

# チューブの体積と正規確率場の最大値の分布

栗木 哲  
竹村 彰通

## 1 はじめに

### 1.1 多様体上の正規確率場

$\widetilde{M}$  を向きづけ可能な多様体とし, その上で定義された実数値確率場  $X(p)$ ,  $p \in \widetilde{M}$  を考える. ここではとくに連続で滑らかなサンプルパスを持つ正規確率場 (Gaussian random field) で, その 1 次元周辺分布が標準正規分布 (各  $p$  で  $X(p) \sim N(0, 1)$ ) であるものを扱う. 共分散関数を  $r(p, q) = \text{Cov}(X(p), X(q))$  とおく.  $r(p, q)$  が  $p = q$  の近傍で十分に滑らかならば, サンプルパスは確率 1 で滑らかとなり, その微分場  $\nabla X$ ,  $\nabla^2 X$  などが正規確率場として定義される. ブラウン運動や Ornstein-Uhlenbeck 過程などはここでは考えない.  $\widetilde{M}$  は, 点  $p$  において計量

$$g_{ij}(p) = \text{Cov}(X_i(p), X_j(p)) = \left. \frac{\partial^2 r(p, q)}{\partial t^i \partial s^j} \right|_{p=q} \quad (1.1)$$

が付与されていると考える. ここで  $t = (t^i)$ ,  $s = (s^i)$  を点  $p, q$  の局所座標とし  $X_i(p) = \partial X(p) / \partial t^i$  とおいた. 計量 (1.1) は次のような考えに基づく.

$\xi_1, \xi_2, \dots$  を独立に標準正規分布  $N(0, 1)$  に従う確率変数列とする. 一般に平均 0 の正規確率場は, 共分散関数から定義される再生核ヒルベルト空間 (RKHS) の正規直交基底  $\{\psi^k\}_{k \geq 1}$  により

$$X(p) = \sum_{k=1}^{\infty} \xi_k \psi^k(p) \quad (1.2)$$

と表現される ([2], Theorem 3.7). ただし分散が 1 であるので  $\sum_{k=1}^{\infty} \psi^k(p)^2 = 1$  である.  $\psi(p) = (\psi^k(p))_{k \geq 1}$  とおく. いま写像  $p \mapsto \psi(p)$  が  $\widetilde{M}$  から  $\ell^2$  への滑らかな単射を与える場合,  $\ell^2$  の内積によって,  $\widetilde{M}$  に計量が  $g_{ij}(p) = \sum_{k=1}^{\infty} (\partial \psi^k(p) / \partial t^i) (\partial \psi^k(p) / \partial t^j)$ , すなわち (1.1) の形で誘導される.

$M$  を  $\widetilde{M}$  のコンパクトな部分多様体とする. 本稿では, このような正規確率場の部分集合  $M$  における最大値の分布 (上側裾確率)

$$P\left(\max_{p \in M} X(p) \geq c\right) \quad (1.3)$$

を  $c$  が大きいときに近似する方法について解説する. 基本的な方針は,  $M$  の積分幾何学的な量を用いて (1.3) の近似式を与えるというものである.

なお (1.2) は, いわゆる Karhunen-Loève 展開 (KL 展開) を特殊な場合として含む表現である ([2]) が, 簡単のためここではこれを KL 展開とよぶことにする.

### 1.2 チューブ法とオイラー標数法

正規確率場の最大値分布 (1.3) を評価するための方法として, チューブ法 (tube method) とオイラー標数法 (Euler characteristic heuristic) が知られている. 本稿では, 著者 ([25], [28], [41], [42]), J. Taylor, R. Adler ([43], [5]), ならびに [44] の結果を中心に, この 2 つの方法について紹介する.

2章はチューブ法についての解説である。ここでチューブとは、球面上管状近傍のことを指す。統計学者の H. Hotelling [14] は、ある種の非線形回帰モデルにおける尤度比検定の有意確率とチューブの体積との対応を指摘し、球面上の曲線のまわりのチューブの体積公式を具体的に与えることによって有意確率の計算を行った。H. Weyl [46] はその結果を一般次元の場合へ一般化した。Hotelling-Weyl の定理は、微分幾何学の発展の歴史のなかで役割を担うことになる ([22], [12]) が、統計学においては長い間注目されることはなかった。比較的最近になって、Knowles-Siegmund [21], Sun [37], [38] は KL 展開 (1.2) が有限項で打ち切られる場合には、正規確率場の最大値の確率計算 (1.3) がチューブの体積評価に帰着することを指摘し、統計学への応用をいくつか与えた。この方法がチューブ法である。

本稿のもう一方の主題であるオイラー標数法については、3章で説明する。時刻  $t$  を添字とする確率過程  $X(t)$ ,  $t \in T \subset \mathbb{R}$  が滑らかなサンプルパスを持つとき、そのグラフ  $(t, X(t))$  が  $t$  軸に平行な直線  $X(t) = c$  を下から上へと横切る回数 (upcrossing) の期待値が評価できる ([20], [7])。  $c$  が大きいときに、その回数の期待値を確率過程の最大値の上側裾確率  $P(\max_{t \in T} X(t) \geq c)$  の近似として用いることが、信号処理などの分野で古くから行われていた。その方法の多次元への一般化として、Adler と A.M. Hasofer ([4], [13], [1] など) により提案され、Worsley ([48], [49] など) によって整理、実用化された方法論がオイラー標数法である。

チューブ法とオイラー標数法の関係は当初は明確ではなかった ([3]) が、著者 [25], [41] によって、有限 KL 展開を持つ正規確率場の場合には、両者は同一であることが示された。オイラー標数法はチューブ法よりも汎用的な方法であり、数学的にはチューブ法はオイラー標数法に含まれるものであるとよい。しかしながらチューブ法は多変量解析への応用を多く持つこと ([28], [29], [23])、またチューブ法による幾何学的な描像が具体的であり、チューブ法の誤差評価法の類似がオイラー標数法に対しても適用できることから、ここでは分けて説明する。オイラー標数法の最新の結果は、Adler-Taylor [5] の近刊にまとめられている。

ところで統計学において、確率場の最大値分布の計算の需要は大きい。各点  $p$  について  $X(p)$  が検定統計量に対応する場合、(1.3) は多重検定における多重性調整  $p$  値に対応する。また錐を対立仮説とする検定問題において、尤度比検定統計量の漸近帰無分布は平均 0, 分散 1 の正規確率場の最大値の分布となり、チューブ法の適用範囲となる ([40], [31])。この場合を含めて、特異モデル (局所錐型モデル) とよばれるクラスの非正則パラメトリック統計モデルにおいて、尤度比の漸近分布が正規確率場の最大値の分布となることが知られている ([8], [11])。そもそも Hotelling の非線形回帰モデルは特異モデルの典型例であった。これらの仮説検定の文脈では、上側裾確率 (例えば上側 5% 点) が必要となるので、 $c$  が大きいときに成り立つ近似は有用である。

4章で統計学への応用例を2つ紹介するが、それ以外の例については [29], [11], [24] を参照のこと。チューブ法、オイラー標数法に密接に関連する他の話題としては、同時信頼領域の改良 ([33], [17], [39])、離散チューブ法 ([34], [35], [36]) がある。

## 2 チューブ法

### 2.1 チューブの体積と最大値の分布

KL 展開が有限の  $n$  項で打ち切られる場合、問題の標準形を次のようにおくことができる。  $\mathbb{S}^{n-1} =$

$\mathbb{S}(\mathbb{R}^n)$  を  $\mathbb{R}^n$  の単位球面とし,  $M \subset \mathbb{S}^{n-1}$  を閉部分集合とする.  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  を各成分が独立に標準正規分布に従う確率ベクトルとする. ( $\xi \sim N_n(0, I_n)$  と表す.)  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  を  $\mathbb{R}^n$  の標準的内積とする. 問題は, 正規確率場  $X(p) = \langle \xi, p \rangle$ ,  $p \in M$  の最大値の分布

$$P\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) \quad (2.1)$$

を求めることである. これは 1 章の説明において,  $\psi(M)$ ,  $\psi(\widetilde{M})$  を  $M$ ,  $\mathbb{S}^{n-1}$  とおくことに相当する.  $\mathbb{S}^{n-1}$  の点で,  $M$  からの大円距離が一定値  $\theta$  以下の点の集合

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

を,  $M$  を中心とする半径  $\theta$  のチューブ (球面チューブ) という.  $n$  次元標準正規分布  $\xi \sim N_n(0, I_n)$  においては, その“長さ”  $\|\xi\|$  と“方位”  $\zeta = \xi/\|\xi\|$  は独立に分布し, とくに  $\zeta$  は球面上の一様分布  $\text{Unif}(\mathbb{S}^{n-1})$  に従う. このことから

$$\begin{aligned} P\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) &= E \left[ P\left(\max_{p \in M} \langle \zeta, p \rangle \geq \frac{c}{\|\xi\|} \mid \|\xi\|\right) \right] \\ &= E \left[ P\left(\text{dist}(\zeta, M) \leq \cos^{-1}\left(\frac{c}{\|\xi\|}\right) \mid \|\xi\|\right) \right] \\ &= \frac{1}{\text{Vol}(\mathbb{S}^{n-1})} E \left[ \text{Vol}\left(M_{\cos^{-1}(c/\|\xi\|)}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.2)$$

ただし  $\text{Vol}(\cdot)$  は  $n-1$  次元体積である. もし, チューブの体積  $\text{Vol}(M_\theta)$  が任意の半径  $\theta$  について与えられていれば, それを一回積分する (すなわち  $\|\xi\|$  の分布で期待値をとる) ことによって最大値の上側確率 (2.1) が得られる. さらに  $\|\xi\|$  の 2 乗は自由度  $n$  のカイ 2 乗分布に従うことから, この期待値を積分で書き下して若干の式変形を行うと

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

となる. これより  $\text{Vol}(M_\theta)$  と上側確率 (2.1) が実質的にラプラス変換・逆変換の関係にあり, 両者は 1 対 1 であること, また  $\theta \downarrow 0$  のときの  $\text{Vol}(M_\theta)$  の漸近挙動と,  $c \uparrow \infty$  のときの上側確率 (2.1) の漸近挙動とが対応することがわかる. 次節で示すように, 半径  $\theta$  が小さい範囲ではチューブの体積  $\text{Vol}(M_\theta)$  は計算が容易である. その情報を用いて最大値の上側確率の  $c \uparrow \infty$  の裾確率の近似を与えるということが, チューブ法の基本的な考え方である.

## 2.2 チューブ体積の評価

チューブ  $M_\theta$  の体積を求めるために,  $M$  に関する条件をおく. チューブ法の, とくに多変量解析への応用を考えると, 添字集合  $M$  として線形不等式や行列の半正定値制約, あるいはそれらの組み合わせによって定義される複雑なものを取り扱う必要がある ([26], [23]). それらへの応用を念頭において, “境界のある多様体” を拡張する形で “区分的に滑らかな多様体” を定義する ([41]).

**仮定 1**  $M$  は  $m$  次元  $C^2$  閉多様体, もしくは区分的に滑らかな  $m$  次元コンパクト  $C^2$  多様体とする. ここで  $M$  が区分的に滑らかな  $m$  次元  $C^r$  多様体であるとは,

(i)  $M$  は排反な分割  $M = \bigsqcup_{d=0}^m \partial M_d$  ( $\partial M_m \neq \emptyset$ ) を持ち, 各  $\partial M_d$  は有限個の連結成分を持つ  $d$

次元  $C^r$  多様体, かつ

(ii)  $M$  は各点  $p \in \partial M_d$  の近傍で閉凸錐  $\mathbb{R}^d \times K$  ( $K \subset \mathbb{R}^{m-d}$  はプロパーな  $m-d$  次元閉凸錐) の原点近傍と  $C^r$  微分同相, であることをいう.

区分的に滑らかな多様体  $M$  の境界と内点は, それぞれ  $\partial M = \bigsqcup_{d=0}^{m-1} \partial M_d$ ,  $\text{int } M = \partial M_m$  である.

仮定 1 (ii) では, とくに  $K$  が凸錐であることを要請している. この仮定より,  $M$  はその各点  $p$  でつねに凸の接錐  $S_p M$  を持つ.  $M \subset \mathbb{S}^{n-1}$  なので,  $\mathbb{S}^{n-1}$  の点  $p$  における接空間を  $T_p \mathbb{S}^{n-1} = \{v \in \mathbb{R}^n \mid \langle v, p \rangle = 0\}$  とおくと  $S_p M \subset T_p \mathbb{S}^{n-1}$  である.

接錐  $S_p M$  の, 接空間  $T_p \mathbb{S}^{n-1}$  における双対錐 (法錐) を

$$N_p M = \{v \in T_p \mathbb{S}^{n-1} \mid \langle v, u \rangle \leq 0, \forall u \in S_p M\}$$

とおく. 直和分解  $T_p \mathbb{S}^{n-1} = S_p M \oplus N_p M$  に注意する.

$q$  を  $M$  に含まれない  $\mathbb{S}^{n-1}$  の点とする.  $\min_{p \in M} \text{dist}(q, p)$  を達成する  $p = \text{pr}(q)$  を “ $q$  の  $M$  への射影” とよぶ. 各  $q \in \mathbb{S}^{n-1} \setminus M$  は,  $p = \text{pr}(q)$ ,  $\psi = \text{dist}(q, p)$ ,  $v = (q - p \cos \psi) / \sin \psi$  とおき

$$q = p \cos \psi + v \sin \psi, \quad v \in \mathbb{S}(N_p M) \quad (\text{ただし } \mathbb{S}(N_p M) = N_p M \cap \mathbb{S}^{n-1})$$

と表すことができる.

$q$  が  $M$  から離れていない点の場合には  $\text{pr}(q)$  が一意に存在するが,  $M$  から離れている場合には,  $q$  から等距離の異なる 2 点  $p, p' \in M$  が距離の最小値を与える可能性がある.  $\text{pr}(q)$  の一意性を保証する距離の最大値は臨界半径とよばれる.

**定義 1 (臨界半径)**  $M_\theta \setminus M$  の任意の点  $q$  が

$$q = p \cos \psi + v \sin \psi, \quad p \in M, v \in \mathbb{S}(N_p M), \psi \in (0, \theta]$$

と一意に表されるとき, “チューブ  $M_\theta$  は自己交差しない” という. チューブが自己交差しないような半径  $\theta$  の上界

$$\theta_c = \sup\{\theta \geq 0 \mid M_\theta \text{ が自己交差しない}\}$$

を  $M$  の臨界半径 (critical radius, reach) という (図 1).

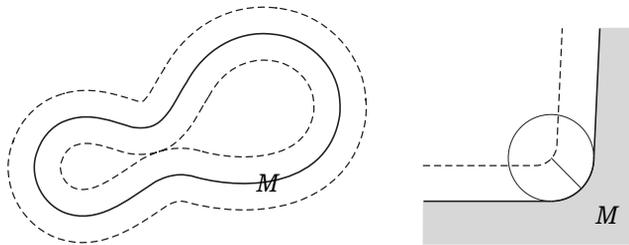


図 1: 臨界半径を半径とするチューブ

**定理 1 ([42])**  $M \subset \mathbb{S}^{n-1}$  が仮定 1 を満たすとき, その臨界半径  $\theta_c$  は正である.

定義 1 より,  $\theta < \theta_c$  の範囲でチューブ  $M_\theta$  は自己交差しない. また  $q \in M_\theta \setminus M$  は, 3 つ組  $(p, v, \psi)$

によって一意に表現できる. この3つ組は,  $q$  のチューブ座標 (フェルミ座標) という (図 2).

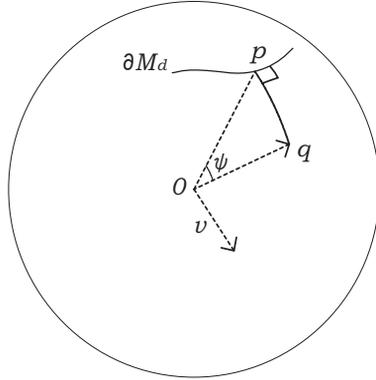


図 2: チューブ座標 (フェルミ座標)

チューブ座標への変換  $q \leftrightarrow (p, v, \psi)$  のヤコビアンは以下のように与えられる.

**補題 1** ([27], [41])  $q \in M_\theta \setminus M$  の  $M$  への射影先が  $p = \text{pr}(q) \in \partial M_d$  であるとする.

$$dS^{n-1}(q) = \det(I_d \cos \psi + H_p(v) \sin \psi) \sin^{n-d-2} \psi dM_d(p) d\psi dS_p^{n-d-2}(v). \quad (2.3)$$

ここで  $dS^{n-1}(q)$  は  $S^{n-1}$  の  $q$  における体積要素,  $dM_d(p)$  は  $\partial M_d$  の  $p$  における体積要素,  $dS_p^{n-d-2}(v)$  は  $\mathbb{S}(N_p M)$  の  $v$  における体積要素, また  $d \times d$  行列  $H_p(v)$  は,  $\partial M_d$  の  $p$  における第 2 基本形式の  $v$  成分で, その  $(i, j)$  成分は,  $p$  における正規座標系  $p = \phi(t)$ ,  $t = (t^i)_{1 \leq i \leq d}$  によって  $\langle -\partial^2 \phi / \partial t^i \partial t^j, v \rangle|_p$  と定義される.

式 (2.3) の  $dS^{n-1}(q)$  を  $p \in \partial M_d$ ,  $v \in \mathbb{S}(N_p M)$ ,  $0 \leq \psi \leq \theta$  の範囲で積分し, さらにすべての  $d$  で足し合わせるにより, 臨界半径よりも小さい半径のチューブの体積を得る.

**定理 2 (チューブの体積, [41])**  $0 \leq \theta \leq \max(\theta_c, \pi/2)$  のとき

$$\begin{aligned} \text{Vol}(M_\theta) &= \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-d-2}(v) \int_0^\theta d\psi \\ &\quad \times \det(I_d \cos \psi + H_p(v) \sin \psi) \sin^{n-d-2} \psi \\ &= \Omega_n \sum_{e=0}^m w_{m+1-e} \bar{B}_{(m+1-e)/2, (n-m-1+e)/2}(\cos^2 \theta). \end{aligned} \quad (2.4)$$

ここで  $\Omega_n = \text{Vol}(S^{n-1}) = 2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$ ,

$$w_{m+1-e} = \frac{1}{\Omega_{m+1-e} \Omega_{n-m-1+e}} \sum_{d=m-e}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS^{n-d-2}(v) \text{tr}_{d-m+e} H_p(v),$$

$\text{tr}_l$  は行列の固有値の  $l$  次基本対称式 (例えば  $\text{tr}_0 A = 1$ ,  $\text{tr}_1 A = \text{tr} A$ ,  $\text{tr}_d A = \det A$ ), また

$$\bar{B}_{a,b}(c) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \int_c^1 (1-t)^{a-1} t^{b-1} dt$$

はパラメータ  $(a, b)$  のベータ分布の上側確率である.

式 (2.4) の 2 番目の等号は、行列式の展開公式  $\det(I_d + A) = \sum_{l=0}^d \text{tr}_l A$  より従う。

上で得られたチューブ体積公式は、半径  $\theta$  が小さいときにのみ正しく体積を与えるものである。このチューブ体積公式が、すべての  $\theta$  について正しい値を返すものとみなして、機械的に (2.2) を適用してしまう方法がチューブ法である。(2.4) において  $\theta := \cos^{-1}(c/\|\xi\|)$  とおき、 $\|\xi\|^2 \sim \chi_n^2$  について期待値をとると以下を得る。

**定理 3** (チューブ法近似, [41]) 正規確率場の最大値の上側確率 (2.1) のチューブ法近似は

$$\begin{aligned} \hat{P}\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-d-2}(v) \\ &\quad \times \int_c^\infty dr \int_0^\infty ds e^{-(r^2+s^2)/2} \det(rI_d + sH_p(v)) s^{n-d-2} \\ &= \sum_{e=0}^m w_{m+1-e} \bar{G}_{m+1-e}(c^2) \end{aligned} \quad (2.5)$$

で与えられる。ただし

$$\bar{G}_\nu(c) = \frac{1}{2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2)} \int_c^\infty t^{\nu/2-1} e^{-t/2} dt$$

は自由度  $\nu$  のカイ 2 乗分布の上側確率である。(確率測度  $P$  の近似という意味で記号  $\hat{P}$  を用いた。)

ここで提案されたチューブ法近似が、正規確率場の最大値の上側裾確率のよい近似を与えていることを、これから順に確認してゆく。

### 2.3 臨界半径の評価

ここでは臨界半径  $\theta_c$  の評価法を与える。このことを通して、正確なチューブ体積公式を与える。ここで説明する誤差評価の議論は、Taylor, *et al.* [44] がより一般的な設定で展開しているものである。各  $p \in M$  について、 $p$  を射影先に持つ点の集合

$$\text{pr}^{-1}(\{p\}) = \{q \in \mathbb{S}^{n-1} \mid p = \text{pr}(q)\}$$

の形を特定したい。 $q = p \cos \psi + v \sin \psi$  ( $v \in \mathbb{S}(N_p M)$ ) と書いていた。 $p$  は  $q$  から距離最小の  $M$  の点なので  $\text{dist}(q, p') > \text{dist}(q, p)$ ,  $\forall p' \in M \setminus \{p\}$ . これを変形して

$$\cot \psi > \frac{\langle v, p' \rangle}{1 - \langle p, p' \rangle}, \quad \forall p' \in M \setminus \{p\}.$$

これより、 $\text{pr}(q) = p$  ならば  $\psi = \cos^{-1}\langle q, p \rangle$  は

$$\psi \leq \theta_c(p, v), \quad \text{ただし} \quad \cot \theta_c(p, v) = \sup_{p' \in M \setminus \{p\}} \frac{\langle v, p' \rangle}{1 - \langle p, p' \rangle}$$

を満たす。逆に  $\psi < \theta_c(p, v)$  ならば、任意の  $v \in N_p M$  について  $q = p \cos \psi + v \sin \psi$  で定まる  $q$  について  $\text{pr}(q) = p$  である。以上から

$$\begin{aligned} \left\{ p \cos \psi + v \sin \psi \mid v \in \mathbb{S}(N_p M), 0 \leq \psi < \theta_c(p, v) \right\} &\subset \text{pr}^{-1}(\{p\}) \\ &\subset \left\{ p \cos \psi + v \sin \psi \mid v \in \mathbb{S}(N_p M), 0 \leq \psi \leq \theta_c(p, v) \right\}. \end{aligned}$$

最左辺と最右辺の差は測度 0 なので、(2.4) において  $\psi$  の積分範囲を  $\psi < \theta_c(p, v)$  に限定することによって、半径が  $\theta_c$  をこえるチューブであっても重なりなく (自己交差することなく) 積分することができる。

**定理 4 (正確なチューブの体積, [42])**

$$\begin{aligned} \text{Vol}(M_\theta) &= \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-d-2}(v) \int_0^\theta d\psi \\ &\quad \times 1_{\{\psi < \theta_c(p, v)\}} \det(I_d \cos \psi + H_p(v) \sin \psi) \sin^{n-d-2} \psi. \end{aligned}$$

ここで  $1_{\{\cdot\}}$  は、0, 1 の値をとる指示関数である。

定理 3 の導出と同じ操作によって、以下が得られる。

**定理 5 (正規確率場の最大値分布, [42])**

$$\begin{aligned} P\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-d-2}(v) \int_c^\infty dr \int_0^\infty ds \\ &\quad \times 1_{\{r > s \cot \theta_c(p, v)\}} e^{-(r^2+s^2)/2} \det(rI_d + sH_p(v)) s^{n-d-2}. \end{aligned} \tag{2.6}$$

ところで  $\theta_c(p, v)$  は次のように解釈できる。  $p \in M$  を始点とし、方向  $v \in \mathbb{S}(N_p M)$  に延していった大円の円弧 (すなわち指数写像) を考えたとき、その弧の長さが  $\theta_c(p, v)$  未満ならば、他の点  $p' \in M$  を始点とし方向を  $v' \in \mathbb{S}(N_{p'} M)$  とする同じ長さの円弧と交差しない。これより半径が  $\theta_c = \inf_{p \in M, v \in \mathbb{S}(N_p M)} \theta_c(p, v)$  未満のチューブは自己交差をおこさない。またそれをこえる半径のチューブは必ずどこかで自己交差をおこす。これは  $\theta_c$  が臨界半径であることに他ならない。すなわち次が成り立つ。

**定理 6 ([11], 3.4 節)**

$$\cot \theta_c = \sup_{p \in M, q \in M \setminus \{p\}} \frac{\max_{v \in \mathbb{S}(N_p M)} \langle v, q \rangle}{1 - \langle p, q \rangle}.$$

$\max_{v \in \mathbb{S}(N_p M)} \langle v, q \rangle$  は、 $\mathbb{R}^n$  のベクトル  $q$  の、錐  $N_p M \subset \mathbb{R}^n$  への直交射影の長さであることに注意する。

## 2.4 チューブ法の誤差評価

チューブ法近似の誤差  $\Delta P(c)$  は、式 (2.5) と式 (2.6) の差で与えられる：

$$\begin{aligned} \Delta P(c) &= \widehat{P}\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) - P\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} dM_d(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-d-2}(v) \int_c^\infty dr \int_0^\infty ds \\ &\quad \times 1_{\{c \leq r \leq s \cot \theta_c(p, v)\}} e^{-(r^2+s^2)/2} \det(rI_d + sH_p(v)) s^{n-d-2}. \end{aligned}$$

$\det(rI_d + sH_p(v)) = \sum_{l=0}^d r^{d-l} s^l \text{tr}_l H_p(v)$  と展開して得られる各項を  $H_p(v)$  の固有値の上界を用いて上から押さえ、また積分範囲を制約している指示関数を

$$\mathbf{1}_{\{c \leq r \leq s \cot \theta_c(p,v)\}} \leq \mathbf{1}_{\{c \leq r\}} \mathbf{1}_{\{c \tan \theta_c \leq s\}}$$

と上から押さえ、その範囲で  $r, s$  について積分することにより、誤差の上界を示すことができる。

**定理 7** ([28]) 定数  $K$  が存在し、

$$|\Delta P(c)| \leq K \bar{G}_n((1 + \tan^2 \theta_c)c^2) \quad (= O(c^{n-2}e^{-(1+\tan^2 \theta_c)c^2/2}), c \rightarrow \infty).$$

臨界半径  $\theta_c$  が大きければ大きいほど、誤差は小さくなる。定理 3 で与えたチューブ法近似 (2.5) の各項は  $c \rightarrow \infty$  のとき  $\bar{G}_\nu(c^2) = O(c^{\nu-2}e^{-c^2/2})$  であるので、 $\theta_c > 0$  である限り誤差は近似公式の各項よりも指数的小量となる。

## 2.5 閉多様体の場合

最後に多様体  $M$  が  $m$  次元閉多様体である場合を考える。チューブ法の近似公式は

$$\begin{aligned} \hat{P}\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_M dM(p) \int_{\mathbb{S}(N_p M)} dS_p^{n-m-2}(v) \\ &\quad \times \int_c^\infty dr \int_0^\infty ds e^{-(r^2+s^2)/2} \det(rI_m + sH_p(v)) s^{n-m-2} \end{aligned}$$

であった。ここで  $dM(p)$  は  $M$  の  $p$  における体積要素である。

$N_p M$  は線形空間となるので、対称性から第 2 基本形式の奇数個の積の ( $v$  に関する) 積分は 0 となる。 $v$  と  $s$  に関する積分を考える。測度

$$\frac{1}{(2\pi)^{(n-m-1)/2}} dS_p^{n-m-2}(v) e^{-s^2/2} s^{n-m-2} ds \quad (v \in \mathbb{S}(N_p M), s \in (0, \infty))$$

は確率測度となる。この測度の下で確率変数  $sv$  は、線形空間  $N_p M$  上の標準正規分布となる。

$sH_p(v) = H_p(sv)$  なので、被積分関数の  $s, v$  に関する積分は、確率変数  $sv$  の期待値として表される。

以下では  $M$  上共変テンソル (場) を考えるが、簡単のためにその成分は正規直交標構に関するものとする。

階数が偶数  $2k$  の  $M$  上共変テンソル  $A = (a_{i_1 \dots i_k; j_1 \dots j_k})$  で、添字の前半  $i_1, \dots, i_k$  と後半  $j_1, \dots, j_k$  のそれぞれについて対称的であるものを  $(k, k)$  型の 2 重形式 (double form) とよび、その全体を  $D^{k,k} = D^{k,k}(M)$  とおく ([12])。

2 つの 2 重形式  $A = (a_{i_1 \dots i_k; j_1 \dots j_k}) \in D^{k,k}$ ,  $B = (b_{i_1 \dots i_l; j_1 \dots j_l}) \in D^{l,l}$  に対して、積  $AB = C = (c_{i_1 \dots i_{k+l}; j_1 \dots j_{k+l}}) \in D^{k+l, k+l}$  が

$$c_{i_1 \dots i_{k+l}; j_1 \dots j_{k+l}} = \frac{1}{k!l!} \sum_{\pi, \sigma \in S_{k+l}} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\sigma) a_{i_{\pi(1)} \dots i_{\pi(k)}; j_{\sigma(1)} \dots j_{\sigma(k)}} b_{i_{\pi(k+1)} \dots i_{\pi(k+l)}; j_{\sigma(k+1)} \dots j_{\sigma(k+l)}}$$

によって定義される。ここで  $S_{k+l}$  は  $\{1, \dots, k+l\}$  の置換の全体である。2 重形式の全体  $\bigoplus_{k \geq 0} D^{k,k}$  は可換代数をなしている。

任意の 2 階共変テンソル  $A = (a_{ij})$  は、 $(1, 1)$  型の 2 重形式とみなすことができる。 $(A^2)_{i_1 i_2; j_1 j_2} = 2(a_{i_1 j_1} a_{i_2 j_2} - a_{i_1 j_2} a_{i_2 j_1})$ ,  $(AB)_{i_1 i_2; j_1 j_2} = a_{i_1 j_1} b_{i_2 j_2} - a_{i_1 j_2} b_{i_2 j_1} - a_{i_2 j_1} b_{i_1 j_2} + a_{i_2 j_2} b_{i_1 j_1}$  などが成り立つ。また曲率テンソルは  $(2, 2)$  型の 2 重形式である。

2 重形式  $A \in D^{k,k}$  のトレースを

$$\mathrm{Tr} A = \mathrm{Tr}(a_{i_1 \dots i_k; j_1 \dots j_k}) = \frac{1}{k!} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m a_{i_1 \dots i_k; i_1 \dots i_k}$$

で定義する. このとき以下の公式が成り立つ ([9], [43]).

(i) (1, 1) 型の 2 重形式  $A = (a_{i;j})_{m \times m}$  を正方行列とみなしたときの行列式を  $\det A$  とするとき

$$\det A = \frac{1}{m!} \mathrm{Tr}(A^m).$$

(ii)  $A = (a_{i_1 \dots i_k; j_1 \dots j_k}) \in D^{k,k}$  ( $1 \leq i_1, \dots, j_k \leq m$ ),  $I = (\delta_{i;j}) \in D^{1,1}$  ( $m \times m$  単位行列) とするとき

$$\mathrm{Tr}(AI^j) = \frac{(m-k)!}{(m-k-j)!} \mathrm{Tr} A.$$

とくに

$$\mathrm{Tr}(I^j) = \frac{m!}{(m-j)!}.$$

$V$  を線形空間  $N_p M$  の上の標準正規分布とする. 点  $p$  における第 2 基本形式の  $V$  成分  $H(V) = (H_{ij}(V))$  を (1, 1) 型の 2 重形式とみなす. 曲率テンソルと第 2 基本形式の関係 (ガウスの方程式) は

$$-R_{ijkl} = E[H_{ik}(V)H_{jl}(V) - H_{il}(V)H_{jk}(V)] + (\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk})$$

である ([46]) が, これは 2 重形式の言葉で  $-R = (1/2)(E[H(V)^2] + I^2)$  と表される. 正規分布のモーメントに関する性質から以下が従う.

**補題 2** ([43])

$$E[H(V)^{2j}] = \frac{(2j)!}{j!2^j} (-2R - I^2)^j.$$

$j = 1$  の場合がガウスの方程式に他ならない. 以下では  $H(V) = H$  と略記する.

$$\begin{aligned} E[\det(rI_m + H)] &= \frac{1}{m!} E[\mathrm{Tr}(rI + H)^m] \\ &= \frac{1}{m!} \sum_{j=0}^{[m/2]} \binom{m}{2j} r^{m-2j} E[\mathrm{Tr}(I^{m-2j} H^{2j})] \\ &= \sum_{j=0}^{[m/2]} \frac{1}{(2j)!} r^{m-2j} E[\mathrm{Tr}(H^{2j})] \\ &= \sum_{j=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^j}{j!} r^{m-2j} \mathrm{Tr}\left(R + \frac{1}{2}I^2\right)^j. \end{aligned} \quad (2.7)$$

両辺を

$$\frac{1}{(2\pi)^{(m+1)/2}} \int_M dM(p) \int_c^\infty e^{-r^2/2} dr \quad (2.8)$$

で積分すると次を得る.

定理 8 (閉多様体の場合 (その 1), [43])

$$\widehat{P}\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) = \sum_{j=0}^{[m/2]} w_{m+1-2j} \bar{G}_{m+1-2j}(c^2), \quad (2.9)$$

$$w_{m+1-2j} = \frac{(-1)^j \Gamma((m+1)/2 - j)}{\pi^{(m+1)/2} 2^{j+1} j!} \int_M \text{Tr}\left(R + \frac{1}{2} I^2\right)^j dM(p). \quad (2.10)$$

公式の別表現を得るために展開を続ける.

$$\begin{aligned} \text{式 (2.7) 最右辺} &= \sum_{j=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^j}{j!} r^{m-2j} \sum_{l=0}^j \binom{j}{l} \frac{1}{2^{j-l}} \text{Tr}(R^l I^{2(j-l)}) \\ &= \sum_{j=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^j}{j! 2^j} r^{m-2j} \sum_{l=0}^j \binom{j}{l} 2^l \frac{(m-2l)!}{(m-2j)!} \text{Tr} R^l \\ &\quad (k = j - l \text{ とおくことにより}) \\ &= \sum_{l=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^l}{l!} \text{Tr} R^l \sum_{k=0}^{[(m-2l)/2]} \frac{(-1)^k}{2^k k!} \frac{(m-2l)!}{(m-2l-2k)!} r^{m-2l-2k} \\ &= \sum_{l=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^l}{l!} \text{Tr} R^l H_{m-2l}(r). \end{aligned}$$

ここで

$$H_n(r) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k}{2^k k!} \frac{n!}{(n-2k)!} r^{n-2k}$$

は  $n$  次エルミート多項式. 再び (2.8) で積分する.

定理 9 (閉多様体の場合 (その 2), [43])

$$\widehat{P}\left(\max_{p \in M} \langle \xi, p \rangle \geq c\right) = \frac{1}{(2\pi)^{(m+1)/2}} \sum_{l=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^l}{l!} e^{-c^2/2} H_{m-2l-1}(c) \int_M \text{Tr} R^l dM(p). \quad (2.11)$$

ただし  $e^{-c^2/2} H_{-1}(c) = \int_c^\infty e^{-r^2/2} dr$ .

### 3 オイラー標数法

#### 3.1 エクスカーション集合

本章では, 連続で滑らかなサンプルパスを持つ確率場の最大値の分布を近似するためのもう一つの方法であるオイラー標数法を概観する. 近似公式の具体形, (有限 KL 展開を持つ正規確率場に適用した場合の) チューブ法との同定性, および誤差評価の考え方について順に説明する.

$\widetilde{M}$  を向きづけ可能な  $m$  次元  $C^3$  多様体とする.  $\widetilde{M}$  上で定義され,  $C^2$  級のサンプルパスを持つ確率場  $X(p)$ ,  $p \in \widetilde{M}$  を考える. 確率場には分散が存在し,  $\text{Corr}(X(p), X(q)) = 1 \Leftrightarrow p = q$ であることを仮定する. なお当面は確率場の正規性を仮定しない.  $M \subset \widetilde{M}$  を, 仮定 1 の意味で区分的に滑らかな  $C^3$  部分多様体とし,  $M$  上の最大値  $\max_{p \in M} X(p)$  の分布の近似を考える.

確率場  $X(p)$  の値が閾値  $c$  よりも大きくなる添字  $p \in M$  の全体

$$A_c = \{p \in M \mid X(p) \geq c\}$$

をエクスカージョン集合 (excursion set) という. エクスカージョン集合の定義から

$$P\left(\max_{p \in M} X(p) \geq c\right) = P(A_c \neq \emptyset) = E[1_{\{A_c \neq \emptyset\}}]$$

である. ここで  $1_{\{\cdot\}}$  は事象が生じた場合には 1, それ以外の場合には 0 をとる確率変数とする.  $A_c$  のオイラー標数を  $\chi(A_c)$  とおく. オイラー標数法とは,

$$1_{\{A_c \neq \emptyset\}} \approx \chi(A_c) \quad (c \text{ が大きいとき}) \quad (3.1)$$

が成り立つとみなし, 上式両辺の期待値をとることによって

$$P\left(\max_{p \in M} X(p) \geq c\right) = E[1_{\{A_c \neq \emptyset\}}] \approx E[\chi(A_c)] \quad (c \text{ が大きいとき})$$

と近似するものである. これから見てゆくように, 積分  $E[1_{\{A_c \neq \emptyset\}}]$  の評価よりも積分  $E[\chi(A_c)]$  の評価の方が容易であるため, この議論が意味を持つ.

近似式 (3.1) は次のような直感的な考察に基づく. もし  $c$  が非常に大きく  $c > \max_{p \in M} X(p)$  ならば  $A_c = \emptyset$  であり, (3.1) は  $1_{\{A_c \neq \emptyset\}} = \chi(A_c) = 0$  の形で自明に成り立つ. また確率場が特別な構造を持たない限り, 確率場の最大を与える点  $p = p^*$  は 1 点に定まるであろう. もしちょうど  $c = X(p^*)$  であれば,  $A_c = \{p^*\}$  であり, また  $c < X(p^*)$  であっても,  $c$  が  $X(p^*)$  に近い値ならば  $A_c$  は  $p^*$  を含んだ閉球に同相な集合となるであろう. その範囲で  $1_{\{A_c \neq \emptyset\}} = \chi(A_c) = 1$  であり, 再び (3.1) は成り立つ.  $c$  がさらに小さい場合には何もいえないが, いずれにせよ以上の議論から (3.1) が何らかの意味で成り立つことが予想される.

### 3.2 モースの定理と近似公式

1 章で述べたように, 添字集合  $\widetilde{M}$  は微分場  $X_i = \partial X / \partial t^i$  の分散共分散行列  $g_{ij} = \text{Cov}(X_i, X_j)$  で定義される計量が付与された  $m$  次元多様体と考える. 以下では  $\widetilde{M}$  の点  $x \in \partial M_d$  のまわりの局所座標系  $(t^i)_{1 \leq i \leq m}$  として,  $t^{d+1} = \dots = t^m = 0$  が  $\partial M_d$  を意味し,  $(t^i)_{1 \leq i \leq d}$  が  $\partial M_d$  の  $x$  のまわりの局所座標系をなし, また  $x$  の近傍  $x' \in \partial M_d$  で  $(\partial / \partial t^i)_{x'}$  ( $i = d+1, \dots, m$ ) は  $T_{x'} \partial M_d$  に直交するものを用いる.

エクスカージョン集合のオイラー標数を, モースの定理によって表現することを考える. その目的のために, 区分的に滑らかな多様体に対するモースの定理を準備する.

$\widetilde{M}$  上の関数  $f$  の勾配は局所座標によって  $\nabla f = (\partial f / \partial t^i)_{1 \leq i \leq m}$  と表される.  $f$  の  $\partial M_d$  への制限を  $f|_{\partial M_d}$  と書く.  $\partial M_d$  の局所座標系を用いて,  $f|_{\partial M_d}$  の勾配とヘッセ行列 (ヘッセ形式) がそれぞれ  $\nabla f|_{\partial M_d} = (\partial f|_{\partial M_d} / \partial t^i)_{1 \leq i \leq d}$ ,  $\nabla^2 f|_{\partial M_d} = (\partial^2 f|_{\partial M_d} / \partial t^i \partial t^j - \sum_{k=1}^d \Gamma_{ij}^k \partial f|_{\partial M_d} / \partial t^k)_{1 \leq i, j \leq d}$  と定義される. ここで  $\Gamma_{ij}^k = \sum_{l=1}^d \text{Cov}(X_{ij}, X_l) g^{lk}$  は  $\partial M_d$  の接続係数である. 勾配が 0 となる点は臨界点とよばれる.

**定義 2 (モース関数)**  $\widetilde{M}$  を  $m$  次元  $C^3$  多様体とし,  $M \subset \widetilde{M}$  を区分的に滑らかな  $m$  次元  $C^3$  部分多様体とする.  $\widetilde{M}$  上の  $C^2$  関数  $f$  は, 以下の条件を満たすとき  $M$  上モース関数という.

(i)  $f$  の臨界点は,  $M$  の境界  $\partial M = \bigsqcup_{d < m} \partial M_d$  上には存在しない.

(ii) すべての次元  $1 \leq d \leq m$  について,  $f|_{\partial M_d}$  は非退化, すなわち  $f|_{\partial M_d}$  の臨界点でヘッセ行列

$\nabla^2 f|_{\partial M_d}$  は退化しない.

$f|_{\partial M_d}$  の臨界点の全体を  $Z_d$  とおく.  $f$  が  $M$  上のモース関数であるとき,  $Z_d$  は有限集合であることが示される. 関数  $f|_{\partial M_d}$  の臨界点  $x^* \in Z_d$  におけるヘッセ行列の負の固有値の個数を指数とよび  $\text{index} \nabla^2 f|_{\partial M_d}(x^*)$  と書く.

**定理 10 (区分的に滑らかな多様体に対するモースの定理, [10], [41])**  $\widetilde{M}$  上の  $C^2$  関数  $f$  が  $M$  上モース関数であるとき, 次が成り立つ:

$$\begin{aligned} \chi(\{x \in M \mid f(x) \leq u\}) &= \sum_{d=0}^m \sum_{k=0}^d (-1)^k \#\{x^* \in Z_d \mid \text{index} \nabla^2 f|_{\partial M_d}(x^*) = k, -\nabla f(x^*) \in N_{x^*} M, f(x^*) \leq u\} \\ &= \sum_{d=0}^m \sum_{x^* \in Z_d} 1_{\{-\nabla f(x^*) \in N_{x^*} M, f(x^*) \leq u\}} \text{sgn} \det \nabla^2 f|_{\partial M_d}(x^*). \end{aligned}$$

ここで  $N_x M = \{v \in T_x \widetilde{M} \mid \langle v, u \rangle \leq 0, \forall u \in S_x M\}$  は  $M$  の点  $x$  における法錐, また  $\text{sgn}$  は引数の正負に応じて  $\pm 1$  の値を返す符号関数である.

境界を持った多様体 (すなわち  $\partial M_d = \emptyset, d \leq m-2$ ) に対するモースの定理は, Morse-Cairns [32] Theorem 10.2 に与えられている. 本定理はその拡張と位置づけられる.  $f|_{\partial M_d}$  の臨界点  $x^* \in Z_d$  は,  $-\nabla f(x^*) \in N_{x^*} M$  であるとき拡張された臨界点 (augmented critical point) という. 定理 10 は, 区分的に滑らかな多様体のオイラー標数は, 拡張された臨界点の指数の数え上げによって求められることを主張する.

ところで  $(T_x \partial M_d)^\perp$  を空間  $T_x \widetilde{M}$  における  $T_x \partial M_d$  の直交補空間とすると,  $\partial M_d \subset M$  であるので  $N_x M \subset (T_x \partial M_d)^\perp$  である. 一方臨界点  $x^* \in Z_d$  においては  $\nabla f(x^*) \in (T_{x^*} \partial M_d)^\perp$  である. そのことから  $\nabla_{\partial M_d}^\perp f(x) = \nabla f(x) \in T_x \widetilde{M}$  の  $(T_x \partial M_d)^\perp$  への直交射影, すなわち

$$\nabla_{\partial M_d}^\perp f(x) = (0, \dots, 0, \partial f / \partial t^{d+1}, \dots, \partial f / \partial t^m)|_x \in T_x \widetilde{M}$$

とおけば, 条件  $-\nabla f(x^*) \in N_{x^*} M$  は  $-\nabla_{\partial M_d}^\perp f(x^*) \in N_{x^*} M$  と同値になることを注意しておく.

エクスカージョン集合のオイラー標数を求めるために,  $f := -X, u := -c$  において定理 10 を適用する. そのためには  $-X$  が  $M$  上モース関数となる必要がある. そのための条件を含めて, Adler-Taylor [5] はオイラー標数法が適用可能であるための正則条件をまとめて “十分な正則条件” (suitable regularity) とよんでいる ([5], Theorem 11.3.1). それらは煩雑であるのでここでは説明を省略する. (正規確率場の場合については後で述べる.)

十分な正則条件の下で, 確率場  $-X$  は確率 1 で  $M$  上モース関数で

$$\begin{aligned} \chi(A_c) &= \chi(\{p \in M \mid X(p) \geq c\}) \\ &= \sum_{d=0}^m \sum_{p^* \in Z_d} 1_{\{\nabla_{\partial M_d}^\perp X(p^*) \in N_{p^*} M, X(p^*) \geq c\}} \text{sgn} \det(-\nabla^2 X|_{\partial M_d}(p^*)) \quad \text{a.s.} \end{aligned}$$

となる. 原点を中心とする半径  $\varepsilon$  の  $d$  次元球を  $\varepsilon \mathbb{D}^d \subset \mathbb{R}^d$  とおく.

$$\delta_\varepsilon(p) = \frac{1_{\{\nabla X|_{\partial M_d}(p) \in \varepsilon \mathbb{D}^d\}}}{\text{Vol}(\varepsilon \mathbb{D}^d)}$$

とおく. 測度  $\delta_\varepsilon(p) |\det \nabla^2 X|_{\partial M_d}(p)| \wedge_{i=1}^d dt^i|_p$  は  $\varepsilon \rightarrow 0$  のとき, 臨界点  $p^*$  におけるディラック測度に収束する. 臨界点は有限個の孤立点であるので, 和  $\sum_{p^*}$  は  $\delta_\varepsilon$  を用いた積分で置きかえることができる.  $\text{sgn}(\det \nabla^2 X|_{\partial M_d}) |\det \nabla^2 X|_{\partial M_d}| = \det \nabla^2 X|_{\partial M_d}$  より

$$\chi(A_c) = \sum_{d=0}^m \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial M_d} 1_{\{\nabla_{\partial M_d}^\perp X(p) \in N_p M, X(p) \geq c\}} \det(-\nabla^2 X|_{\partial M_d}(p)) \delta_\varepsilon(p) \wedge_{i=1}^d dt^i|_p$$

である. (“sgn” が消えていることに注意.) 上式の両辺の期待値をとることを考える.  $\theta_{\nabla X|_{\partial M_d}(p)}(0)$  を  $\nabla X|_{\partial M_d}(p) = (X_i(p))_{1 \leq i \leq d}$  の点 0 における密度関数とするととき  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E[\delta_\varepsilon(p)] = \theta_{\nabla X|_{\partial M_d}(p)}(0)$  である.

$$E[\chi(A_c)] = \sum_{d=0}^m \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial M_d} E[E[1_{\{\nabla_{\partial M_d}^\perp X(p) \in N_p M, X(p) \geq c\}} \det(-\nabla^2 X|_{\partial M_d}(p)) | \nabla X|_{\partial M_d}(p)] \times \delta_\varepsilon(p)] \wedge_{i=1}^d dt^i|_p$$

であるが, 十分な正則条件の下で積分と極限操作が交換可能となり,

$$E[\chi(A_c)] = \sum_{d=0}^m \int_{\partial M_d} E[1_{\{\nabla_{\partial M_d}^\perp X(p) \in N_p M, X(p) \geq c\}} \det(-\nabla^2 X|_{\partial M_d}(p)) | \nabla X|_{\partial M_d}(p) = 0] \times \theta_{\nabla X|_{\partial M_d}(p)}(0) \wedge_{i=1}^d dt^i|_p \quad (3.2)$$

となる.

なおここまでの議論では, 確率場の正規性を仮定していない. Worsley [47] は, あるクラスのカイ 2 乗確率場,  $F$  確率場,  $t$  確率場について, エクスカーション集合のオイラー標数の期待値を求めている. また著者 [30] は, 実対称ランダム行列 (ウィシャート分布, 多変量ベータ分布, 逆ウィシャート分布) の 2 次形式によって確率場を定義することによって, 最大固有値の分布近似を与えている.

### 3.3 正規確率場の場合

ここからは,  $X(p)$ ,  $p \in \widetilde{M}$  は平均 0, 分散 1 の正規確率場とする.  $\text{Var}(X(p)) = 1$  の両辺を微分して,  $\text{Cov}(X(p), X_i(p)) = 0$ , つまり固定した  $p$  について  $X(p)$  と  $\nabla X(p)$  は独立である. さらに 2 階微分  $-X_{ij}(p) = -\partial^2 X(p)/\partial t^i \partial t^j$  を  $X(p)$  と  $\nabla X(p) = (X_i(p))_{1 \leq i \leq m}$  に回帰させたときの回帰残差は

$$\begin{aligned} H_{ij}(p) &= -X_{ij}(p) - E[-X_{ij}(p) | X(p), \nabla X(p)] \\ &= -X_{ij}(p) - \{g_{ij}(p)X(p) - \Gamma_{ij}^k(p)X_k(p)\} \\ &= -(\nabla^2 X(p))_{ij} - g_{ij}(p)X(p) \end{aligned}$$

であるが, 正規分布の性質より各  $p$  で  $H(p) = (H_{ij}(p))$  は  $X(p)$  および  $\nabla X(p)$  と独立となる.  $\nabla X(p)$  の分布は, 平均 0, 分散共分散行列  $(g_{ij}(p))_{1 \leq i, j \leq m}$  の正規分布なので

$$\theta_{\nabla X(p)}(0) = \det(g_{ij}(p))^{-1/2} / (2\pi)^{m/2}$$

となる.  $X$  の  $\partial M_d$  への制限  $X|_{\partial M_d}$  について同じ議論をすることにより, (3.2) を正規確率場の場合について書きかえることができる.

なお正規確率場の場合の正則条件 (suitable regularity) は以下のようなものである ([5], Corollary 11.3.2, Theorem 12.4.2).

**仮定 2**  $p \in M$  を中心とする  $\widetilde{M}$  の正規座標系  $t = (t^i)_{1 \leq i \leq m}$  を用いて,  $X_i = \partial X / \partial t^i$ ,  $X_{ij} = \partial^2 X / \partial t^i \partial t^j$  とおく.

- (i) 各  $p \in M$  について, 同時分布  $((X_i(p))_{1 \leq i \leq m}, (X_{ij}(p))_{1 \leq i \leq j \leq m})$  は縮退しない.
- (ii) 定数  $K, \alpha > 0$  が存在して, すべての  $p \in M$  とその近傍の  $q \in M$  について

$$\max_{1 \leq i, j \leq m} \text{Var}(X_{ij}(p) - X_{ij}(q)) \leq K |\log \|t - s\||^{-(1+\alpha)}.$$

( $p, q$  の局所座標を  $t, s$  とおいた.)

**定理 11**  $X(p), p \in \widetilde{M}$  が仮定 2 を満たす正規確率場であるとき,

$$E[\chi(A_c)] = \sum_{d=1}^m \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\partial M_d} E \left[ \mathbf{1}_{\{X(p) \geq c, \nabla_{\partial M_d}^\perp X(p) \in N_p M\}} \det(X(p)I_d + H(p)) \right] dM_d(p). \quad (3.3)$$

ここで  $H(p) = (H_{ij}(p))_{d \times d}$ ,  $H_{ij}(p) = -(\nabla^2 X|_{\partial M_d})_{ij}(p) - \delta_{ij} X(p)$  は  $\partial M_d$  の  $p$  を中心とする正規座標系に関する成分表示である.

定理 11 を, 有限 KL 展開を持つ正規確率場

$$X(p) = \langle \xi, p \rangle, \quad p \in M \subset \mathbb{S}^{n-1}, \quad \text{ただし } \xi = (\xi_i)_{1 \leq i \leq n} \sim N_n(0, I_n) \quad (3.4)$$

の場合に即して考える. 点  $p \in \partial M_d$  の近傍で,  $\partial M_d$  の点は  $\phi(t) \in \partial M_d$ ,  $t = (t^i)_{1 \leq i \leq d}$  の形でパラメータ表示されているとする.  $\phi_i = \partial \phi / \partial t^i$ ,  $\phi_{ij} = \partial^2 \phi / \partial t^i \partial t^j$  などとおく. さらに  $\phi(t)$  は  $p$  における標準座標系とする.  $X_i(p) = \langle \xi, \phi_i \rangle|_p$ ,  $g_{ij}(p) = \text{Cov}(X_i(p), X_j(p)) = \langle \phi_i, \phi_j \rangle|_p = \delta_{ij}$  であるので  $X(p), X_1(p), \dots, X_d(p)$  は独立に標準正規分布に従う. また  $X_{ij}(p) = \langle \xi, \phi_{ij} \rangle|_p$ ,  $\Gamma_{ij}^k(p) = \text{Cov}(X_{ij}(p), X_k(p)) = \langle \phi_{ij}, \phi_k \rangle|_p = 0$ ,  $\langle \phi_{ij}, \phi \rangle|_p = -\delta_{ij}$  より

$$H_{ij}(p) = \langle \xi, -\phi_{ij} - \delta_{ij} \phi \rangle|_p = \langle V(p), -\phi_{ij} \rangle|_p,$$

ただし

$$V(p) = \xi - \langle \xi, \phi \rangle|_p \phi - \sum_{i=1}^d \langle \xi, \phi_i \rangle|_p \phi_i.$$

$V(p)$  は  $X(p), \nabla X|_{\partial M_d}(p) = (X_i(p))_{1 \leq i \leq d}$  と独立な, 線形空間  $(T_p \partial M_d)^\perp$  における標準正規分布となる.  $T_p \mathbb{S}^{n-1}$  における  $T_p \partial M_d$  の直交補空間の基底を  $\phi_{d+1}, \dots, \phi_{n-1}$  とおけば,

$V(p) = \sum_{i=d+1}^{n-1} \langle \xi, \phi_i \rangle|_p \phi_i$  である. これは  $V(p) = \nabla_{\partial M_d}^\perp X(p)$  であることを意味する.

$r = X(p)$ ,  $s = \|V(p)\|$ ,  $v = V(p)/\|V(p)\|$  とおき期待値を積分の形で書き下せば, 式 (3.3) の  $E[\chi(A_c)]$  はチューブ法近似公式 (2.5) に帰着することがわかる. これがチューブ法とオイラー標数法の同等性である.

しかしチューブ法の場合とは異なり, オイラー標数法の近似式は外側の多様体の次元  $n$  を陽に含まない. そのため有限 KL 展開を持たない正規確率場の場合にも適用可能である.

**注 1 (Chern-Gauss-Bonnet の定理)**  $M$  を  $m$  次元の閉多様体とする. 閾値を  $c = -\infty$  とおいたときのエクスカージョン集合  $A_{-\infty}$  は添字の全体  $M$  であるため, (2.11) より

$$E[\chi(A_{-\infty})] = \chi(M) = \begin{cases} \frac{(-1)^{m/2}}{(2\pi)^{m/2} (m/2)!} \int_M \text{Tr} R^{m/2} dM(p) & (m: \text{偶数}) \\ 0 & (m: \text{奇数}). \end{cases}$$

### 3.4 オイラー標数法の誤差評価

最後に Taylor, *et al.* [44] によるオイラー標数法の誤差評価の考え方を, 主として正規確率場の場合に即して簡単に紹介する.

オイラー標数法の近似公式は, 確率変数の言葉で記述されているため, 正規確率場を構成する確率変数の数 (KL 展開の項数  $n$ ) に依存しないものであった. チューブ法では, 積分範囲を

$$r > \sup_{q \in M \setminus \{p\}} \frac{\langle sv, q \rangle}{1 - \langle p, q \rangle} \quad (3.5)$$

に限定することによって重なりなく積分が行われ, 結果として正確な最大値分布が得られた. しかし  $sv \in N_p M$  は  $n - d$  次元空間のベクトルであり, その意味で式 (3.5) は  $n$  を含むものである. 以下では (3.5) を確率変数による表現に書きかえることによって無限 KL 展開の場合に適用可能な類似を考える. 以降簡単のため,  $M$  が  $m$  次元閉多様体の場合のみを扱う.

有限 KL 展開との対応で考える.  $X(p) = \langle \xi, p \rangle$ ,  $p \in M$  とおく. 前節での考察より, 局所座標表示  $p = \phi(t)$  によって  $r = X(p)$ ,  $sv = \nabla_M^\perp X(p) = \xi - \langle \xi, \phi \rangle \phi|_p - \sum_{i=1}^m \langle \xi, \phi_i \rangle \phi_i|_p$ ,  $\langle sv, q \rangle = X(q) - E[X(q) | X(p)] - E[X(q) | \nabla X(p)]$ . また  $\langle p, q \rangle = E[X(p)X(q)]$ . 以上から (3.5) の確率変数表示は

$$X(p) > \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q), \quad W_p(q) = \frac{X(q) - E[X(q) | X(p), \nabla X(p)]}{1 - E[X(p)X(q)]} \quad (3.6)$$

となる. 各  $q$  に対して  $X(q) - E[X(q) | X(p), \nabla X(p)]$  は  $X(p)$  と独立であるので,  $W_p(q)$  ( $\forall q \neq p$ ) と  $X(p)$  は独立であることに注意する.

実際に (3.6) の範囲に制限して (3.3) の期待値をとると, 若干の正則条件の下で正確な最大値分布が得られることが示される. オイラー標数法の近似誤差は

$$\begin{aligned} \Delta P(c) &= E[A_c] - P\left(\max_{p \in M} X(p) \geq c\right) \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_M E\left[1_{\{c \leq X(p) \leq \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)\}} \det(X(p)I_m + H(p))\right] dM(p) \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる. 展開  $\det(X(p)I_m + H(p)) = \sum_{l=0}^m X(p)^{m-l} \text{tr}_l H(p)$  および

$$1_{\{c \leq X(p) \leq \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)\}} \leq 1_{\{c \leq X(p)\}} 1_{\{c \leq \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)\}},$$

また  $X(p)$  と  $\sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)$  および  $H(p)$  の独立性から, 右辺の絶対値は

$$\frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_M E\left[1_{\{c \leq X(p)\}} X(p)^{m-l}\right] E\left[1_{\{c \leq \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)\}} |\text{tr}_l H(p)|\right] dM(p)$$

( $l = 0, \dots, m$ ) の和で押さえられる. さらにヘルダーの不等式によって

$$E\left[1_{\{c \leq \sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q)\}} |\text{tr}_l H(p)|\right] \leq E\left[|\text{tr}_l H(p)|^r\right]^{1/r} P\left(\sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q) \geq c\right)^{1/s}$$

( $1/r + 1/s = 1$ ) である. 平均 0 の正規確率場  $W_p(q)$ ,  $q \in M \setminus \{p\}$  に対して, 正規確率場の最大値に関する Borell の不等式 ([2]) を適用することにより, 漸近的な上界

$$\lim_{c \rightarrow \infty} c^{-2} \log P\left(\sup_{q \in M \setminus \{p\}} W_p(q) \geq c\right) \leq -\frac{1}{2\sigma_c^2}, \quad \sigma_c^2 = \sup_{p \in M, q \in M \setminus \{p\}} \text{Var}(W_p(q)),$$

ただし

$$\text{Var}(W_p(q)) = \frac{1 - \text{Cov}(X(q), X(p))^2 - \text{Cov}(X(q), \nabla X(p)) \text{Var}(\nabla X(p))^{-1} \text{Cov}(\nabla X(p), X(q))}{(1 - \text{Cov}(X(q), X(p)))^2}$$

が与えられる. また  $X(p)$  の周辺分布は標準正規分布なので

$$\lim_{c \rightarrow \infty} c^{-2} \log E\left[1_{\{c \leq X(p)\}} X(p)^{m-l}\right] = -\frac{1}{2}$$

である. 以上を組み合わせ, また  $r, s$  を  $c$  に応じて

$$r \rightarrow \infty, \quad c^{-2} \log E[|\text{tr}_l H(p)|^r]^{1/r} \rightarrow 0 \quad (c \rightarrow \infty)$$

(このとき  $s \rightarrow 1$ ) ととると

$$\limsup_{c \rightarrow \infty} c^{-2} \log |\Delta P(c)| \leq -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sigma_c^2}\right) \quad (3.8)$$

を示すことができる.

有限 KL 展開の設定 (3.4) では簡単な計算によって  $\sigma_c^2 = \cot^2 \theta_c$  であることがわかるが, これは定理 7 で与えたチューブ法の近似誤差の指数オーダーと整合している.  $\sigma_c^2$  は臨界半径に対応するものとして, 臨界分散 (critical variance) とよばれる.

確率場が正規でない場合も, (3.7) に対応する近似誤差  $|\Delta P(c)|$  の上界を書き下すことができる. しかしながら (3.8) のように, 漸近評価を一般的な形で与えることは難しい. [30] では, 実対称ランダム行列の 2 次形式によって定義されたカイ 2 乗確率場, ベータ確率場, 逆カイ 2 乗確率場に対するオイラー標数法の近似誤差の漸近評価が与えられている.

## 4 統計学における応用

### 4.1 多重線形形式の最大値と多元配置分散分析

$k$  元配列  $\Xi = (\xi_{j_1 \dots j_k})$ ,  $j_i = 1, \dots, q_i$ ,  $i = 1, \dots, k$  の各成分は独立に標準正規分布  $N(0, 1)$  に従う確率変数とする.  $i = 1, \dots, k$  について  $h_i = (h_{i1}, \dots, h_{iq_i}) \in \mathbb{S}^{q_i-1}$  を長さ 1 の  $q_i$  次元の係数ベクトルとし,  $h_i$  に関する  $k$  次線形形式

$$\langle \xi, h_1 \otimes \dots \otimes h_k \rangle = \sum_{j_1=1}^{q_1} \dots \sum_{j_k=1}^{q_k} \xi_{j_1 \dots j_k} h_{1j_1} \dots h_{kj_k} \quad (4.1)$$

を定義する. ここで  $\otimes$  はクロネッカー積,  $\xi = (\xi_{11\dots 1}, \xi_{11\dots 2}, \dots, \xi_{q_1 q_2 \dots q_k})$  は  $\Xi$  の要素を辞書式に並べたベクトルである.

この多重線形形式の最大値

$$\max_{h_i \in \mathbb{S}^{q_i-1}, \forall i} \langle \xi, h_1 \otimes \cdots \otimes h_k \rangle \quad (4.2)$$

は、行列の最大特異値の拡張である。とくに  $k = 2$  の場合は、最大値は各成分が独立な標準正規変量である  $q_1 \times q_2$  ランダム行列の最大特異値となり、その分布は自由度  $q_1$  の  $q_2 \times q_2$  ウィンシャート分布  $W_{q_2}(q_1, I_{q_2})$  の最大固有値の平方根の分布に一致する。

多重線形形式の最大値 (4.2) の分布は、多元配置分散分析モデルの交互作用の検定において必要となる。繰り返しのない 2 元配置データ  $\{x_{ij}\}_{I \times J}$  において、交互作用の有無に関する検定を行うためには交互作用項のモデル化を行う必要がある。Johnson-Graybill [18] は交互作用項を次のようにランク 1 の双線形形式でモデル化した：

$$x_{ij} = \alpha_i + \beta_j + \phi u_i v_j + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, \dots, I, \quad j = 1, \dots, J. \quad (4.3)$$

ここで  $\alpha_i, \beta_j, \phi, u_i, v_j$  は未知パラメータ、 $\varepsilon_{ij}$  は独立に  $N(0, \sigma^2)$  に従う誤差項である。 $\sigma^2$  が既知の場合、無交互作用の仮説  $H_0 : \phi = 0$  の検定のための尤度比検定統計量は、帰無仮説の下で  $k = 2$ ,  $q_1 = I - 1$ ,  $q_2 = J - 1$  のときの最大値 (4.2) と同じ分布を持つ。

また繰り返しのない 3 元配置データ  $\{x_{ijk}\}_{I \times J \times K}$  に対して、川崎・宮川 [19] は (4.3) を拡張する形で次のモデルを提案した：

$$x_{ijk} = (\alpha\beta)_{ij} + (\alpha\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + \phi u_i v_j w_k + \varepsilon_{ijk}, \quad i = 1, \dots, I, \quad j = 1, \dots, J, \quad k = 1, \dots, K.$$

3 次交互作用が存在しないという仮説  $H_0 : \phi = 0$  の尤度比検定統計量の帰無仮説の下での分布は、 $k = 3$ ,  $q_1 = I - 1$ ,  $q_2 = J - 1$ ,  $q_3 = K - 1$  のときの最大値 (4.2) の分布に帰着する。

多重線形形式 (4.1) は添字集合を

$$M = \{h_1 \otimes \cdots \otimes h_k \mid h_i \in \mathbb{S}^{q_i-1}, i = 1, \dots, k\}$$

とし、 $\xi$  を  $n = \prod_{i=1}^k q_i$  次元の標準正規分布ベクトルとするときの正規確率場  $\langle \xi, h \rangle$ ,  $h \in M$  とみなすことができる。 $M$  は単位球面の直積  $\mathbb{S}^{q_1-1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{S}^{q_k-1}$  であり、これは  $\mathbb{S}^{n-1}$  の部分集合なので、チューブ法が適用可能である。 $M$  の次元は  $m = \sum_{i=1}^k q_i - k$  である。 $(h_1, \dots, h_k) \mapsto h_1 \otimes \cdots \otimes h_k$  の写像度は  $2^{k-1}$  であるので

$$\text{Vol}(M) = 2^{-(k-1)} \prod_{i=1}^k \Omega_{q_i}, \quad \Omega_q = \text{Vol}(\mathbb{S}^{q-1}) = \frac{2\pi^{q/2}}{\Gamma(q/2)} \quad (4.4)$$

である。

添字  $\{1, \dots, m\}$  を

$$A_1 = \{1, \dots, q_1 - 1\}, \quad A_2 = \{q_1, \dots, q_2 - 2\}, \quad \dots, \quad A_k = \{q_1 + \cdots + q_{k-1} - k + 2, \dots, m\}$$

と  $k$  個に分割する。 $i$  と  $j$  が同じ分割に属するとき (すなわち  $i, j \in A_h$  となる  $h$  が存在するとき)  $i \sim j$  と書くことにする。 $i \sim j$  でないときは  $i \not\sim j$  と書く。 $M$  の曲率テンソルの、一つの正規座標系による表示は以下ようになる：

$$R_{ij;kl} = \begin{cases} -(\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}) & (i \sim j) \\ 0 & (\text{それ以外}). \end{cases}$$

これは (2, 2) 型の 2 重形式であった。

**定理 12** ([28])  $a_1, a_2, \dots, a_{2e}$  は  $\{1, 2, \dots, m\}$  の異なる要素とする。それらのペア  $e$  個への分割で、それぞれのペアの 2 つの要素が同じ分割に属さないもの、すなわち

$$\{(a_1, a_2), \dots, (a_{2e-1}, a_{2e}) \mid a_1 < a_3 < \dots < a_{2e-1}, a_{2l-1} < a_{2l}, a_{2l-1} \not\sim a_{2l}, \forall l = 1, \dots, e\}$$

の総数を  $n_k(q_1 - 1, \dots, q_k - 1; e)$  とする。

(i) 多重線形形式の最大値の分布のチューブ法近似は、式 (2.9) において、係数  $w_{m+1-2j}$  を

$$w_{m+1-2e} = \frac{\pi^{(k-1)/2}}{\prod_{i=1}^k \Gamma(q_i/2)} \left(-\frac{1}{2}\right)^e \Gamma\left(\frac{1}{2}(m+1) - e\right) n_k(q_1 - 1, \dots, q_k - 1; e),$$

$e = 0, 1, \dots, [m/2]$  とおいたもの。

(ii)  $M$  の臨界半径は

$$\theta_c = \cos^{-1} \sqrt{\frac{2k-2}{3k-2}}.$$

*Proof.* (i) について [28] とは異なる証明を与える。  $I = (\delta_{i;j}) \in D^{1,1}$ ,  $\tilde{R} = R + I^2/2$  とおく。2 重形式の意味で  $\text{Tr} \tilde{R}^e$  を評価する。  $(I^2/2)_{ij;kl} = \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}$  であるので、

$$\tilde{R}_{ij;kl} = \begin{cases} \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk} & (i \not\sim j) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

である。

$$(\tilde{R}^e)_{i_1 \dots i_{2e}; j_1 \dots j_{2e}} = \frac{1}{(2^e)^2} \sum_{\pi, \sigma \in S_{2e}} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\sigma) \tilde{R}_{i_{\pi(1)} i_{\pi(2)}; j_{\sigma(1)} j_{\sigma(2)}} \cdots \tilde{R}_{i_{\pi(2e-1)} i_{\pi(2e)}; j_{\sigma(2e-1)} j_{\sigma(2e)}}$$

に注意すると

$$\begin{aligned} \text{Tr} \tilde{R}^e &= \frac{1}{(2e)!} \sum_{i_1, \dots, i_{2e}} \frac{1}{(2^e)^2} \sum_{\pi \in S_{2e}} \sum_{\sigma \in S_{2e}} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\sigma) \\ &\quad \times \tilde{R}_{i_{\pi(1)} i_{\pi(2)}; i_{\sigma(1)} i_{\sigma(2)}} \cdots \tilde{R}_{i_{\pi(2e-1)} i_{\pi(2e)}; i_{\sigma(2e-1)} i_{\sigma(2e)}} \\ &= \sum_{i_1 < \dots < i_{2e}} \sum_{\pi \in S_{2e}^*} \sum_{\sigma \in S_{2e}^*} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\sigma) \tilde{R}_{i_{\pi(1)} i_{\pi(2)}; i_{\sigma(1)} i_{\sigma(2)}} \cdots \tilde{R}_{i_{\pi(2e-1)} i_{\pi(2e)}; i_{\sigma(2e-1)} i_{\sigma(2e)}} \\ &\quad (S_{2e}^* = \{\pi \in S_{2e} \mid \pi(2l-1) < \pi(2l), l = 1, \dots, e\}) \\ &= \sum_{i_1 < \dots < i_{2e}} \sum_{\pi \in S_{2e}^*} \sum_{\sigma \in S_{2e}^*} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\sigma) \\ &\quad \times \delta_{\pi(1)\sigma(1)} \delta_{\pi(2)\sigma(2)} \mathbf{1}_{\{\pi(1) \not\sim \pi(2)\}} \cdots \delta_{\pi(2e-1)\sigma(2e-1)} \delta_{\pi(2e)\sigma(2e)} \mathbf{1}_{\{\pi(2e-1) \not\sim \pi(2e)\}} \\ &= \sum_{i_1 < \dots < i_{2e}} \sum_{\pi \in S_{2e}^*} \mathbf{1}_{\{\pi(1) \not\sim \pi(2)\}} \cdots \mathbf{1}_{\{\pi(2e-1) \not\sim \pi(2e)\}} \end{aligned}$$

$$= e! n_k(q_1 - 1, \dots, q_k - 1; e).$$

これと (4.4) を (2.10) に代入する. □

**注 2**  $k = 2$  のときは

$$n_2(q_1 - 1, q_2 - 1; e) = \frac{(q_1 - 1)! (q_2 - 1)!}{(q_1 - 1 - e)! (q_2 - 1 - e)!},$$

また  $n_k(d_1, \dots, d_k; e)$  ( $k \geq 3$ ) は漸化式によって評価できる ([28], Lemma A.2).

#### 4.2 射影追跡の有意性検定

$N$  個体について  $p$  次元のベクトルデータ  $X_i \in \mathbb{R}^p$  ( $i = 1, \dots, N$ ) が独立サンプルとして観測されているとする. このような多次元データの解析 (多変量解析) では, 最初に  $p$  次元のデータを低次元に線形射影し, そこから情報を抽出することがしばしば行われる. その際に重要なのは, 解析者にとって興味ある情報を際立たせる形で射影先の部分空間を選択することである.

主成分分析や正準相関分析では, データの分散を大きくする部分空間が選択される. 射影追跡では, データの非正規性, すなわち 3 次以上のキュムラントを大きくする部分空間を探索する ([15]). 独立成分分析の一つである Fast ICA も同様の手法である ([16]). その手順は次のようなものである. ここでは 1 次元空間への射影のみを扱う.

(i) 方向ベクトル  $h \in \mathbb{S}^{p-1}$  ( $= \{h \in \mathbb{R}^p \mid \|h\| = 1\}$ ) に対し, データを  $h$  方向へ直交射影した 1 次元データを  $Y_i = \langle h, X_i \rangle$  ( $i = 1, \dots, N$ ) とし, さらにそれらの標本平均  $\bar{Y}$ , 標本標準偏差  $s_Y$  を用いて, データの基準化  $Z_i = (Y_i - \bar{Y})/s_Y$  ( $i = 1, \dots, N$ ) を行う.

(ii) 基準化したデータに基づき, データの非正規性の程度を表す尺度  $I_N(h)$  (射影指標) を計算する. ここでは例として,  $\theta \neq 0$  を定数として,

$$I_N(h) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \left( e^{\theta Z_i - \theta^2/2} - 1 \right) / \sqrt{e^{\theta^2} - 1 - \theta^2 - \frac{\theta^4}{2}}$$

とする. もし  $Z_i$  が標準正規分布に従うならば, 各  $h \in \mathbb{S}^{p-1}$  について漸近的に  $I_N(h) \sim N(0, 1)$  であることに注意する.

(iii) 射影指標を最大にする方向  $h^* = \operatorname{argmax}_{h \in \mathbb{S}^{p-1}} I_N(h)$  を数値的に探す.

ところで観測値  $X_i$  は確率変数であるので, 仮に  $X_i$  の分布が多次元正規分布であり, どの方向  $h$  についても射影先の  $Y_i$  が 1 次元正規分布となる場合であっても, ランダムな連続関数である  $I_N(h)$  にはその最大値を達成する点  $h^*$  が必ず存在する. そのことから, 数値的に探索された方向  $h^*$  が確率的なゆらぎによる見せかけのものでないかどうかの見きわめが重要になる. その目的のために, 仮説検定の枠組みを用いることができる. 帰無仮説  $H_0$ : “ $X_i$  の分布は多次元正規分布” を想定し, その仮説の下での  $I_N(h)$  の最大値の上側確率を

$$\bar{F}_N(c) = P\left(\max_{h \in \mathbb{S}^{p-1}} I_N(h) \geq c \mid H_0\right)$$

とおく. サンプルの最大値  $I_N(h^*)$  がその分布の裾にあること, 例えば水準  $\alpha$  を 0.05 とおき

$$\bar{F}_N(I_N(h^*)) \leq \alpha$$

となることを確認することによって、最大値の有意性を確認することができる。

しかし  $\max_{h \in \mathbb{S}^{p-1}} I_N(h)$  の分布は複雑であり、ほとんど解析的には取り扱えないものである。ここではサンプル数  $N$  に関する漸近近似を用いる。バナッハ空間に値をとる確率変数に対する標準的な中心極限定理より以下が従う ([6], [45] など)。

**定理 13**  $\mathbb{S}^{p-1}$  上のバナッハ空間を  $C(\mathbb{S}^{p-1})$  とおく。  $X_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) を  $p$  次元正規分布  $N_p(\mu, \Sigma)$  ( $\det \Sigma > 0$ ) からの i.i.d. サンプルとする。  $N \rightarrow \infty$  のとき、  $I_N(\cdot)$  は連続な正規確率場  $I(\cdot)$  に  $C(\mathbb{S}^{p-1})$  上で分布収束する。ただし、  $E[I(h)] = 0$ ,  $\text{Var}[I(h)] = 1$ ,

$$\text{Cov}(I(g), I(h)) = r(g, h) = \frac{e^{\theta^2 \langle g, h \rangle} - 1 - \theta^2 \langle g, h \rangle - \theta^4 \langle g, h \rangle^2 / 2}{e^{\theta^2} - 1 - \theta^2 - \theta^4 / 2}.$$

連続写像定理から

$$\bar{F}_N(c) \rightarrow \bar{F}(c) = P\left(\max_{h \in \mathbb{S}^{p-1}} I(h) \geq c \mid H_0\right) \quad (N \rightarrow \infty)$$

であるので、  $N$  が大きいとき  $\bar{F}_N(c) \approx \bar{F}(c)$  と近似することができる。さらに  $\bar{F}(c)$  はチューブ法、オイラー標数法によって評価することができる。

ここで述べた、射影追跡の有意水準を正規確率場に対するチューブ法近似で与えるというアイデアは、Sun [37] によるものである。[37] では展開式 (2.9) の最初の 2 項を使った近似式が提案されているが、本節で扱っている例題では (2.9) のすべての項を陽に与えることができる。

確率場  $I(\cdot)$  は、2 点  $g, h \in \mathbb{S}^{p-1}$  の内積  $\langle g, h \rangle$  のみに依存する共分散関数を持った、球面等方的な (spherically isotropic) 確率場である。そのため、計量、曲率は任意の 1 点で求めればよい。  $(0, \dots, 0, 1)$  のまわりの局所座標  $g = (s^1, \dots, s^{p-1}, \sqrt{1 - \sum (s^i)^2})$ ,  $h = (t^1, \dots, t^{p-1}, \sqrt{1 - \sum (t^i)^2})$  をとると、  $g_{ij} = \partial^2 r(g, h) / \partial s^i \partial t^j |_{s=t=0} = \rho(\theta) \delta_{ij}$ ,  $R_{ij;kl} = -\rho(\theta)(\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk})$ , ただし

$$\rho(\theta) = \frac{(e^{\theta^2} - 1 - \theta^2) \theta^2}{e^{\theta^2} - 1 - \theta^2 - \theta^4 / 2}.$$

これより添字集合の体積は、その次元が  $m = p - 1$  であることに注意すると  $\text{Vol}(M) = \rho(\theta)^{(p-1)/2} \Omega_p$  となる。また曲率テンソルの正規座標系による表現は  $R_{ij;kl} = -\rho(\theta)^{-1}(\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk})$ , すなわち 2 重形式表現で  $R = (-1/2\rho(\theta))I^2$  である。  $\text{Vol}(M)$  および

$$\text{Tr} R^l = \frac{(-1)^l (p-1)!}{2^l \rho(\theta)^l (p-1-2l)!}$$

を (2.11) に代入することにより、  $\bar{F}(c)$  のオイラー標数法による近似公式が得られる。

**定理 14**

$$\hat{P}\left(\max_{h \in \mathbb{S}^{p-1}} I(h) \geq c\right) = \frac{\rho(\theta)^{(p-1)/2}}{2^{p/2-1} \Gamma(p/2)} \sum_{l=0}^{[(p-1)/2]} \frac{(p-1)!}{\rho(\theta)^l 2^l l! (p-1-2l)!} e^{-c^2/2} H_{p-2l-2}(c). \quad (4.5)$$

[43], 6.3 節では、ここに述べた球面等方的な確率場とは異なる設定で、(4.5) と等価な式が示されている。

## 謝辞

本稿は、第一著者の大阪市立大学数学研究所ミニスクール「情報幾何への入門と応用」(2006年6月8日~11日)における講義の資料に加筆したものです。講義の機会を与えてくださった大仁田義裕氏をはじめとするオーガナイザーの方々に感謝いたします。

## 文 献

- [1] Adler, R. J. (1981). *The Geometry of Random Fields*. Wiley, Chichester.
- [2] Adler, R. J. (1990). *Introduction to Continuity Extreme and Related Topics*. IMS Lecture Notes–Monograph Series, Vol. 12, IMS, Hayward.
- [3] Adler, R. J. (2000). On excursion sets, tube formulas and maxima of random fields. *Ann. Appl. Probab.*, **10**, 1–74.
- [4] Adler, R. J. and Hasofer, A. M. (1976). Level crossings for random fields. *Ann. Probab.*, **4**, 1–12.
- [5] Adler, R. J. and Taylor, J. E. (2007). *Random Fields and their Geometry*. Springer.
- [6] Araujo, A. and Giné, E. (1980). *The Central Limit Theorem for Real and Banach Valued Random Variables*. Wiley, New York.
- [7] Azaïs, J.-M. and Wschebor, M. (2005). On the distribution of the maximum of a Gaussian field with  $d$  parameters. *Ann. Appl. Probab.*, **15**, 254–278.
- [8] Dacunha-Castelle, D. and Gassiat, E. (1997). Testing in locally conic models and application to mixture models. *ESAIM Probability and Statistics*, **1**, 285–317.
- [9] Federer, H. (1959). Curvature measures. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **93**, 418–491.
- [10] Fu, J. H. G. (1989). Curvature measures and generalized Morse theory. *J. Differential Geometry*, **30**, 619–642.
- [11] 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.
- [12] Gray, A (2004). *Tubes*, 2nd ed. Birkhäuser, Boston.
- [13] Hasofer, A. M. (1978). Upcrossings of random fields. *Adv. Appl. Probab., Supplement*, **10**, 14–21.
- [14] Hotelling, H. (1939). Tubes and spheres in  $n$ -spaces, and a class of statistical problems. *Amer. J. Math.*, **61**, 440–460.
- [15] Huber, P. J. (1985). Projection pursuit. *Ann. Statist.*, **13**, 435–475.
- [16] Hyvärinen, A., Karhunen, J. and Oja, E. (2001). *Independent Component Analysis*. Wiley-Interscience, New York.
- [17] Johansen, S. and Johnstone, I. (1990). Hotelling’s theorem on the volume of tubes: Some illustrations in simultaneous inference and data analysis. *Ann. Statist.*, **18**, 652–684.
- [18] Johnson, D. E. and Graybill, F. A. (1972). An analysis of a two-way model with interaction and no replication. *J. Amer. Statist. Assoc.*, **67**, 862–868.
- [19] 川崎英海, 宮川雅巳 (1996). 繰り返しのない3元配置における3因子交互作用の検定. 品質, **26**, 97–108.
- [20] Kedem, B. (1994). *Time Series Analysis by Higher Order Crossings*. IEEE Press, New York.
- [21] Knowles, M. and Siegmund, D. (1989). On Hotelling’s approach to testing for a nonlinear parameter in regression. *Internat. Statist. Rev.*, **57**, 205–220.
- [22] 小林昭七 (1997). 1940年代, 50年代の日本の微分幾何. 数学, **49**, 225–234.
- [23] Kuriki, S. (2005). Asymptotic distribution of inequality restricted canonical correlation with application to tests for independence in ordered contingency tables. *J. Multivariate Anal.*, **94**, 420–449.
- [24] 栗木哲 (2008). QTL解析における検定の多重性調整 — ロッドスコアの最大値分布の近似. 「21世紀の統計科学」, 第2巻 (小西貞則, 国友直人編), 東京大学出版会, 掲載予定.
- [25] 栗木哲, 竹村彰通 (1999). 正規確率場の最大値の分布 — tubeの方法と Euler 標数の方法 —. 統計数理, **47**, 201–221.
- [26] Kuriki, S. and Takemura, A. (2000). Some geometry of the cone of nonnegative definite matrices and weights of associated  $\chi^2$  distribution. *Ann. Inst. Statist. Math.*, **52**, 1–14.
- [27] Kuriki, S. and Takemura, A. (2000). Shrinkage estimation towards a closed convex set with a smooth boundary. *J. Multivariate Anal.*, **75**, 79–111.
- [28] Kuriki, S. and Takemura, A. (2001). Tail probabilities of the maxima of multilinear forms and their applications. *Ann. Statist.*, **29**, 328–371.
- [29] Kuriki, S. and Takemura, A. (2002). Application of tube formula to distributional problems in multiway layouts. *Appl. Stoch. Models Bus. Ind.*, **18**, 245–257.
- [30] Kuriki, S. and Takemura, A. (2005). Euler characteristic heuristic for approximating the distribution of the largest eigenvalue of an orthogonally invariant random matrix. ISM Research Memorandum No. 940, to appear in *J. Statist. Plann. Inference*.
- [31] Lin, Y. and Lindsay, B. G. (1997). Projections on cones, chi-bar squared distributions, and Weyl’s formula. *Statist. Probab. Lett.*, **32**, 367–376.
- [32] Morse, M. and Cairns, S. S. (1969). *Critical Point Theory in Global Analysis and Differential Topology*. Academic Press, New York.

- [33] Naiman, D. Q. (1990). Volumes of tubular neighborhoods of spherical polyhedra and statistical inference. *Ann. Statist.*, **18**, 685–716.
- [34] Naiman, D. Q. and Wynn, H. P. (1992). Inclusion-exclusion-Bonferroni identities and inequalities for discrete tube-like problems via Euler characteristics. *Ann. Statist.*, **20**, 43–76.
- [35] Naiman, D. Q. and Wynn, H. P. (1997). Abstract tubes, improved inclusion-exclusion identities and inequalities and importance sampling. *Ann. Statist.*, **25**, 1954–1983.
- [36] Ninomiya, Y. (2004). Construction of conservative test for change-point problem in two-dimensional random fields. *J. Multivariate Anal.*, **89**, 219–242.
- [37] Sun, J. (1991). Significance levels in exploratory projection pursuit. *Biometrika*, **78**, 759–769.
- [38] Sun, J. (1993). Tail probabilities of the maxima of Gaussian random fields. *Ann. Probab.*, **21**, 34–71.
- [39] Sun, J. and Loader, C. R. (1994). Simultaneous confidence bands for linear regression and smoothing. *Ann. Statist.*, **22**, 1328–1345.
- [40] Takemura, A. and Kuriki, S. (1997). Weights of  $\chi^2$  distribution for smooth or piecewise smooth cone alternatives. *Ann. Statist.*, **25**, 2368–2387.
- [41] Takemura, A. and Kuriki, S. (2002). Maximum of Gaussian field on piecewise smooth domain: Equivalence of tube method and Euler characteristic method. *Ann. Appl. Probab.*, **12**, 768–796.
- [42] Takemura, A. and Kuriki, S. (2003). Tail probability via the tube formula when the critical radius is zero. *Bernoulli*, **9**, 535–558.
- [43] Taylor, J. E. and Adler, R. (2003). Euler characteristics for Gaussian fields on manifolds. *Ann. Probab.*, **31**, 533–563.
- [44] Taylor, J. E., Takemura, A. and Adler, R. (2005). Validity of the expected Euler characteristic heuristic. *Ann. Probab.*, **33**, 1362–1396.
- [45] van der Vaart, A. W. (1998). *Asymptotic Statistics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [46] Weyl, H. (1939). On the volume of tubes. *Amer. J. Math.*, **61**, 461–472.
- [47] Worsley, K. J. (1994). Local maxima and the expected Euler characteristic of excursion sets of  $\chi^2$ ,  $F$  and  $t$  fields. *Adv. Appl. Probab.*, **26**, 13–42.
- [48] Worsley, K. J. (1995). Estimating the number of peaks in a random field using the Hadwiger characteristic of excursion sets, with applications to medical images. *Ann. Statist.*, **23**, 640–669.
- [49] Worsley, K. J. (1995). Boundary corrections for the expected Euler characteristic of excursion sets of random fields, with an application to astrophysics. *Adv. Appl. Probab.*, **27**, 943–959.

(2007年3月22日提出)

(くりき さとし・統計数理研究所, たけむら あきみち・東京大学大学院)