推定量 $f(t; \hat{d})$ ，実線：非負多項式錐への射影 $f(t; \hat{d}_K)$)

に書ける.

$$\begin{aligned}\lambda_{12} &= \|\hat{d} - \hat{d}_K\|_{\hat{\Sigma}_d^{-1}}^2 \\ &= 0.417\end{aligned}$$

(4.12) と併せることにより適合度の検定に対する p 値は 0.787 である.

以上の p 値より，両群間の差の導関数 $f(t; d)$ は有意水準 1 パーセントで非負多項式であるという結論が導かれる．これは男子の成長が女子の成長と比べて 8 才から 14 才の間で一様に速いということを意味する．

この結果と比較するため，一般的な同等性の尤度比検定

$$H_0 : c = 0 \text{ vs. } H_2 : c \in \mathbb{R}^3 \quad (4.13)$$

を考える．この検定に対する尤度比統計量は

$$\begin{aligned}\lambda_{02} &= \|\hat{d}\|_{\hat{\Sigma}_d^{-1}}^2 \\ &= 9.710\end{aligned}$$

である。 λ_{02} が帰無仮説 H_0 の下で自由度 3 のカイ 2 乗分布に従うことと併せて、 λ_{02} の p 値は 0.021 である。この数値解析により、非負多項式を対立仮説とする検定に対する p 値は一般的な検定に対する p 値より非常に小さいことが確認される。

(4.12) より例えば $T = [-3, 3]$ に対する尤度比統計量 λ_{01} と同等性の検定に対する尤度比統計量 λ_{02} の帰無仮説の下での分布は図 4.4 のように描ける。

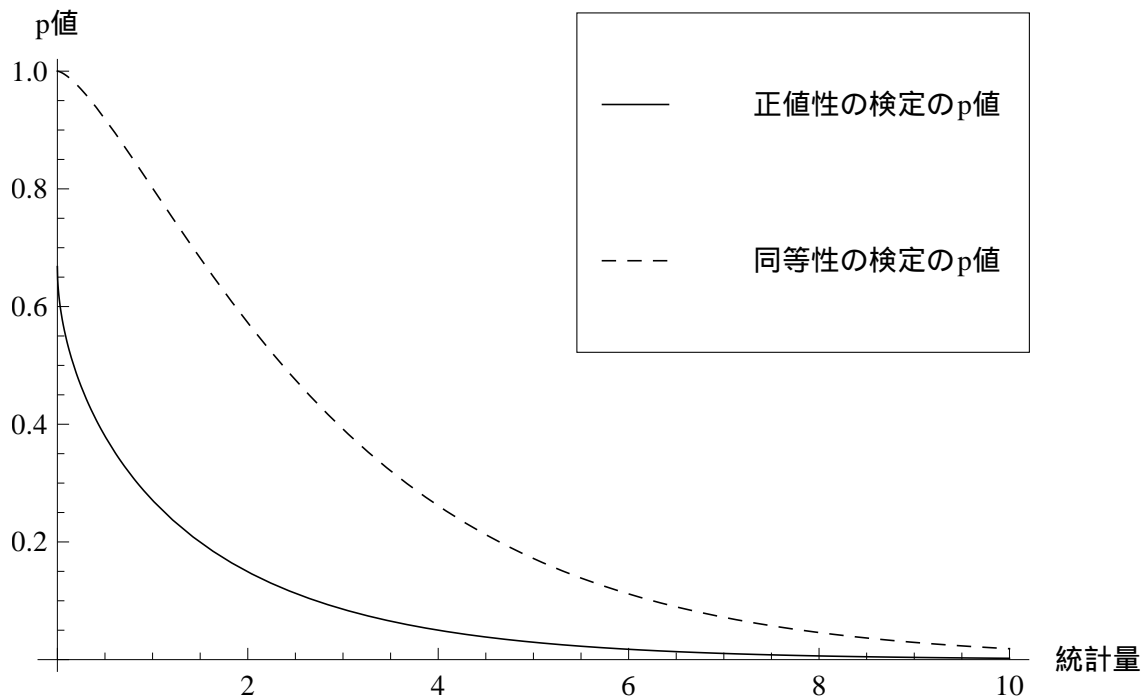


図 4.4 尤度比検定の p 値 (実線：正值性の検定に対する尤度比統計量 λ_{01} の p 値，破線：同等性の検定に対する尤度比統計量 λ_{02} の p 値)

以上の結果より、非負多項式を対立仮説とする検定は一般的な同等性の検定よりも高い検出力を持つことが予想される。

第 5 章

4 次までの多項式回帰に対する正值性を対立仮説とする検定

4 章では 2 次の多項式回帰に対して正值性を対立仮説とする検定の尤度比統計量の帰無仮説の下での分布を導出した。この章ではより一般的な場合として $n \leq 4$ に対して、 n 次多項式回帰の場合を扱う。この章の内容は Kato and Kuriki(2011) をまとめたものである。

Karlin and Studden(1966) では T が単一区間の場合に、一般の n に対して非負多項式錐 $K[n, T]$ およびモーメント錐 $K^*[n, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示が与えられている。また、補題 11 を併せることによりそれらの境界 $\partial K[n, T], \partial K^*[n, T]$ の (測度 0 を除いた) 1 対 1 のパラメーター表示が導出される。この章では上のパラメーター表示を用いて、重み w_i の数値計算を行う。

この章の構成は以下のとおりである。5.1 節では T が単一区間の場合に $K[n, T], K^*[n, T]$ およびそれらの境界のパラメーター表示を導出する。5.2 節でパラメーター表示を用いて数値計算の具体的な手順を導出する。5.3 節で \hat{c}_K の具体的な計算手順を扱う。これは尤度比統計量の数値計算において必要となる。5.4 節で数値例として Potthoff and Roy(1964) の標本に対して正值性を対立仮説とする検定を適用する。

5.1 $K[n, T], K^*[n, T]$ およびそれらの境界のパラメーター表示

この節では T が単一区間 $[a, b], [a, \infty), (-\infty, \infty)$ の場合に $K[n, T], K^*[n, T]$ およびそれらの境界 $\partial K[n, T], \partial K^*[n, T]$ の 1 対 1 のパラメーター表示を導出する。ただし、 $T = (-\infty, \infty)$ のときは n が偶数の場合のみを扱う。これらのパラメーター表示は $n > 4$ の場合でも成り立つ。

始めに, $K[n, T]$ のパラメーター表示を扱う.

$$\Delta_m = \Delta_m(T) = \{\tau = (\tau_1, \dots, \tau_m) \in (\text{int } T)^m \mid \tau_1 < \dots < \tau_m\}.$$

に対し, 以下の命題が成り立つ.

命題 19 $c \in K[n, T]$ とする. このとき $f(t; c)$ は以下のようにパラメーター表示される.

1. $T = [a, b]$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 (t - a)(b - t) \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2 & (n = 2m), \\ \alpha_1 (t - a) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j})^2 + \alpha_2 (b - t) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

2. $T = [a, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 (t - a) \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2 & (n = 2m), \\ \alpha_1 (t - a) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j})^2 + \alpha_2 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

3. $T = (-\infty, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2.$$

ここで $\alpha_1, \alpha_2 \geq 0$ であり, $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}) \in \Delta_m$ とする. 特に, $\alpha_1, \alpha_2 \geq 0$ のとき上のパラメーター表示は 1 対 1 である. また, $\prod_{j=1}^0 (\cdot) = 1$ とみなす.

(証明)

命題 7 を n 次多項式の場合に適用するとこの命題の証明が得られる.

また, Karlin and Studden(1966) により $T = [a, b]$ の場合 2 章 10 節, $T = [a, \infty)$ の場合 5 章 8 節, $T = (-\infty, \infty)$ の場合 6 章 9 節でそれぞれ上のパラメーター表示が与えられている. \square

命題 19 における $f(t; c)$ を $p_n(t; \alpha, \gamma)$, $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ と表す. $\varphi_n^{(0)}(\alpha, \gamma)$ を

$$p_n(t; \alpha, \gamma) = \varphi_n^{(0)}(\alpha, \gamma)^\top \psi_n(t).$$

と定義することにより以下の命題が成り立つ.

命題 20 $K[n, T]$ は以下のようにパラメーター表示される.

$$\varphi_n^{(0)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-1}\right).$$

ただし,

$$\mathbb{R}_+ = \{a \mid a \geq 0\}$$

とする.

次に $\partial K[n, T]$ のパラメーター表示に関して以下が成り立つ.

命題 21 $n \geq 3$ とする. $n-i \geq 1$ に対し, 係数ベクトル $\varphi_n^{(i)}$ を以下が成り立つように定義する.

$$(t - \tilde{\gamma})^i p_{n-i}(t; \alpha, \gamma) = \varphi_n^{(i)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma})^\top \psi_n(t) \quad (i = 1, 2).$$

このとき, $\partial K[n, T]$ は測度 0 を除いて以下のようにパラメーター表示される.

1. $T = [a, b]$ のとき

$$\begin{aligned} \partial K_n &= \varphi_n^{(2)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-3} \times T\right) \\ &\sqcup \varphi_n^{(1)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-2}, a\right) \\ &\sqcup \left\{ -\varphi_n^{(1)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-2}, b\right) \right\}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

2. $T = [a, \infty)$ のとき

$$\begin{aligned} \partial K_n &= \varphi_n^{(2)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-3} \times T\right) \\ &\sqcup \varphi_n^{(1)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-2}, a\right) \\ &\sqcup \varphi_{n-1}^{(0)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-2}\right), \end{aligned} \quad (5.2)$$

3. $T = (-\infty, \infty)$ のとき

$$\partial K_n = \varphi_n^{(2)}\left(\mathbb{R}_+^2 \times \Delta_{n-3} \times T\right). \quad (5.3)$$

(証明)

1. $T = [a, b]$ の場合

命題 11 より $c \in \partial K[n, T]$ のとき, $f(t; c)$ は T で少なくとも 1 つ零点を持つ. 最も次数の高い f に関して考えることにより, 測度 0 を除いたパラメーター表示が

得られる。これは以下の3通りの形で表される。

$$\begin{aligned} & (t - \tilde{\gamma})^2 p_{n-2}(t; \alpha, \gamma), \quad \tilde{\gamma} \in \text{int } T, \\ & (t - a) p_{n-1}(t; \alpha, \gamma), \\ & (b - t) p_{n-1}(t; \alpha, \gamma). \end{aligned}$$

これらは互いに背反である。よって、(5.1) が成り立つ。

2. $T = [a, \infty)$ の場合

命題 11 より $c \in \partial K[n, T]$ のとき、 $f(t; c)$ は T で少なくとも1つ零点を持つ。または、 $f(t; c)$ は高々 $n-1$ 次式である。最も次数の高いものは以下のように書ける。

$$\begin{aligned} & (t - \tilde{\gamma})^2 p_{n-2}(t; \alpha, \gamma), \quad \tilde{\gamma} \in \text{int } T, \\ & (t - a) p_{n-1}(t; \alpha, \gamma), \\ & p_{n-1}(t; \alpha, \gamma). \end{aligned}$$

これらは互いに背反である。よって、(5.2) が成り立つ。

3. $T = (-\infty, \infty)$ の場合

$f(t; c)$ が $n-1$ 次式のとき $T = (-\infty, \infty)$ より、ある $t \in T$ に対して $f(t; c) < 0$ すなわち $c \notin K[n, T]$ となる。よって補題 11 と併せることにより、最も次数の高い $\partial K[n, T]$ の多項式は

$$(t - \tilde{\gamma})^2 p_{n-2}(t; \alpha, \gamma), \quad \tilde{\gamma} \in \text{int } T$$

と書ける。よって、(5.3) が成り立つ。 \square

次に、 $K^*[n, T]$ のパラメーター表示を行う。

命題 22 $K^*[n, T]$ は以下のように2通りの方法でパラメーター表示される。

$$\begin{aligned} K^*[n, T] &= \phi_{n,n}^{(U)} \left(\mathbb{R}_+^{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \right) \\ &= \phi_{n,n}^{(L)} \left(\mathbb{R}_+^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} \right). \end{aligned} \quad (5.4)$$

これらはそれぞれ1対1のパラメーター表示となっている。ここで、 $\phi^{(U)}, \phi^{(L)}$ はそれぞれ以下のように定義される。

$$\phi_{n,l}^{(U)}(\rho, \tau) = \begin{cases} \sum_{i=1}^m \rho_i \psi_n(\tau_i) + \rho_{m+1} \psi_n(b) & (l = 2m), \\ \rho_1 \psi_n(a) + \sum_{i=1}^m \rho_{i+1} \psi_n(\tau_i) + \rho_{m+2} \psi_n(b) & (l = 2m + 1), \end{cases} \quad (5.5)$$

$$\phi_{n,l}^{(L)}(\rho, \tau) = \begin{cases} \rho_1 \psi_n(a) + \sum_{i=1}^m \rho_{i+1} \psi_n(\tau_i) & (l = 2m), \\ \sum_{i=1}^{m+1} \rho_i \psi_n(\tau_i) & (l = 2m + 1). \end{cases} \quad (5.6)$$

$\phi^{(U)}, \phi^{(L)}$ を用いたパラメーター表示 (5.4) はそれぞれ上側, 下側表現と呼ばれる. ただし $T = (-\infty, \infty)$ のとき $a = -\infty$, $T = [a, \infty), (-\infty, \infty)$ のとき $b = \infty$ とし,

$$\psi_n(\pm\infty) = (0, 0, \dots, 0, (\pm 1)^n)$$

とみなす.

(証明)

命題 9 を n 次多項式の場合に適用するとこの命題が証明される.

また, Karlin and Studden(1966) により $T = [a, b]$ の場合 2 章 3 節, $T = [a, \infty)$ の場合 5 章 4 節, $T = (-\infty, \infty)$ の場合 6 章 2 節でそれぞれ上のパラメーター表示が与えられている.

(5.4) のパラメーター表示において各 i に対して $p_i \geq 0$ であるが, $p_i = 0$ の場合は測度 0 なので $p_i > 0$ としてよい. 同様の理由で

$$a < \tau_1 < \tau_2 < \dots < b$$

とみなしてよい. □

$T = (-\infty, \infty)$, n が偶数のとき, (5.4) の 2 通りのパラメーター表示は同一のものである.

次に, $\partial K^*[n, T]$ のパラメーター表示を考える. (5.5), (5.6) の $\phi^{(U)}, \phi^{(L)}$ を用いることで以下のパラメーター表示が与えられる.

命題 23 $\partial K^*[n, T]$ は以下のように測度 0 を除いてパラメーター表示される.

1. $T = [a, b], [a, \infty)$ のとき

$$\begin{aligned} \partial K_n^* &= \phi_{n,n-1}^{(L)} \left(\mathbb{R}_+^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \right) \\ &\sqcup \phi_{n,n-1}^{(U)} \left(\mathbb{R}_+^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} \right), \end{aligned}$$

2. $T = (-\infty, \infty)$ のとき

$$\partial K_n^* = \phi_{n,n-1}^{(L)} \left(\mathbb{R}_+^m \times \Delta_m \right).$$

(証明)

命題8を n 次多項式の場合に適用することでこの命題が証明される。

また, Karlin and Studden(1966)により $T = [a, b]$ の場合2章2節, $T = [a, \infty)$ の場合5章4節, $T = (-\infty, \infty)$ の場合6章5節でそれぞれ上のパラメーター表示が与えられている。

ここで, $T = (-\infty, \infty)$ の場合の証明で $\phi_n(a) = \phi_n(b)$ が用いられている。□

5.2 重み w_i の数値計算

5.1節では説明変数の定義域 T が単一区間 $[a, b], [a, \infty), (-\infty, \infty)$ の場合に非負多項式錐 $K[n, T]$, モーメント錐 $K^*[n, T]$ およびそれらの境界の1対1のパラメーター表示を導出した。これを用いることにより高々 n 次の多項式に対する正值性の検定において, $i = 0, 1, n, n+1$ に対して(2.16)より重み w_i を数値計算することができる。 $n \leq 4$ のとき, これとガウス-ボンネの定理(2.17)を併せることにより全ての次数に対して重みを数値計算できる。

この節では(2.16)による重み w_i , $i = 0, 1, n, n+1$ の数値計算の具体的な手順を導出する。 $n > 4$ の場合については今後の展望として6章で扱う。

始めに, $K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*$ の体積の数値計算を扱う。(5.4)より $K^*[n, T]$ のパラメーター表示が与えられている。ここで, 実数 r に対して

$$\begin{aligned}\phi_{n,n}^{(U)}(r\rho, \tau) &= r\phi_{n,n}^{(U)}(\rho, \tau), \\ \phi_{n,n}^{(L)}(r\rho, \tau) &= r\phi_{n,n}^{(L)}(\rho, \tau)\end{aligned}$$

が成り立つ。よって $K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*$ は測度0を除いて以下のようにパラメーター表示される。

$$\begin{aligned}K_n^* \cap (\mathbb{S}^n)^* &= \bar{\phi}_{n,n}^{(U)}\left(\mathbb{S}_+^{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}\right) \\ &= \bar{\phi}_{n,n}^{(L)}\left(\mathbb{S}_+^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1} \times \Delta_{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}\right).\end{aligned}\tag{5.7}$$

ここで,

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_{n,l}^{(U)}(\rho, \tau) &= \phi_{n,l}^{(U)}(\rho, \tau) / \|\phi_{n,l}^{(U)}(\rho, \tau)\|_{\Sigma}, \\ \bar{\phi}_{n,l}^{(L)}(\rho, \tau) &= \phi_{n,l}^{(L)}(\rho, \tau) / \|\phi_{n,l}^{(L)}(\rho, \tau)\|_{\Sigma},\end{aligned}$$

$$\mathbb{S}_+^m = \left\{ \rho = (\rho_i) \in \mathbb{R}^{m+1} \mid \sum \rho_i^2 = 1, \rho_i > 0 \right\}$$

と定義する。

以下 (5.7) における \mathbb{S}_+^{m+1} がパラメーター $\theta = (\theta_i) \in \Theta_m$ を用いて $\{\rho(\theta) \mid \theta \in \Theta_m\}$ と表わされているとする. ここで, $\rho(\theta)$ の例として以下が挙げられる.

$$\begin{aligned}\rho &= \rho(\theta) = (\theta_1, \dots, \theta_m, \sqrt{1 - \sum \theta_i^2}), \\ \rho &= \rho(\theta) = (\cos \theta_1, \sin \theta_1 \cos \theta_2, \dots, \prod_{j=1}^m \sin \theta_j).\end{aligned}$$

このパラメーター表示に対して $K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*$ の体積は以下のように数値計算できる.

$$\begin{aligned}\text{Vol}^*(K_n^* \cap (\mathbb{S}^n)^*) &= \int_{\Theta_{[\frac{n+1}{2}] \times \Delta_{[\frac{n}{2}]}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n}^{(U)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right)^\top \Sigma \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n}^{(U)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\xi \\ &= \int_{\Theta_{[\frac{n}{2}] \times \Delta_{[\frac{n+1}{2}]}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n}^{(L)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right)^\top \Sigma \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n}^{(L)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\xi.\end{aligned}\tag{5.8}$$

同様に, $\partial K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*$ の体積は以下のように数値計算できる.

$$\begin{aligned}\text{Vol}^*(\partial K_n^* \cap (\mathbb{S}^n)^*) &= \int_{\Theta_{[\frac{n-1}{2}] \times \Delta_{[\frac{n}{2}]}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n-1}^{(L)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right)^\top \Sigma \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n-1}^{(L)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\xi \\ &+ \int_{\Theta_{[\frac{n}{2}] \times \Delta_{[\frac{n-1}{2}]}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n-1}^{(U)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right)^\top \Sigma \left(\frac{\partial \bar{\phi}_{n,n-1}^{(U)}(\rho, \tau)}{\partial \xi} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\xi \\ &\quad (T = [a, b] \text{ または } [a, \infty) \text{ の場合}).\end{aligned}\tag{5.9}$$

次に, $K[n, T] \cap \mathbb{S}^n$ およびその境界を考える.

$$\begin{aligned}\bar{\varphi}_n^{(0)}(\alpha, \gamma) &= \varphi_n^{(0)}(\alpha, \gamma) / \|\varphi_n^{(0)}(\alpha, \gamma)\|_{\Sigma^{-1}}, \\ \bar{\varphi}_n^{(i)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma}) &= \varphi_n^{(i)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma}) / \|\varphi_n^{(i)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma})\|_{\Sigma^{-1}} \quad (i = 1, 2)\end{aligned}$$

と置くことにより,

$$\text{Vol}(K_n \cap \mathbb{S}^n) = \int_{(0, \frac{\pi}{2}) \times \Delta_{n-1}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(0)}(\alpha, \gamma)}{\partial \zeta} \right)^\top \Sigma^{-1} \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(0)}(\alpha, \gamma)}{\partial \zeta} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\zeta, \tag{5.10}$$

$$\begin{aligned}
& \text{Vol}(\partial K_n \cap \mathbb{S}^n) \\
&= \int_{(0, \frac{\pi}{2}) \times \Delta_{n-3} \times T} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(2)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma})}{\partial \zeta} \right)^\top \Sigma^{-1} \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(2)}(\alpha, \gamma, \tilde{\gamma})}{\partial \zeta} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\zeta, \\
&+ \int_{(0, \frac{\pi}{2}) \times \Delta_{n-2}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(1)}(\alpha, \gamma, a)}{\partial \zeta} \right)^\top \Sigma^{-1} \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(1)}(\alpha, \gamma, a)}{\partial \zeta} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\zeta \\
&\quad (T = [a, b] \text{ または } [a, \infty) \text{ の場合}) \\
&+ \int_{(0, \frac{\pi}{2}) \times \Delta_{n-2}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(1)}(\alpha, \gamma, b)}{\partial \zeta} \right)^\top \Sigma^{-1} \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_n^{(1)}(\alpha, \gamma, b)}{\partial \zeta} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\zeta \\
&\quad (T = [a, b] \text{ の場合}) \\
&+ \int_{(0, \frac{\pi}{2}) \times \Delta_{n-2}} \det \left\{ \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_{n-1}^{(0)}(\alpha, \gamma)}{\partial \zeta} \right)^\top \Sigma^{-1} \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_{n-1}^{(0)}(\alpha, \gamma)}{\partial \zeta} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} d\zeta \\
&\quad (T = [a, \infty) \text{ の場合}). \tag{5.11}
\end{aligned}$$

が成り立つ。ここで、 $\zeta = (\theta, \gamma, \tilde{\gamma})$, $d\zeta = d\theta \prod d\gamma_i d\tilde{\gamma}$, $\alpha = (\cos \theta, \sin \theta)$ とする。ただし $T = [a, b]$ のとき第4項, $T = [a, \infty)$ のとき第3項, $T = (-\infty, \infty)$ のとき第3, 4項はそれぞれ計算しない。

以上より以下の命題が成り立つ。

命題 24 (2.14), (2.15) の w_i に対して $i = 0, 1, n, n+1$ のとき以下が成り立つ。

$$\begin{aligned}
w_{n+1} &= \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{2\pi^{\frac{n+1}{2}}} \text{Vol}_n(K[n, T] \cap \mathbb{S}^n), & w_n &= \frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{4\pi^{\frac{n}{2}}} \text{Vol}_{n-1}(\partial K[n, T] \cap \mathbb{S}^n), \\
w_1 &= \frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{4\pi^{\frac{n}{2}}} \text{Vol}_{n-1}^*(\partial K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*), & w_0 &= \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{2\pi^{\frac{n+1}{2}}} \text{Vol}_n^*(K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*).
\end{aligned}$$

ここで、 $\text{Vol}_n(K[n, T] \cap \mathbb{S}^n)$, $\text{Vol}_{n-1}(\partial K[n, T] \cap \mathbb{S}^n)$, $\text{Vol}_{n-1}^*(\partial K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*)$ および $\text{Vol}_n^*(K^*[n, T] \cap (\mathbb{S}^n)^*)$ はそれぞれ (5.10), (5.11), (5.9), (5.8) により数値計算される。

$n \leq 4$ の場合, 上の命題 24 とガウス-ボンネの定理 (2.17) を用いて全ての重み w_i を以下のように数値計算することができる。

$$(w_0, \dots, w_{n+1}) = \begin{cases} (w_0, w_1, \frac{1}{2} - w_0 - w_{n+1}, w_n, w_{n+1}) & (n = 3), \\ (w_0, w_1, \frac{1}{2} - w_0 - w_n, \frac{1}{2} - w_1 - w_{n+1}, w_n, w_{n+1}) & (n = 4). \end{cases}$$

今後の課題として6章で $n > 4$ の場合の展望を扱う。

5.3 一般の n に対する射影 \hat{c}_K の数値計算

この節では係数ベクトルの無制約推定量 \hat{c} の非負多項式錐 $K[n, T]$ への直交射影 \hat{c}_K を扱う。この直交射影は尤度比統計量の数値計算において必要となる。この節では $n = 2$ の場合と同様に対称錐計画と円筒代数分解について扱う。

始めに対称錐計画について扱う。その準備として、 $c \in K[n, T]$ に対して非負多項式 $f(t; c)$ の半正定値行列を用いたパラメーター表示を考える。命題 19 より以下のパラメーター表示が与えられている。

1. $T = [a, b]$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 (t - a)(b - t) \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2 & (n = 2m), \\ \alpha_1 (t - a) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j})^2 + \alpha_2 (b - t) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

2. $T = [a, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 (t - a) \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2 & (n = 2m), \\ \alpha_1 (t - a) \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j})^2 + \alpha_2 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

3. $T = (-\infty, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \alpha_1 \prod_{j=1}^m (t - \gamma_{2j-1})^2 + \alpha_2 \prod_{j=1}^{m-1} (t - \gamma_{2j})^2.$$

ここで、 k 個の 2 次式の積

$$\prod_{j=1}^k (t - \gamma_j)^2 \tag{5.12}$$

の 2 次形式を用いた緩和を考える。(5.12) の平方根は高々 k 次式であるので、その係数 $c(\gamma)$ は以下のように定義される。

$$\prod_{j=1}^k (t - \gamma_j) = c(\gamma)^\top \psi_k(t).$$

このとき, (5.12) 式は

$$\prod_{j=1}^k (t - \gamma_j)^2 = \psi_k(t)^\top \left(c(\gamma) c(\gamma)^\top \right) \psi_k(t)$$

と表わされる. ここで, $c(\gamma)c(\gamma)^\top$ は半正定値行列である. 以上より, 半正定値行列 Q に対して $\psi_k(t)^\top Q \psi_k(t)$ は (5.12) 式の緩和となっている. この結果より以下の命題が示される.

命題 25 $c \in K[n, T]$ に対して $f(t; c)$ は以下のようにパラメーター表記される (1対1ではない).

1. $T = [a, b]$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \psi_m(t)^\top Q_0 \psi_m(t) + (t-a)(b-t) \psi_{m-1}(t)^\top Q_1 \psi_{m-1}(t) & (n = 2m), \\ (t-a) \psi_m(t)^\top Q_0 \psi_m(t) + (b-t) \psi_m(t)^\top Q_1 \psi_m(t) & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

2. $T = [a, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \begin{cases} \psi_m(t)^\top Q_0 \psi_m(t) + (t-a) \psi_{m-1}(t)^\top Q_1 \psi_{m-1}(t) & (n = 2m), \\ (t-a) \psi_m(t)^\top Q_0 \psi_m(t) + \psi_m(t)^\top Q_1 \psi_m(t) & (n = 2m + 1), \end{cases}$$

3. $T = (-\infty, \infty)$ のとき

$$f(t; c) = \psi_m(t)^\top Q_0 \psi_m(t) + \psi_{m-1}(t)^\top Q_1 \psi_{m-1}(t).$$

ここで, Q_0, Q_1 はそれぞれ半正定値行列である.

命題 25 における $f(t; c)$ の係数ベクトル $e(Q_0, Q_1)$ は以下のように書ける.

$$f(t; c) = e(Q_0, Q_1)^\top \psi_n(t).$$

$e(Q_0, Q_1)$ は Q_0, Q_1 の線形式となっている. よって, 以下の対称錐計画によって射影 \hat{c}_K の数値計算が実行可能である.

目的関数 $-d \rightarrow$ 最大化

制約条件 $d \geq \|\hat{c} - c\|_{\Sigma^{-1}}$ (2次錐制約),

$c = e(Q_0, Q_1)$ (線形制約),

Q_0, Q_1 : 半正定値行列 (半正定値制約)

また $e(Q_0, Q_1)$ は Q_0, Q_1 の線形式であるので, 2次式の場合と同様に円筒代数分解により \hat{c}_K を数値計算できる.

5.4 単一区間の場合の数値例

4.4 節では Potthoff and Roy(1964) の標本に対して男子の群と女子の群の差を (4.10) の \hat{c} を用いて, $f(t; \hat{c})$ と表わした. この節では数値例として $f(t; \hat{c})$ に対し非負多項式を対立仮説とする検定を行う.

ここで 4.4 節と同様に \hat{c} の共分散行列 $\hat{\Sigma}$ を数値的に安定させるため, 説明変数 t は 11 を引いた年齢とする. 説明変数の定義域は

$$T = [-3, 3]$$

とする.

4.4 節で計算したとおり, 群間の差 $f(t; \hat{c})$ の係数 \hat{c} は以下のように書ける.

$$\hat{c} = (2.053, 0.551, 0.0536, -0.0301)^\top$$

また \hat{c} の共分散行列 Σ に対して一様共分散構造 (4.8) を仮定すると, (4.11) より Σ の推定量 $\hat{\Sigma}$ は

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0.649 & 0 & -0.017 & 0 \\ 0 & 0.140 & 0 & -0.016 \\ -0.017 & 0 & 0.003 & 0 \\ 0 & -0.016 & 0 & 0.002 \end{pmatrix}$$

である. これを共分散行列として代用する.

図 4.1 より任意の $t \in T = [-3, 3]$ で $f(t; \hat{c}) > 0$ となる. よって $\hat{c}_K = \hat{c}$ である.

以上より

$$\begin{aligned} \lambda_{01} &= \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2 \\ &= \|\hat{c}\|_{\Sigma^{-1}}^2 \\ &= 19.293 \end{aligned}$$

である.

また重み w_i は命題 24 により以下のように数値計算される.

$$(w_0, w_1, w_2, w_3, w_4) = (0.007, 0.066, 0.242, 0.434, 0.251). \quad (5.13)$$

これらを用いると非負多項式を対立仮説とする検定 (2.3) に対する p 値は 0.00029 である. 一方で, 一般的な同等性の検定 (4.13) の p 値は 0.00069 である. また $\hat{c} = \hat{c}_K$ より, 適合度の検定 (2.4) に対する尤度比統計量は 0 となる. 以上より, 任意の $t \in [-3, 3]$ に対して, $f(t; c) \geq 0$ と言える.

上の数値解析において非負多項式を対立仮説とする検定の p 値は一般的な検定に対する p 値より小さくなっている。このことから、非負多項式を対立仮説とする検定が有用であると言える。

λ_{01} および一般的な同等性の検定 (4.13) に対する尤度比統計量 λ_{02} の p 値はそれぞれ図 5.1 のように描ける。ここで実線および破線はそれぞれ λ_{01} と λ_{02} に対する p 値に対応

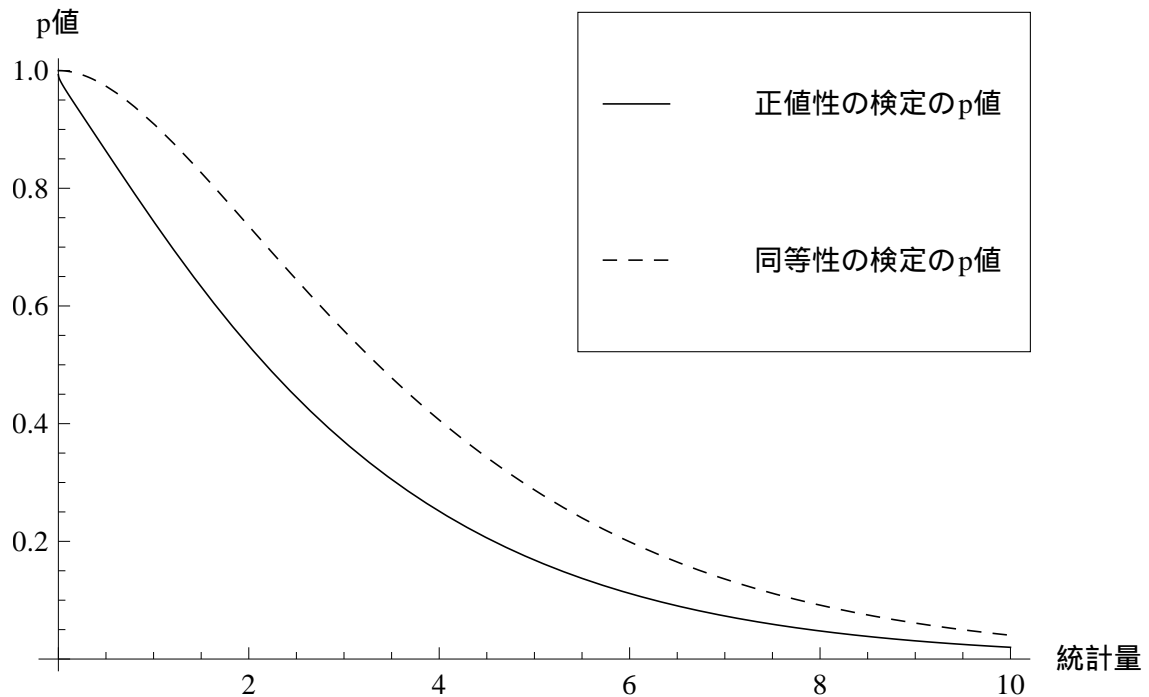


図 5.1 実線： λ_{01} に対する p 値，破線： λ_{02} に対する p 値

している。

また信頼区間 (2.21) の数値例として $f(t; c)$ の 95 パーセント同時信頼区間の導出を行った。(5.13) より λ_{12} の 5 パーセント点は 4.751 となる。以上より $f(t; c)$ の同時信頼区間は図 5.2 の灰色の部分のように描ける。

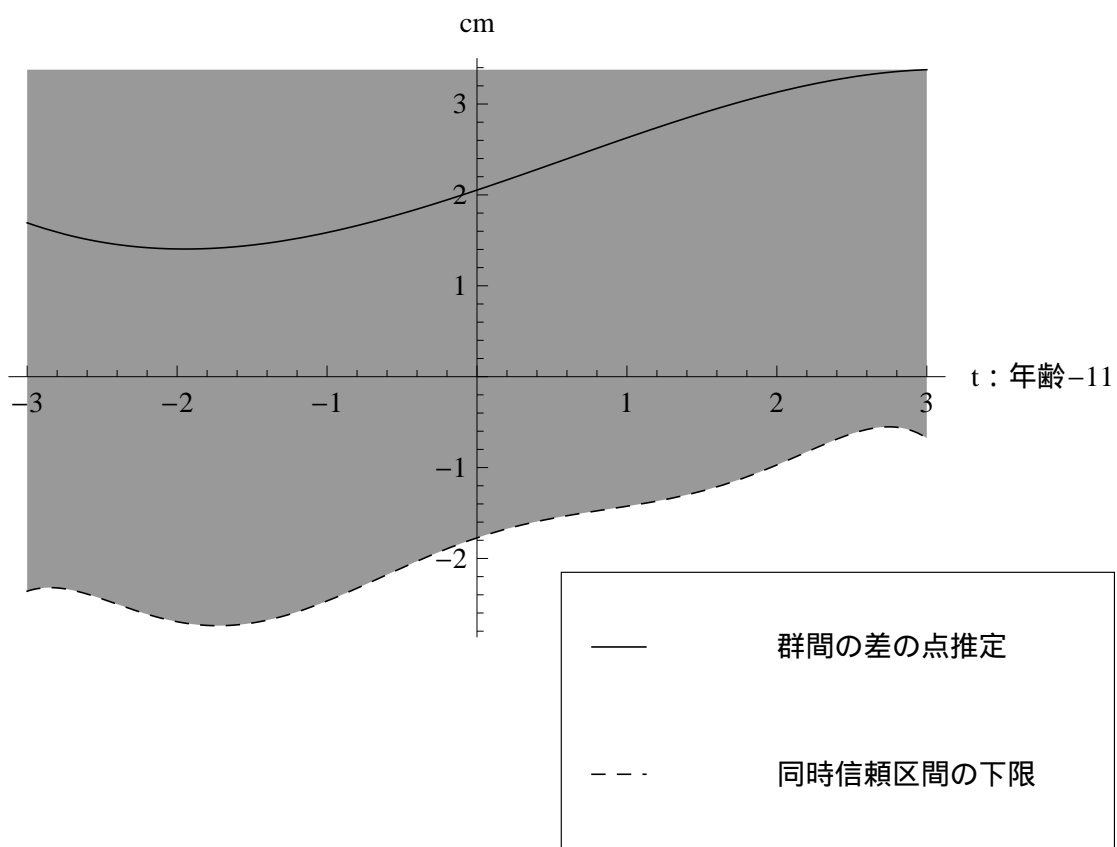


図 5.2 同時信頼区間 (実線: $f(t; \hat{c})$, 灰色の部分: $f(t; c)$ の 95 パーセント同時信頼区間)

第 6 章

今後の課題

本論文では多項式回帰モデルにおける回帰曲線の正值性についてチューブ法を用いて研究を行った。特に $n = 2$ の場合および $n \leq 4$, T : 単一区間の場合を扱ってきた。この章では今後の課題として、より一般的な n, T に対する展望を述べる。

始めに T が単一区間, $n > 4$ の場合を考える。この場合, 尤度比統計量の分布 (2.14), (2.15) を導出するには重み $\{w_i\}$, $i = 0, 1, \dots, n+1$ が必要となる。一般にこれらは $K[n, T]$ の境界での第 2 基本形式を用いた積分で表わされる (Takemura and Kuriki(2002)). この積分は数値的に不安定であり, 数値積分を行うのは困難である。一方, 命題 24 は $n > 4$ の場合も成り立つ。よって w_{n+1}, w_n, w_1 および w_0 は比較的簡単に数値計算をすることができる。カイ 2 乗分布の上側確率 $\bar{G}_i(a)$ が i に関する増加関数であることより

$$(u_0, \dots, u_{n+1}) = \begin{cases} (w_0, w_1, 0, \dots, 0, \frac{1}{2} - w_1 - w_n, \frac{1}{2} - w_0 - w_{n+1}, w_n, w_{n+1}) & (n : \text{奇数}) \\ (w_0, w_1, 0, \dots, 0, \frac{1}{2} - w_0 - w_n, \frac{1}{2} - w_1 - w_{n+1}, w_n, w_{n+1}) & (n : \text{偶数}), \end{cases}$$

$$(l_0, \dots, l_{n+1}) = \begin{cases} (w_0, w_1, \frac{1}{2} - w_0 - w_{n+1}, \frac{1}{2} - w_1 - w_n, 0, \dots, 0, w_n, w_{n+1}) & (n : \text{奇数}) \\ (w_0, w_1, \frac{1}{2} - w_0 - w_n, \frac{1}{2} - w_1 - w_{n+1}, 0, \dots, 0, w_n, w_{n+1}) & (n : \text{偶数}) \end{cases}$$

と置くことで, 分散が既知の場合の非負多項式を対立仮説とする検定 (2.3) に対する尤度比統計量 λ_{01} の分布が以下のように近似できる。

$$\sum_{i=0}^{n+1} l_i \bar{G}_i(a) \leq P_{H_0}(\lambda_{01} \geq a) \leq \sum_{i=0}^{n+1} u_i \bar{G}_i(a). \quad (6.1)$$

同様に, 適合度の検定 (2.4) に対する尤度比統計量 λ_{12} に対して以下が成り立つ。

$$\sum_{i=0}^{n+1} u_i \bar{G}_i(a) \leq P_{H_0}(\lambda_{12} \geq a) \leq \sum_{i=0}^{n+1} l_i \bar{G}_i(a). \quad (6.2)$$

また分散が未知の場合、カイ 2 乗分布をベータ分布に置き換えることで (6.1) 式および (6.2) 式はそのまま成り立つ。

特に $a \rightarrow \infty$ に対して、 λ_{01} の極限分布は以下のように書ける。

$$w_{n+1} \bar{G}_{n+1}(a).$$

このように w_{n+1} は応用上重要であり、一般に主項と呼ばれている。同様に、 λ_{12} の極限分布は以下のように書ける。

$$w_0 \bar{G}_{n+1}(a).$$

次に複数区間 T に対して、 $n > 3$ の場合を扱う。このとき重み $\{w_i\}$, $i = 0, 1, \dots, n+1$ の数値計算を行うためには、 $K[n, T]$ およびその境界の 1 対 1 のパラメーター表示が必要となる。特に主項 w_{n+1} の数値計算には $K[n, T]$ の内点のパラメーター表示が必要となる。 T が複数区間の場合、このパラメーター表示は求められておらず今後の課題である。

最後に本研究の拡張として多項式以外の回帰モデルを考える。多項式回帰モデルにおいて与えられていた $\psi_n(t) = (1, t, \dots, t^n)$ の代わりに $u_i(t)$, $i = 0, 1, \dots, n$ をチェビシェフ系とすると、

$$\psi(t) = (u_0(t), u_1(t), \dots, u_n(t)) \quad (6.3)$$

に対して検定 (2.3), (2.4) を考えると本論文と同様の議論を行うことができる。例えば、(6.3) の ψ として

$$(1, \cos(\theta), \sin(\theta), \dots, \cos(n\theta), \sin(n\theta)), \quad \theta \in \Theta$$

を考えると、 $t = \tan(\theta/2)$ とすることにより多項式の議論を適用することができる。

また、他の回帰曲線の例としてスプライン関数が考えられる。スプライン関数とは区分的に多項式である連続な関数として定義される。ここではスプライン関数の例として B-スプライン関数を紹介する。

x_+^m を

$$x_+^m = \begin{cases} x^m, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

により定義する。

このとき、 $m-1$ 次の B-スプライン関数の基底は以下の $M_{mi}(x)$ により定義される (市田, 吉本 (1979) など)。

$$M_{mi}(x) = \sum_{j=0}^m \frac{(\xi_{i+j-m} - x)_+^{m-1}}{w_{ij}(\xi_{i+j-m})},$$

$$w_{ij}(x) = \prod_{k \in \{i-m, \dots, i+j-m-1, i+j-m+1, \dots, i\}} (x - \xi_k).$$

これを用いて B-スプライン関数は

$$f(x) = \sum_{i=m}^n c_i M_{mi}(x)$$

と定義される. ここで $\xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_n$ は節点と呼ばれる.

各 $x \in [\xi_i, \xi_{i+1}]$ で $f(x)$ は高々 $m-1$ 次の多項式になっている. さらに, $f(x)$ は節点を含めて滑らかな関数となっている. また $x \leq \xi_{i-m}$ および $x \geq \xi_i$ のとき $M_{mi}(x) = 0$ である.

$m=3$ のときの B-スプライン関数の基底 $M_{mi}(x)$ の例を図 6.1 に示す. ここで, 節点は $(\xi_0, \xi_1, \xi_2, \xi_3) = (0, 1, 2, 3)$ とする.

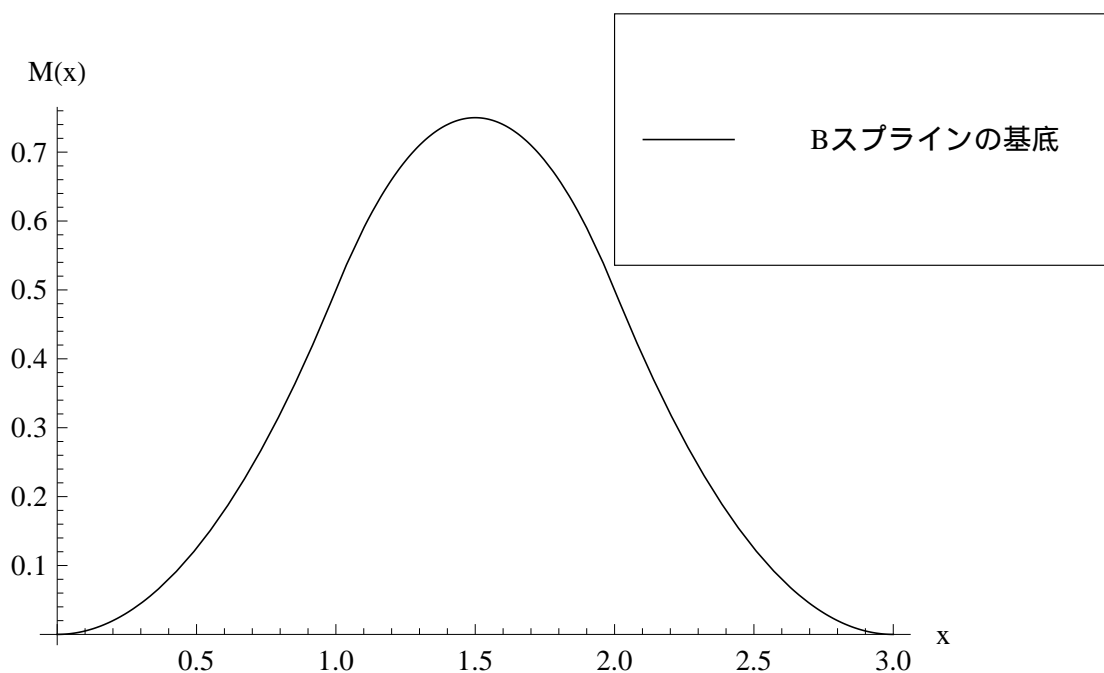


図 6.1 B-スプライン関数の基底の例 ($m=3$)

$M_{mm}(x), M_{m,m+1}(x), \dots, M_{mn}(x)$ は弱チェビシェフ系となっている. しかしチェビシェフ系とはなっていないので 3.2 節や 3.3 節の方法を用いることができない. 一方, 命題 11 は同様の方法によって証明される. よって, これを用いて非負多項式錐およびその境界のパラメーター表示を行うことができる. 特に非負多項式錐の次元が 3 以下の場合, 非負多項式錐およびその境界のパラメーター表示と (2.16), (2.17) を用いることで全ての重みを計算することができる. 非負多項式錐の次元が 4 以上の場合については今後の課題である.

謝辞

本論文の審査にあたって、統計数理研究所の藤澤洋徳准教授、栗木哲教授、江口真透教授、政策研究大学院大学の土谷隆教授にはご多忙の中審査を引き受けて頂き誠にありがとうございます。先生方の有益な意見のおかげで、無事本論文を完成させることができました。

土谷教授には対称錐計画を紹介して頂くなど、特に数値計算に関して多くの助言を頂きました。また藤澤准教授には主査を引き受けて頂きました。学位審査の前に本論文について深く確認して頂き、発表の方法について有益な指摘を頂きました。主任指導教員である栗木教授には研究の方向性から細部にいたるまで非常に多くのご指摘を頂きました。さらに研究の進捗について気にかけて頂くなど、多くの励ましの言葉を頂きました。心より感謝しています。

最後に学生生活を通して統計数理研究所の教官の皆様、事務の皆様、総合研究大学院大学の学生の皆様にいろいろお世話になりました。改めてお礼申し上げます。

参考文献

- [1] Adler, R. J. (1990). *Introduction to Continuity Extreme and Related Topics*. IMS Lecture Notes-Monograph Series, Vol. 12, IMS, Hayward.
- [2] Adler, R. J. and Taylor, J. E. (2007). *Random Fields and Geometry*. Springer Monographs in Mathematics. Springer, New York.
- [3] Akaike, H. (1974). A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, **19** (6), 716–723.
- [4] 穴井宏和, 横山和宏 (2011). 「QE の計算アルゴリズムとその応用 – 数式処理による最適化」. 東京大学出版会.
- [5] Anraku, K. (1999). An information criterion for parameters under a simple order restriction. *Biometrika*, **86** (1), 141–152.
- [6] Barvinok, A. (2002). *A Course in Convexity*. AMS, Providence, Rhode Island.
- [7] Crowder, M. J. and Hand, D. J. (1990). *Analysis of repeated measures*. Chapman and Hall, Ltd., London.
- [8] Faybusovich, L. (2002). Self-concordant barriers for cones generated by Chebyshev systems. *SIAM J. Optim.*, **12** (3), 770–781.
- [9] 福水健次, 栗木哲, 竹内啓, 赤平昌文 (2004). 「特異モデルの統計学 – 未解決問題への新しい視点」. 統計科学のフロンティア 7, 岩波書店.
- [10] Gray, A. (1990). *Tubes*. Addison-Wesley, Redwood City, CA.
- [11] Hotelling, H. (1939). Tubes and Spheres in n -Spaces, and a Class of Statistical Problems. *Amer. J. Math.*, **61** (2), 440–460.
- [12] 市田浩三, 吉本富士市 (1979). 「スプライン関数とその応用」. 教育出版.
- [13] Karlin, S. and Studden, W. (1966). *Tchebycheff Systems: With Applications in Analysis and Statistics*. Interscience Publishers, Wiley, New York.
- [14] 加藤直広, 栗木哲 (2012). 2次多項式回帰曲線の正值性検定, 応用統計学, **41** (1), 1–15.
- [15] Kato, N. and Kuriki, S. (2011). Likelihood ratio test for positivity in polynomial

- regressions. arXiv:1108.1033. <http://arxiv.org/abs/1108.1033>
- [16] Kato, N., Yamada, T. and Fujikoshi, Y. (2010). High-dimensional asymptotic expansion of LR statistic for testing intraclass correlation structure and its error bound. *J. Multivariate Anal.*, **101** (1), 101–112.
- [17] 栗木哲, 竹村彰通 (2008). チューブの体積と正規確率場の最大値の分布, *数学*, **60** (2), 134–155.
- [18] Potthoff, R. and Roy, S. (1964). A generalized multivariate analysis of variance model useful especially for growth curve problems. *Biometrika*, **51** (3-4), 313–326.
- [19] Robertson, T., Wright, F. T. and Dykstra, R. L. (1988). *Order Restricted Statistical Inference*. Wiley, Chichester.
- [20] Shapiro, A. (1988). Towards a unified theory of inequality constrained testing in multivariate analysis. *Internat. Statist. Rev.*, **56** (1), 49–62.
- [21] Sturm, J. F. (1999). Using SeDuMi 1.02, A Matlab toolbox for optimization over symmetric cones. *Optimization Methods and Software*, **11** (1), 625–653.
- [22] Takemura, A. and Kuriki, S. (1997). Weights of chi-bar-square distribution for smooth or piecewise smooth cone alternatives. *Ann. Statist.*, **25** (6), 2368–2387.
- [23] Takemura, A. and Kuriki, S. (2002). On the equivalence of the tube and Euler characteristic methods for the distribution of the maximum of Gaussian fields over piecewise smooth domains. *Ann. Appl. Probab.*, **12** (2), 768–796.
- [24] Uusipaikka, E. (1983). Exact confidence bands for linear regression over intervals. *J. Amer. Statist. Assoc.*, **78** (383), 638–644.
- [25] Wishart, J. (1938). Growth rate determination in nutrition studies with the bacon pig, and their analysis. *Biometrika*, **30** (1), 16–28.
- [26] Working, H. and Hotelling, H. (1929). Applications of the theory of error to the interpretation of trends. *J. Amer. Statist. Assoc., Supplement*, **26** (165), 73–85.
- [27] Wynn, H. P. and Bloomfield, P. (1971). Simultaneous confidence bands in regression analysis (with discussions). *J. Roy. Statist. Soc., Ser. B*, **33** (2), 202–221.