

2次多項式回帰曲線の正值性検定

総合研究大学院大学* 加藤 直 広

統計数理研究所 / JST CREST† 栗 木 哲

要 旨 定義域 T 上で常に非負の値をとる多項式は正多項式とよばれる。ここでは、推定された2次多項式回帰曲線が複数の区間からなる T の上の正多項式であるという仮説に対する尤度比検定を考える。この仮説を含む階層的仮説に対する尤度比統計量を定義し、その帰無仮説の下での分布をカイ2乗分布の混合分布として導出する。チューブ法の一般論より、その混合確率（重み）は高々2次の正多項式がなす閉凸錐 K とその法錐 K^* の境界の体積により与えられる。本論文では K と K^* の境界のパラメーター表示を与え、その重みを具体的に導出する。また、尤度比統計量の数値計算が対称錐計画によって行えることを説明する。

キーワード カイバー2乗分布, 経時測定, 正多項式錐, 対称錐計画, チェビシエフ系, モーメント錐.

1. はじめに

説明変数を t_i , 目的変数を y_i とする2次の多項式回帰モデル

$$y_i = f(t_i; c) + \varepsilon_i, \quad f(t; c) = \sum_{h=0}^2 c_h t^h = c^\top \psi(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

を考える。ここで $c = (c_0, c_1, c_2)^\top$, $\psi(t) = (1, t, t^2)^\top$ はともに 3×1 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の正規分布に従うものとする。さらに説明変数 t_i の定義域 $T \subset \mathbb{R}$ が、複数個の区間の和集合

$$T = \bigcup_{j=1}^m [a_j, b_j] \quad (2)$$

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。また、 c の最小2乗推定量を \hat{c} と書く。

本論文では、2次多項式 $f(t; c)$ の $t \in T$ における正值性：

$$\text{任意の } t \in T \text{ に対して } f(t; c) \geq 0 \quad (3)$$

* 国立大学法人 総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻

† 大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所 / 独立行政法人 科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業

の検定を考える。4.2節で述べるように、この検定は2標本問題の設定でより実的な意味を持つ。また集合 T (2) は、単一区間 $T = [a, b]$ や有限集合 $T = \cup_{j=1}^m \{a_j\}$ を特別な場合として含んでいる。 $T = \cup_{j=1}^m \{a_j\}$ に対する正值性仮説 (3) の検定は複数時点 $t = a_j$ ($j = 1, \dots, m$) に対する多重検定であり、応用上重要である。

不等式 (3) をみたす c の集合

$$K = K[T] = \bigcap_{t \in T} \{c \mid f(t; c) \geq 0\}$$

は閉凸錐をなす。これは正多項式錐とよばれる (Barvinok [1])。この K を用いると、正值性の仮説 (3) は $c \in K$ とおくことができる。この仮説を含む次の3つの階層的仮説を考える：

$$H_0 : c = 0, \quad H_1 : c \in K, \quad H_2 : c \in \mathbb{R}^3. \quad (4)$$

正值性の検定は、 H_0 を帰無仮説、 H_1 を対立仮説とする検定と考えられる。また、 H_1 を帰無仮説、 H_2 を対立仮説とする検定は、正值性のモデル (3) に対する適合度検定である。本論文では上の2つの検定を並行して扱う。

平均ベクトル μ を未知パラメータとする多変量正規モデルにおいて、帰無仮説を $\mu = 0$ 、対立仮説を $\mu \in K$ (所与の凸錐) とする尤度比統計量の帰無分布は、カイ2乗分布の有限混合分布で与えられるということが知られている (Shapiro [8])。一般にはその混合確率 (重み) は陽に計算できるとは限らない。後で示すように、これらの重みを求めることは単位球面上で錐の管状近傍 (チューブ) の体積を求めることと等価であり、体積計算を通して重みを計算する方法はチューブ法と総称される (栗木・竹村 [4], Kuriki and Takemura [5])。

本研究では K に対してチューブ法を適用し、尤度比統計量の帰無仮説の下での分布を導出する。幾何的計算を行うためには、 K およびその法錐 K^* 、ならびにそれらの境界を1対1のパラメータ表示する必要がある。Karlin and Studden [2] は、 T が単一区間の場合に、チェビシェフ系の一般論の枠組みで K とその法錐 K^* のパラメータ表示を与えている。本論文では、 T は複数区間の和集合 $\cup_{j=1}^m [a_j, b_j]$ の設定で K と K^* の境界のパラメータ表示を与え、重みの具体的な公式を導く。

尤度比統計量を求めるためには、正值性の仮説の下での c の最尤推定量 \hat{c}_{ML} を求める必要がある。これは無制約の推定量 \hat{c} を K に直交射影することによって得られる。後で述べるように、そのための具体的な数値計算法として、対称錐計画や円筒代数分解を用いることができる。

本論文の構成は以下のとおりである。2章では c の分散が既知、未知それぞれの場合について階層的仮説 (4) に対する尤度比統計量の表現を導く。また尤度比統計量の帰無仮説の混合確率 (重み) を計算するためのチューブ法について、本論文に必要な範囲で要約する。3章では、この手法を本論文の検定に適用するため、 K と K^* の境界のパラメータ表示を導出し、重みの公式を導く。4章では、尤度比統計量の数値計算について述べる。また一つの数値例として Potthoff and Roy [6] のデータに対して本論文の検定を行う。

なお Kato and Kuriki [3] では、多項式の次数が4以下で T が単一区間の場合について、本論文と同じ検定問題を扱っている。そこで論じられている同時信頼区間の構成法は、本論文の設定でも有用である。

2. 尤度比検定とチューブ法

2.1. 尤度比統計量

正定値行列 Q によって定義される内積とノルムを

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

とおく. また, x の集合 A への射影を

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

と定義する. A が閉凸のとき, これは一意に存在する. 以下, Q が明らかなきときは単に $\langle x, y \rangle, \|x\|, \Pi(x|A)$ と書く.

回帰モデル (1) において σ^2 が既知のとき, \hat{c} は十分統計量であるので, \hat{c} を出発点として議論することができる. ここで \hat{c} は正規分布 $N_3(c, \Sigma)$ に従う. ただし $\Sigma = \sigma^2 \Sigma_0, \Sigma_0 = (\sum_{i=1}^N \psi(t_i) \psi(t_i)^T)^{-1}$ は計画行列の逆行列である.

σ^2 が未知のときの十分統計量は $(\hat{c}, \hat{\sigma}^2)$ である. ただし $\hat{\sigma}^2$ は回帰残差から計算される σ^2 の不偏推定量で, \hat{c} とは独立に, 自由度 $\nu = N - 4$ のカイ 2 乗分布の定数倍 $\sigma^2 \chi_\nu^2 / \nu$ に従う.

\hat{c} が正規分布 $N_3(c, \Sigma)$ に従うとき, 対立仮説 $H_1: c \in K$ の下での最尤推定量は \hat{c} の K への計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Sigma^{-1}}$ の下での直交射影である. また, H_0, H_2 の下での最尤推定量はそれぞれ $0, \hat{c}$ である. これらにより, 尤度比統計量は以下で与えられることが示される.

命題 1 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:

$$\lambda_{01} = \|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2, \quad \lambda_{12} = \|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2. \quad (5)$$

ここで $\hat{c}_K = \Pi_{\Sigma^{-1}}(\hat{c}|K)$ は \hat{c} の K への直交射影である. σ^2 が未知のとき, それぞれ

$$\beta_{01} = \frac{\|\hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2}{\|\hat{c}\|_{\Sigma^{-1}}^2 + \nu}, \quad \beta_{12} = \frac{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2}{\|\hat{c} - \hat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2 + \nu} \quad (6)$$

である. ここで, $\hat{\Sigma} = \hat{\sigma}^2 \Sigma_0, \hat{c}_K = \Pi_{\hat{\Sigma}^{-1}}(\hat{c}|K)$ である.

統計量が大きいとき帰無仮説が棄却される. (5), (6) において

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

であることにも注意する.

H_1 vs. H_2 の検定問題では, 帰無仮説が複合帰無仮説であるので, 最も不利な分布を特定する必要がある. Robertson, et al. [7] の 2.3 節と同様の方法で以下の命題が示される.

命題 2 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) Kato and Kuriki [3] を参照.

□

2.2. チューブ法

この節ではチューブ法の概要について、本論文で必要な範囲で説明する。

命題 1 の統計量 λ_{01} は、正規ランダムベクトル c の正多項式錐 K への直交射影の長さである。このような正規ランダムベクトルの凸錐への直交射影の分布については、順序制約の下での検定問題の文脈で多くの研究がなされている (Robertson, et al. [7]). 一般論より、 $H_0 : c = 0$ の下で (5) の $\lambda_{01}, \lambda_{12}$ について以下が成り立つ。

$$P_{H_0}(\lambda_{01} \geq a, \lambda_{12} \geq b) = \sum_{i=0}^3 w_i \bar{G}_i(a) \bar{G}_{3-i}(b). \quad (7)$$

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 $\bar{G}_0(a) = 1$ ($a \geq 0$), 0 ($a < 0$) とする。また (6) の β_{01}, β_{12} の分布は以下のように表される。

$$P_{H_0}(\beta_{01} \geq a, \beta_{12} \geq b) = \sum_{i=0}^3 w_i \bar{B}_{\frac{i}{2}, \frac{3-i}{2}}(a) \bar{B}_{\frac{3-i}{2}, \frac{i}{2}}(b). \quad (8)$$

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。

式 (8) の $\{w_i\}$ は式 (7) のものと同じである。各 i に対して w_i は非負であり、 $\sum_i w_i = 1$ をみたしている。すなわち $(\lambda_{01}, \lambda_{12})$ は、重みを $\{w_i\}$ とする独立な 2 変量カイ 2 乗分布の混合分布であり、また (β_{01}, β_{12}) は同じ重みをもつ独立な 2 変量ベータ分布の混合分布である。

$a = -\infty$ または $b = -\infty$ とおくことによって、 $\lambda_{01}, \lambda_{12}, \beta_{01}, \beta_{12}$ の周辺分布が得られる。 λ_{01} あるいは λ_{12} の分布は、カイパー 2 乗 (χ^2) 分布とよばれることがある (Shapiro [8], Takemura and Kuriki [10]).

K が多面錐の場合、 $\{w_i\}$ は各フェイスの内角および外角によって表される (Wynn [13]). 多面錐を含む一般の場合として、 K の境界 ∂K が区分的に滑らかな多様体である場合は、 $\{w_i\}$ は K の境界での第 2 基本形式の積分 (曲率測度) によって得られる (Takemura and Kuriki [10, 11]). 一般にこの積分の評価は容易ではないが、本論文で扱う K の場合は第 2 基本形式を含まない比較的扱いやすい形となる：

$$\begin{aligned} w_3 &= \frac{\text{Vol}_2(K \cap \mathbb{S}^2)}{\text{Vol}_2(\mathbb{S}^2)}, & w_2 &= \frac{\text{Vol}_1(\partial K \cap \mathbb{S}^2)}{2 \text{Vol}_1(\mathbb{S}^1)}, \\ w_1 &= \frac{\text{Vol}_1^*(\partial K^* \cap (\mathbb{S}^2)^*)}{2 \text{Vol}_1((\mathbb{S}^1)^*)}, & w_0 &= \frac{\text{Vol}_2^*(K^* \cap (\mathbb{S}^2)^*)}{\text{Vol}_2^*(\mathbb{S}^2)}. \end{aligned} \quad (9)$$

ここで K^* は K の法錐であり、モーメント錐

$$M[T] = \text{co}(\{\psi(t) \mid t \in T\})$$

の閉包 $K^* = K[T]^* = \overline{M[T]}$ と表される (Barvinok [1]). ただし $\text{co}(A)$ は A の錐包を表す。また $\partial K, \partial K^*$ はそれぞれ K, K^* の境界であり

$$\mathbb{S}^2 = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid \|x\|_{\Sigma^{-1}} = 1\}, \quad (\mathbb{S}^n)^* = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid \|x\|_{\Sigma} = 1\}$$

は単位球面である。 $\text{Vol}_d, \text{Vol}_d^*$ はそれぞれ計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Sigma^{-1}}, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\Sigma}$ により定義される d 次元の体積であ

る. 単位球面の体積は

$$\text{Vol}_{d-1}(\mathbb{S}^{d-1}) = \text{Vol}_{d-1}^*((\mathbb{S}^{d-1})^*) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$$

である. (9) の w_3, w_0 は 2次元積分, w_2, w_1 は 1次元積分による表現であることに注意しておく. さらに, ガウス・ボンネの定理より

$$\sum_{i:\text{even}} w_i = \sum_{i:\text{odd}} w_i = \frac{1}{2} \tag{10}$$

が成り立つ (Takemura and Kuriki [11]). これより関係式 $w_3 = 1/2 - w_1, w_0 = 1/2 - w_2$ が従い, すべての重みが 1次元数値積分で求められる.

図 1 に, T が有界単一区間の場合の正多項式錐とモーメント錐の例を示す.

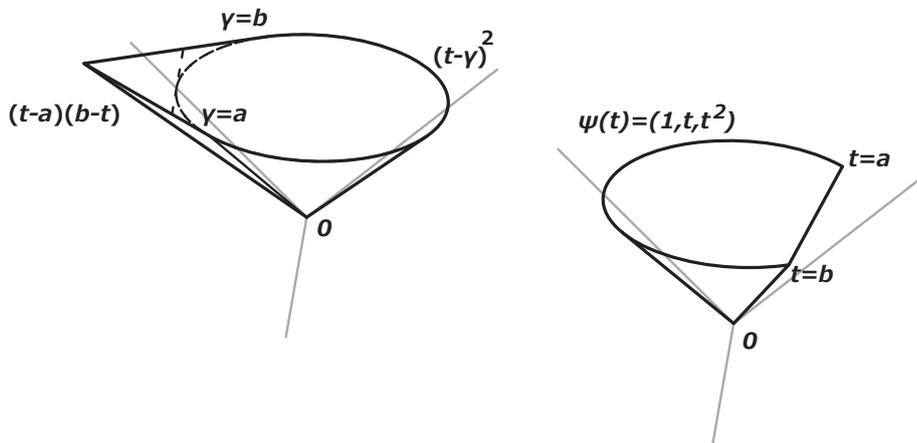


図 1. 正多項式錐 K (左) とモーメント錐 K^* (右)

以下では, $\nu = 0$ の場合の β_{01} の分布が, 「チューブの体積」を用いて解釈できることを示す. $M = K \cap \mathbb{S}^2$ を錐 K と単位球面との共通部分とする. 球面において, 集合 M のまわりの半径 θ の (球面) チューブを次のように定義する.

$$\text{Tube}(M, \theta) = \{x \in \mathbb{S}^2 \mid \min_{y \in M} \text{dist}(x, y) \leq \theta\}, \quad \text{dist}(x, y) = \cos^{-1}\langle x, y \rangle.$$

このとき

$$\beta_{01} = \frac{\|\Pi(\widehat{c}|K)\|^2}{\|\widehat{c}\|^2} \geq \cos \theta \Leftrightarrow \frac{\widehat{c}}{\|\widehat{c}\|} \in \text{Tube}(M, \theta)$$

であり, また H_0 の下で $\widehat{c}/\|\widehat{c}\|$ が単位球面上の一様分布に従うことから

$$\frac{\text{Vol}_2(\text{Tube}(M, \theta))}{\text{Vol}_2(\mathbb{S}^2)} = P_{H_0}(\beta_{01} \geq \cos \theta) = \sum_{i=0}^3 w_i \bar{B}_{\frac{i}{2}, \frac{3-i}{2}}(\cos \theta)$$

となる. これがチューブ法とよばれる所以である.

チューブ法自体は, 正規確率場の最大値分布の裾確率の近似するために方法として研究されて

おり、ここで述べたのはその特別の場合である（栗木・竹村 [4], Kuriki and Takemura [5] ならびにその引用文献を参照）。

なお一般の n 次多項式にたいする正值性検定の場合は、係数 w_{n+1}, w_n, w_1, w_0 に対して (9) と同様の式が成り立ち、またガウス・ボンネの定理 (10) もこのままの形で成り立つ。このことから多項式次数 n が 4 以下の場合は (9) の形の体積計算によって全ての重み $\{w_i\}_{0 \leq i \leq n+1}$ を求めることができる。詳細は Kato and Kuriki [3] を参照のこと。

3. 尤度比統計量の帰無分布

3.1. ∂K と ∂K^* のパラメータ表示

この章では、尤度比統計量の帰無分布の重み $\{w_i\}_{0 \leq i \leq 3}$ を計算する。先に触れたように数値積分の次数を考慮すると、 w_1, w_2 の計算は (9) により行い、 w_0, w_3 の計算はガウス・ボンネの関係式 (10) によるのが簡単である。

以下では w_2 と w_1 の計算のために、 ∂K と ∂K^* に対して局所座標 (1 対 1 のパラメータ表示) の導入を考える。表記を正確にするために 4 つの場合に分類する。

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

はじめに ∂K のパラメータ表示について考える。以下の定理は、正多項式 $f(t; c)$ が、正多項式錐の境界に含まれるための必要十分条件を与える。

補題 1 $f(t; c)$ を T 上正多項式 ($c \in K$) とする。 $c \in \partial K$ 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 で零点を持つ。
- (b) “ $a_1 = -\infty$ または $b_m = \infty$ ” かつ $f(t; c)$ は高々 1 次式。

(証明) Karlin and Studden [2] 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) が成り立つとき、 $f(t; c)$ の零点を $t_0 \in T$ とすると任意の $\varepsilon > 0$ に対し

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

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

$$f(t; c - \varepsilon(0, 0, 1)) = f(t; c) - \varepsilon f(t; (0, 0, 1)) = -\varepsilon t^2 + o(t^2)$$

は $|t|$ が十分大きいとき負になる。よって $c - \varepsilon(0, 0, 1) \notin K$ である。以上より $c \in \partial K$ 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 $t \in T$ と $c' \in \mathbb{R}^3$ に対して

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

ここで $c \in \text{int } K$, すなわち $f(t; c) > 0$ より十分小さな ε に対して右辺は正となる. $a_1 = -\infty$ 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 $c + \varepsilon c' \in K$, すなわち $c \in \text{int } K$ となる. \square

補題 1 の条件 (b) に現れる高々 1 次の T 上正多項式 $f(t; c)$ とは, a_1, b_m が有界ならば a_1, b_m で非負の値をとり, $a_1 = -\infty$ ならばその傾きは非正, $a_m = \infty$ ならばその傾きは非負であるような 1 次式である. それらは以下のように整理できる.

補題 2 T で非負の値をとる高々 1 次の多項式は以下のように表される.

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

ただし $\alpha, \beta \geq 0$.

補題 1, 2 を用いて ∂K の (ほとんど一意な) パラメータ表示を与えることができる.

命題 3 正多項式錐の境界を構成する非負多項式 $f(t; c)$, $c \in \partial K$ 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) 補題 1 に示したように, 正多項式錐の境界に含まれる非負多項式 $f(t; c)$, $c \in \partial K$ は補題 1 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.

$\gamma = a_{j+1}, b_j$ ($j = 1, \dots, m$) 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 2 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 2 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 1 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 2 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

いま証明した命題 3 は, 正多項式錐の境界 ∂K を構成する正多項式の関数形を与えている. 以下の命題は, 正多項式錐の境界 ∂K を多項式の係数ベクトルの形で表現するものであり, 数学的には命題 3 と等価である.

まず記法

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

を用意する. このとき

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

である. 同様に

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

とおくと $(t - a_1)(b_m - t), \alpha(t - a_1), \alpha(b_m - t), \alpha$ は $\varphi_m^\top \psi(t)$ と表わされる. 命題 3 と併せることにより ∂K のパラメータ表示を得る.

命題 4 α, β は非負の範囲を動くパラメータとする.

$$\partial K = \bigcup_{j=1}^m \left(\{ \alpha \varphi(t) \mid t \in [a_j, b_j] \} \cup \{ \alpha \varphi_j + \beta \varphi(b_j) \} \cup \{ \alpha \varphi_j + \beta \varphi(a_{j+1}) \} \right). \quad (11)$$

ただし $a_{m+1} = a_1$ とし, $t = \pm\infty$ のとき $\varphi(t) = (1, 0, 0)$ とする. また上式 (11) 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.

式 (11) 右辺でパラメータを $\alpha, \beta > 0$ に制限した集合と集合 ∂K の差は測度 (2次元ハウスドルフ測度) 0 であるので, 式 (11) 右辺のパラメータ表示は, ∂K の体積計算に用いることができる. その意味で, 命題 4 のパラメータ表示はほとんど一意である.

次にモーメント錐 ∂K^* の (ほとんど一意的な) パラメータ表示を考える. K^* は $\{ \psi(t) \mid t \in T \}$ の錐包の閉包であった. 錐 $\{ \alpha \psi(t) \mid t \in T, \alpha \geq 0 \}$ と平面 $\{ (x, y, z)^\top \mid x + z = 1 \}$ の切り口を考え, 切り口の (x, y) 座標を見る. 固定した t に対する半直線 $\{ \alpha \psi(t) \mid \alpha \geq 0 \}$ と平面との交点は $\psi(t)/(1 + t^2)$ で, その (x, y) 座標は

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

である。これは半径 $1/2$ の円周の一点である。これより錐 $\{\alpha\psi(t) \mid t \in T, \alpha \geq 0\}$ は、モーメント錐 K の端点 (extreme ray) をなすことがわかる。また円周上で隣接する $\psi(b_j)$ と $\psi(a_{j+1})$ (と原点) を含む半平面も ∂K^* の一部を構成することがわかる (図 1 (右) を参照)。

命題 5 α, β は非負の範囲を動くパラメータとする。

$$\partial K^* = \bigcup_{j=1}^m \left(\{\alpha\psi(t) \mid t \in [a_j, b_j]\} \cup \{\alpha\psi(b_j) + \beta\psi(a_{j+1})\} \right). \quad (12)$$

ただし $a_{m+1} = a_1$ とし, $t = \pm\infty$ のとき $\psi(t) = (0, 0, 1)^T$ とする。また上式 (12) 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。

式 (12) においても, 右辺でパラメータを $\alpha, \beta > 0$ に制限した集合と集合 ∂K^* の差は測度 (2 次元ハウスドルフ測度) 0 であり, 式 (12) 右辺のパラメータによって, ∂K^* の体積計算を行うことができる。

3.2. 重み $\{w_i\}$ の計算

この節では命題 4, 5 による ∂K と ∂K^* のパラメータ表示により重み w_i を具体的に計算する。(9) により w_1, w_2 はそれぞれ以下のように与えられていた:

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

関係式 (10) より w_2 と w_1 が計算できれば十分である。

はじめに命題 4 のパラメータ表示 (11) を用いて, w_2 の具体形を与える。 $\xi(t) = \varphi(t)/\|\varphi(t)\|_{\Sigma^{-1}}$ とおくことで

$$\{\alpha\varphi(t) \mid t \in [a_j, b_j], \alpha > 0\} \cap \mathbb{S}^2 = \{\xi(t) \mid t \in [a_j, b_j]\}$$

と表わされる。この部分に対応する体積 (長さ) は

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

である。次に

$$\{\alpha\varphi_j + \beta\varphi(b_j) \mid \alpha, \beta > 0\} \cap \mathbb{S}^2$$

について考える。これは $\varphi(b_j)/\|\varphi(b_j)\|_{\Sigma^{-1}}$ と $\varphi_j/\|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}}$ を結ぶ単位球面上の弧である。よってこの体積は

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

である。同様に

$$\{\alpha\varphi_j + \beta\varphi(a_{j+1}) \mid \alpha, \beta > 0\} \cap \mathbb{S}^2$$

の体積は

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

である。以上より

$$w_2 = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{a_j}^{b_j} \left\| \frac{d\xi(t)}{dt} \right\|_{\Sigma^{-1}} dt + \cos^{-1} \frac{\langle \varphi(b_j), \varphi_j \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi(b_j)\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}}} + \cos^{-1} \frac{\langle \varphi_j, \varphi(a_{j+1}) \rangle_{\Sigma^{-1}}}{\|\varphi_j\|_{\Sigma^{-1}} \|\varphi(a_{j+1})\|_{\Sigma^{-1}}} \right\} \quad (13)$$

を得る。

次に命題 5 のパラメーター表示 (12) を用いて, w_1 の具体形を与える。 $\eta(t) = \psi(t)/\|\psi(t)\|_{\Sigma}$ とおくと, 上と同様の手法により

$$w_1 = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{a_j}^{b_j} \left\| \frac{d\eta(t)}{dt} \right\|_{\Sigma} dt + \cos^{-1} \frac{\langle \psi(b_j), \psi(a_{j+1}) \rangle_{\Sigma}}{\|\psi(b_j)\|_{\Sigma} \|\psi(a_{j+1})\|_{\Sigma}} \right\} \quad (14)$$

を得る。

命題 6

$$\xi(t) = \frac{\varphi(t)}{\|\varphi(t)\|_{\Sigma^{-1}}}, \quad \eta(t) = \frac{\psi(t)}{\|\psi(t)\|_{\Sigma}}$$

とおく。 w_2, w_1 はそれぞれ式 (13), (14) で与えられる。 また

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

4. 数値計算

4.1. 最尤推定量 \hat{c}_K の数値計算

(5), (6) の尤度比統計量 $\lambda_{01}, \lambda_{12}, \beta_{01}, \beta_{12}$ を具体的に求めるためには, H_1 の下での c の最尤推定量, すなわち \hat{c} の K への直交射影 \hat{c}_K が必要である。この節ではその数値計算について説明する。

命題 3 により $c \in \partial K$ に対する $f(t; c)$ のパラメーター表示が与えられている。その系として以下が示される。

系 1 K の端点 (extreme ray) は以下の多項式から生成される錐である。

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

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 .

正多項式錐 K の任意の点は, 系 1 の多項式の錐結合で表される。さらに $\psi_1(t) = (1, t)^T$, Q を 2×2 半正定値行列 ($Q \geq 0$) とすると, 関数 $(t - \gamma)^2, \gamma \in T, 1$ の錐結合は常に $\psi_1(t)^T Q \psi_1(t)$ の形に表現できる。この考察より, T 上正多項式 $f(t; c)$ の (冗長な) パラメータ表示が与えられる。

命題 7 $T = \bigcup_{j=1}^m [a_j, b_j]$ 上正多項式 $f(t; c)$ は次の表現を持つ.

$$f(t; c) = \psi_1(t)^\top Q \psi_1(t) + \sum_{j=1}^{m-1} u_j (t - b_j)(t - a_{j+1}) + \begin{cases} u_m (b_m - t)(t - a_1) & (a_1 > -\infty, b_m < \infty), \\ u_m (t - a_1) & (a_1 > -\infty, b_m = \infty), \\ u_m (b_m - t) & (a_1 = -\infty, b_m < \infty). \end{cases} \quad (15)$$

ただし $\psi_1(t) = (1, t)^\top$. Q は 2×2 半正定値行列, $u_1, \dots, u_m \geq 0$.

(証明) 上で述べられているように, 系 1 で与えられた端点集合の錐結合は (15) の形である. また逆に, 多項式 (15) は T 上の正多項式である. \square

この表現から出発して直交射影 \widehat{c}_K を求める方法として, 対称錐計画 (symmetric cone programming) と円筒代数分解 (cylindrical algebraic decomposition) がある. 最初に前者について説明する.

式 (15) を変形することにより, 正多項式 $f(t; c)$ は $e(Q, u)^\top \psi(t)$ と表わすことができる. ここで $e(Q, u)$ は 3 次元の列ベクトルであり, その各成分は Q の成分と $u = (u_1, \dots, u_m)$ の 1 次関数である. 直交射影 \widehat{c}_K を求める操作は, 次の最適化問題に定式化される.

$$\begin{aligned} \text{目的関数} & \quad -d \rightarrow \text{最大化} \\ \text{制約条件} & \quad d \geq \|\widehat{c} - c\|_{\Sigma^{-1}}^2 \quad (2 \text{ 次錐制約}), \\ & \quad c = e(Q, u) \quad (\text{線形制約}), \\ & \quad Q \geq 0 \quad (\text{半正定値制約}), \\ & \quad u_1, \dots, u_m \geq 0 \quad (\text{不等式制約}) \end{aligned}$$

これは対称錐計画問題であり, 多くの計算ソフトウェア, 例えば SeDuMi (Sturm [9]) で計算することができる.

また $u_i = v_i^2$, Q を 2×2 行列 $R = (r_{ij})$ を用いて $Q = R^\top R$ と表せば, 最小化したい目的関数 $\|\widehat{c} - e(Q, u)\|_{\Sigma^{-1}}^2$ は, v_i, r_{ij} の多変数多項式となる. このとき v_i と r_{ij} については制約条件が課されないため, 制約条件なしの多変数多項式の最適化手法である円筒代数分解の方法によって最適化を行うことができる. これは Mathematica で実装されている ([12] およびその引用文献を参照).

4.2. 経時データに対する解析例

2 つの群のそれぞれについて 2 次多項式回帰曲線 $f(t; \widehat{c}_1)$, $f(t; \widehat{c}_2)$ が推定される場合を考える. 2 つの回帰曲線の差について正值性の仮説 H_1 は, 一方が他方に対して一様に大小関係を持つという優越性仮説と解釈することができる:

$$\text{任意の } t \in T \text{ に対して } f(t; c_1) - f(t; c_2) = f(t; c_1 - c_2) \geq 0.$$

この節では数値例として男子と女子の 2 群についての Potthoff and Roy [6] のデータを扱う. この標本は, それぞれの群について 8, 10, 12, 14 才での測定によって得られたものである.

ここでは \hat{c} の共分散の推定値 $\widehat{\Sigma}$ を数値的に安定に求めるために、11 を引いた年齢を説明変数 t とする。被験者 i の、時点 $t+11$ での目的変数 x_{it} に対して、以下の 2 次式による成長曲線モデルを考える。

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

ここで ε_{it} は各 i について独立に、平均 0、分散 $\text{Cov}(\varepsilon_{it}, \varepsilon_{it'})$ の正規分布に従うものとする。男子の群と女子の群それぞれに対し 2 次多項式 $f(t; c)$ のあてはめを行い、それらの差を求めた結果は以下の通りである：

$$\widehat{f}(t) = \widehat{c}_0 + \widehat{c}_1 t + \widehat{c}_2 t^2, \quad \widehat{c} = (1.968, 0.310, 0.053).$$

\widehat{c} の共分散行列は以下のように推定される：

$$\widehat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0.657 & 0.023 & -0.015 \\ 0.023 & 0.019 & -0.002 \\ -0.015 & -0.002 & 0.003 \end{pmatrix}.$$

以下では、 $\widehat{\Sigma}$ を既知の Σ としてみなした近似的な解析を行う。優越性の仮説 (3) を対立仮説として、2 群の同等性を検定する。ただし T として、

$$T = [-3, 3], \quad [-3, -1] \cup [1, 3], \quad \{-3, -1, 1, 3\}$$

の 3 つの場合に対して考える。この例においては、いずれの T の上でも $f(t; \widehat{c})$ は常に正の値をとるので $\widehat{c}_K = \widehat{c}$ である。よって

$$\lambda_{01} = \|\widehat{c}_K\|_{\Sigma^{-1}}^2 = \|\widehat{c}\|_{\Sigma^{-1}}^2 = 15.613$$

である。数値計算によって、尤度比検定量の帰無分布の重みが

$$\begin{aligned} (w_0, w_1, w_2, w_3) &= (0.030, 0.200, 0.470, 0.300) \quad (T = [-3, 3]), \\ &= (0.029, 0.198, 0.471, 0.302) \quad (T = [-3, -1] \cup [1, 3]), \\ &= (0.027, 0.198, 0.473, 0.302) \quad (T = \{-3, -1, 1, 3\}) \end{aligned}$$

と得られる。優越性の検定に対する p 値はそれぞれ $T = [-3, 3]$ のとき 0.000615, $T = [-3, -1] \cup [1, 3]$ のとき 0.000618, $T = \{-3, -1, 1, 3\}$ のとき 0.000619 となる。一方で一般的な同等性の尤度比検定 $H_0 : c = 0$ vs. $H_2 : c \in \mathbb{R}^3$ の p 値は 0.0014 である。この数値解析により、優越性の検定に対する 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。

参考文献

- [1] Barvinok, A. (2002). *A Course in Convexity*. AMS, Providence, Rhode Island.
- [2] Karlin, S. and Studden, W. (1966). *Tchebycheff Systems: With Applications in Analysis and Statistics*. Interscience Publishers, Wiley, New York.

- [3] Kato, N. and Kuriki, N. (2011). Likelihood ratio test for positivity in polynomial regressions. arXiv:1108.1033. <http://arxiv.org/abs/1108.1033>
- [4] 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.
- [5] Kuriki, S. and Takemura, A. (2009). Volume of tubes and the distribution of the maximum of a Gaussian random field. *Selected Papers on Probability and Statistics*, AMS Translations Series 2, **227**, No. 2, 25–48.
- [6] 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.
- [7] Robertson, T., Wright, F. T. and Dykstra, R. L. (1988). *Order Restricted Statistical Inference*. Wiley, Chichester.
- [8] Shapiro, A. (1988). Towards a unified theory of inequality constrained testing in multivariate analysis. *Internat. Statist. Rev.*, **56** (1), 49–62.
- [9] Sturm, J. F. (1999). Using SeDuMi 1.02, A Matlab toolbox for optimization over symmetric cones. *Optimization Methods and Software*, **11** (1), 625–653.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] Wolfram MathWorld. Cylindrical Algebraic Decomposition. <http://mathworld.wolfram.com/CylindricalAlgebraicDecomposition.html>
- [13] Wynn, H. P. (1975). Integrals for one-sided confidence bounds: a general result. *Biometrika*, **62**, 393–396.

(2011年6月15日受付 10月11日最終修正 10月15日採択)

著者連絡先：加藤 直広

〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3
 総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻
 Email: nkato@ism.ac.jp

Test for positivity in quadratic polynomial regression over intervals

Naohiro Kato* and Satoshi Kuriki

The Graduate University for Advanced Studies
and
The Institute of Statistical Mathematics / JST, CREST

Abstract

A polynomial that is nonnegative over a given domain T is called a positive polynomial. We consider the likelihood ratio test for the hypothesis of positivity that the estimand quadratic polynomial regression curve is a positive polynomial when T is the union of intervals. We define hierarchical hypotheses including the hypothesis of positivity, and derive their null distributions as mixtures of chi-square distributions. According to the volume-of-tube method, the mixing probabilities are obtained through the evaluation of the volumes of boundaries of the closed convex cone K consisting of quadratic positive polynomials and its dual K^* . We introduce the parameterizations of the boundaries of K and K^* , and then provide expressions for the mixing probabilities. We demonstrate that the symmetric cone programming is useful for obtaining numerically the test statistics.

Key words: chi-bar square distribution, moment cone, positive polynomial cone, repeated measurements, symmetric cone programming, Tchebycheff system.

*Corresponding author

E-mail address: nkato@ism.ac.jp

Received June 15, 2011; Received in final form October 11, 2011; Accepted October 15, 2011.