1版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　５年　６月１５日現在

機関番号：１５４０１

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2022

課題番号：１７Ｋ０００５１

研究課題名（和文）非正則モデルの最尤法に基づく推測法の評価と改良

研究課題名（英文）Evaluation and improvement of the inference based on the ML method for nonregular models

研究代表者

若木　宏文（Wakaki, Hirofumi）

広島大学・先進理工系科学研究科（理）・教授

研究者番号：９０２１０８５６

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,100,000円

研究成果の概要（和文）：正規線形混合モデルや一般化線形混合モデルでは、いわゆる正則条件が成り立たないためAIC規準はリスクの推定量として漸近不偏推定量ではない。本研究では、切片項がランダムである場合の成長曲線モデルのAIC規準のバイアス補正をラプラス近似の手法を用いて導出した。また、複数の回帰係数がランダムとした場合の分散共分散行列の最尤推定量を導出し、ランダム係数が2個の場合のAIC規準のバイアスをいくつかの漸近枠組みで導出した。
指数分布およびポアソン分布を基にした一般化線形混合モデルについて、ラプラス近似を用いた近似尤度方程式の解の漸近性質を、大標本および大標本・高次元の枠組みで導出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
正規線形混合モデルや一般化線形混合モデルは広く用いられる解析手法であるが、実際の解析場面では、未知母数の最尤推定量漸近正規性を持つことを前提に、検定・推定・モデル選択を行われることが多く、実際の信頼性が期待するものと異なる危険がある。本研究によって、理論的に妥当な解析手法を提案することができる。
本研究においてラプラス近似を、被積分関数が積分区間の内点以外で最大となる場合に拡張することができたが、この結果は近似手法を用いる様々な分野に応用できる。

研究成果の概要（英文）：In normal linear mixed models and generalised linear mixed models, the AIC criterion is not an asymptotically unbiased estimator of risk because the so-called regularity condition does not hold. In this study, the bias correction for the AIC criterion in growth curve models when the intercept term is random was derived using the Laplace approximation technique. The maximum likelihood estimator of the variance-covariance matrix when several regression coefficients are random was derived, and the bias of the AIC criterion when there are two random coefficients was derived in some asymptotic frameworks.
Asymptotic properties of the solution of the approximate likelihood equation using the Laplace approximation for generalised linear mixed models based on exponential and Poisson distributions were derived in the large-sample and large-sample/high-dimensional frameworks.

研究分野：数理統計学

キーワード：ランダム効果　線形混合モデル　一般化線形混合モデル　ラプラス近似　変数選択基準

１．研究開始当初の背景

母数空間に不等式制約がある統計モデルにおいては、いわゆる正則条件が成り立たないため、正則条件を仮定した最尤推定量の漸近正規性を基にした AIC 規準はカルバック―ライブラー擬距離に基づくリスクの推定量として漸近不偏性を持たない。母数空間に不等式制約が生じる統計モデルとして、線形混合モデルや一般化線形混合モデルがある。研究開始時点において、研究代表者は、ランダム係数を持つ成長曲線モデルの形式的な AIC 規準のバイアスが、ベータ確率変数の、2 つの区間ごとに異なる関数の期待値として表現され、ラプラス近似の手法を用いて近似でき、2 種の偏差平方和の比について不連続な罰則項を与えることで、バイアス補正可能であることを発見していた。

２．研究の目的

パラメータ空間に不等式制約があるような統計モデルに関して、最尤法に基づく検定、推定、予測、モデル選択法などの漸近性質を明らかにするとともに、それらの改良や新たな推測法の開発を目的とした。対象とする統計モデルは、線形混合モデル、一般化線形混合モデルなど、分散共分散行列のパラメータに制約があるもの、および、平均構造に制約がある一般化線形モデルである。

３．研究の方法

線形混合モデルや一般化線形混合モデルにおいて、不等式制約のあるパラメータの推定量を用いた予測分布のリスクを、偏差平方和などの基礎となる統計量の期待値としてラプラス近似の手法が利用できる形に表現し、AIC 規準のバイアスの漸近展開公式を導出する。このとき、真の母数とパラメータ空間の境界との距離が、標本数をnとして、$O\left(n^{-1/2}\right)$とした場合の展開式による近似誤差のオーダーが、真の母数の位置に関して一様な評価となっているかどうかが重要となる。モデル選択規準の導出の手順は、①推定量の漸近性質の導出、②バイアスの漸近展開の導出、③剰余項のオーダーの一様性を確認、④バイアスを補正する推定量を構築である。

４．研究成果

・ランダム係数を持つ成長曲線モデル

$$Y_{ij}^{(l)} = b_i^{(l)} + \sum_{k=1}^{q_l} \beta_k^{(l)} x_k\left(t_j\right) + \epsilon_{ij}^{(l)}$$

によって表される成長曲線モデルを扱った。ここで $Y_{ij}^{(l)}$ は第l群の個体iのt_j時点での観測値、$b_i^{(l)}$は個体差を表すランダム係数、$\beta_k^{(l)}$は未知の回帰係数、$x_k\left(t_j\right)$は基底関数で多項式回帰では$x_k(t) = t^k$などが用いられる。$l = 1, \dots, g, i = 1, \dots, n_l, j = 1, \dots, p$，$b_i^{(l)}, \epsilon_{ij}^{(l)}$は独立に、それぞれ、$N\left(\beta_0^{(l)}, \tau^2\right), N(0, \sigma^2)$に従う確率変数である。 $\mathrm{B}_k^{(l)}(k = 0,1, \dots, q_l)$ の最尤推定量は、最小 2 乗推定量と一致するが、これらを代入した尤度関数は $\sigma^2, \lambda^2 = \sigma^2 + p\tau^2$および、2 つの残差平方和$S_1, S_2$の関数となる。尤度方程式の解を求めると、$\left(\hat{\sigma}^2, \hat{\lambda}^2\right) = (S_1/\{n(p-1)\}, S_2/n\}$が得られるが、$\tau^2 \geq 0$であることから$\hat{\sigma}^2 < \hat{\lambda}^2$でなければならない。$(S_1/\{n(p-1)\} > S_2/n$である場合の最尤推定値は$\hat{\sigma}^2 = \hat{\lambda}^2 = (S_1 + S_2)/(np)$となり、これは尤度方程式の解とはならない。-2×最大対数尤度でリスク（予測分布の平均対数尤度）を推定したときのバイアスは、

$$W = \frac{S_1}{\sigma^2} + \frac{S_2}{\lambda^2}, B = \frac{S_1}{\sigma^2 W}$$

として

$$-B_1 + \frac{np}{np - (q+1)g - 2} E\left[1_{\{B > p_0 + \alpha\}} G(B; \rho)\right]$$

と表される。ここで

$$B_1 = 2\left[\{g(q+1) + 2\} + \frac{(qg+1)(qg+2)}{n(p-1) - qg - 2} + \frac{(g+1)(g+2)}{n - g - 2}\right],$$
$$n = \sum_{l=1}^{g} n_l, q = \sum_{l=1}^{g} q_l, p_0 = \frac{p-1}{p}, \alpha = \frac{p_0 \rho}{1 + (p-1)\rho}, \rho = \frac{\tau^2}{\sigma^2},$$

$G(B; \rho)$は B, ρ の滑らかな関数である。B はベータ分布に従う確率変数であるが、上記期待値のラプラス近似と、その剰余項を詳細に評価することにより、AIC の罰則項を [2×パラメータ数] の代わりに、[2×パラメータ数 $-1_{\{S_1 > (p-1)S_2\}}$とすることで、リスクの漸近不偏推定量となることが示され、そのバイアスのオーダーは、未知母数 σ^2, τ^2 に関して一様に $O\left(n^{-1/2}\right)$ となるこ

とが証明された。バイアスのオーダーが $O\left((n^{-3/2}\right)$ となるような修正 AIC 規準が、次の定理により与えられる。

定理 $d_1, d_2,$ および 関数 H を次のように定める。

$$d_1 = 2\{p - 2 + \sqrt{p^2 - 2p + 2}\}, \qquad d_2 = 2\{p - 2 - \sqrt{p^2 - 2p + 2}\}$$
$$H(b) = \left(1 + \frac{c_1}{n}\right) + \frac{g(p - q - 1)}{p_0}(b - p_0) - \frac{2p}{p_0}(b - p_0)^2,$$
$$c_1 = \frac{2(p^2 - p + 1) + g(3p^2 - (q + 7)p + 4(q + 1)\}}{p(p - 1)}$$

このとき、罰則項を次で置き換えた AIC 規準のバイアスの未知母数に関して一様には $O\left(n^{-3/2}\right)$ である。

$$B_1 - \frac{np}{np - (q + 1)g - 2}\left(1_{s_1/s_2 > (p-1) - d_1/n} + 1_{s_1/s_2 > (p-1) - d_2/n}\right)$$

・複数のランダム係数を持つ線形混合モデル

簡単のため、群の個数は $g = 1$、また、多項式回帰モデルを考え、t_j^k $(k = 0, \dots, r - 1)$の回帰係数がランダム係数である場合を考える。

$$Y_{ij} = \left(1, t_j, \dots, t_j^{r-1}\right)b_i + \sum_{k=r}^{q} t_j^k \beta_k + \epsilon_{ij}$$
$$b_i(i = 1, \dots, N)\ i.i.d.\ N_r(\mu, \Xi_r),\ \epsilon_{ij} \quad (i = 1, \dots, N;\ \ j = 1, \dots, p) \quad i.i.d.\ N(0, \sigma^2)$$

観測ベクトル $Y = (Y_1, \dots, Y_N)'$ を線形変換することにより、このモデルは

$$Z_i = \begin{pmatrix} Z_{i1} \\ Z_{i2} \\ Z_{i3} \end{pmatrix} \sim N_p\left[\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Xi + \sigma^2 I_r & O & O \\ O & \sigma^2 I_{q-r+1} & O \\ O & O & \sigma^2 I_{p-q-1} \end{pmatrix}\right]$$

と変形することができる。μ_1, μ_2 の最尤推定量は、それぞれ $Z_{i1}, Z_{i2} (i = 1, \dots, N)$ の標本平均となる。$S_k (k = 1,2,3)$ を，$Z_{ik} (i = 1, \dots, N)$ の偏差平方和積和行列とし、$s_2 = tr(S_2 + S_3)$ とおく。S_1 の固有値を大きい順に $l_1, \dots, l_r$ とし、対応する固有ベクトルを $h_1, \dots, h_r$ とし、

$$s^{(0)} = \infty, s^{(j)} = (p - j)l_j - \left(l_{j+1} + \cdots + l_r\right)(j = 1, \dots, r - 1), s^{(r)} = (p - r)l_r, s^{(r+1)} = 0$$

とおくと、$s^{(k)} > s_2 \geq s^{(k+1)}$ を満たす k がただ一つ存在する。

$$\widehat{\sigma_k^2} = \frac{s_2 + l_{k+1} + \cdots + l_r}{N(p - k)}$$

とすると、σ^2 の最尤推定量は $\widehat{\sigma_k^2}$ となる。また、$\Xi + \sigma^2 I_r$ の固有値を大きい順に，$\lambda_1, \dots, \lambda_r$ とし、対応する固有ベクトルを $\xi_1, \dots, \xi_r$ とすると、$\xi_j (j = 1, \dots, r)$ の最尤推定量は h_j，λ_j $(j = 1, \dots, k$ の最尤推定量は l_j/N、$\lambda_j (j = k + 1, \dots, r)$ の最尤推定量は $\widehat{\sigma_k^2}$ となることがわかった。

$r = 2$ すなわち、切片と t_j の一次の係数のみがランダム係数である場合に、ラプラス近似を用いて AIC の漸近バイアスを分散に関するパラメータが、パラメータ空間の境界にある場合に導出した。$\lambda_1 = \lambda_2 = \sigma^2$, $\lambda_1 > \lambda_2 = \sigma^2$の漸近バイアスが異なり、$\lambda_1$ について連続でないことがわかった。$s^{(k)} > s_2 \geq s^{(k+1)}$ を満たす k $(k = 0,1, or, 2)$ によって、導出したバイアスを補正することが考えられるが、その妥当性は未解決である。

・一般化線形混合モデル

一般化線形モデルの最尤推定量はニュートン・ラフソン法などの反復法によって数値的に計算される。一般化線形混合モデルにおいてランダム効果の分布として良く用いられる正規分布を仮定した場合、尤度方程式は陽に表現できない積分を含むため、最尤推定量の導出には、反復

の回数分、数値積分が必要となる。そのため、実データに適用する場合には、尤度方程式に現れる積分をガウス・エルミート法、あるいはラプラス近似を用いて近似した推定方程式を用いることが多い。

本研究では、ラプラス近似を用いて近似された尤度方程式の解として得られる回帰係数の漸近性質を導出し、それを元に AIC を導出することを目的とした。m 個の群から n 個ずつの観測値 $Y_{ij}(i=1,\dots,m; j=1,\dots,n)$ が得られるとする。Cox の比例ハザードモデルにランダム効果を導入し、部分尤度のラプラス近似を用いて回帰係数を推定する場合への拡張を念頭に、Y_{ij} の分布として、まず指数分布を選んだ。共変量ベクトル $x_{ij}(i=1,\dots,m; j=1,\dots,n)$ は独立に同一分布に従うとし、$-\log\left(E\left[Y_{ij}\middle|\alpha_i, x_{ij}\right]\right)=\alpha_i + x'_{ij}$ とする。ここで線形予測子 α_i は、群の効果を表す確率変数で、$\alpha_i \sim N(\mu,\tau^{-1})$ を仮定する。このとき、対数尤度関数は

$$\frac{\tau^{m/2}}{(2\pi)^{m/2}}\prod_{i=1}^{m}\int \exp\left(n\lambda_i(\alpha;\beta,\mu,\tau)\right)d\alpha_i,$$

$$\lambda_i(\alpha_i;\beta,\tau,\mu)=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}x'_{ij}\beta+\alpha_i-\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}Y_{ij}\exp\left(x'_{ij}\beta+\alpha_i\right)-\frac{\tau}{2n}(\alpha_i-\mu)^2$$

となる。μ,τ を固定して、 α_i に関する積分についてラプラス近似を用いた近似対数尤度を最大とする β を $\hat{\beta}(\mu,\tau)$ とする。このとき、次の定理を得た。

定理　β_0 を真の回帰係数ベクトルとする。
(c.1) 正数 δ_1 が存在して、任意の $\delta(0<\delta<\delta_1)$ に対して、$E\left[e^{\delta|x_{ij}|}\right]<\infty$
(c.2) $J=Cov\left[x_{ij}\right]<\infty$ かつ J は整定値
の 2 条件が成り立つとき、適当に選んだ μ,τ の値に依らず
(i)　$m\to\infty, n\to\infty, m/n\to 0$ ならば $(mn)^{1/2}\left(\hat{\beta}(\mu,\tau)-\beta_0\right)$ は $N_p\left(0_p, J^{-1}\right)$ に分布収束する。
(ii)　m: fix$, n\to\infty,$ ならば $n^{1/2}\left(\hat{\beta}(\mu,\tau)-\beta_0\right)$ は $N_p\left(0_p,(mJ)^{-1}\right)$ に分布収束する。

$\lambda_i(\alpha_i;\beta,\tau,\mu)$ を最大にする α_i を $\hat{\alpha}_i(\beta,\tau,\mu)$ とする。$\hat{\alpha}_i\left(\hat{\beta}(\mu,\tau),\tau,\mu\right)$ は群効果の一致推定量であることが示され、さらに次の定理を得た。

定理 $\mu_0,\tau_0>0$ を、それぞれ μ,τ の真値とする。$m\to\infty, n\to\infty, m/n\to 0$ ならば

$$\sqrt{m}\left(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{\alpha}_i\left(\hat{\beta}(\mu,\tau),\tau,\mu\right)-\mu_0\right)\to N(0,\tau_0^{-1})\quad \text{in distribution}$$

$$\sqrt{m}\left(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{\alpha}_i\left(\hat{\beta}(\mu,\tau),\tau,\mu\right)-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{\alpha}_i\left(\hat{\beta}(\mu,\tau),\tau,\mu\right)\right)^2-\frac{1}{\tau_0}\right)\to N\left(0,\frac{2}{\tau_0^2}\right)\quad \text{in distribution}$$

カテゴリーデータの解析において重要な一般化線形モデルによる解析はロジスティック回帰と対数ポアソン回帰である。本研究では、対数ポアソン回帰において、切片項が群効果を表す正規確率変数としたモデルを扱い、上記（指数分布の場合）と同様な研究を行っている。対数尤度関数は、上記と同様に

$$\prod_{i=1}^{m}\int \exp\left(n\lambda_i(\alpha;\beta,\mu,\tau)\right)d\alpha_i$$

が含まれる。このとき、

$$\lambda_i(\alpha_i;\beta,\tau,\mu)=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}Y_{ij}(x'_{ij}\beta+\alpha_i)-\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\exp\left(x'_{ij}\beta+\alpha_i\right)-\frac{\tau}{2n}(\alpha_i-\mu)^2$$

である。m を固定して、$n\to\infty$ としたときの $\hat{\beta}(\mu,\tau)$ の一致性および、漸近正規性が示されたが、$m\to\infty, n\to\infty$ の場合の漸近性質については導出の途中である。

一般化線形混合モデルの研究については、群効果が実際には固定効果である場合のラプラス近似による偏回帰係数ベクトルの漸近性質がの解明、さらに変数選択規準の導出が課題として

残っている。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計3件（うち査読付論文　3件／うち国際共著　2件／うちオープンアクセス　0件）

１．著者名 M. Ohishi, H. Yanagihara and H. Wakaki	４．巻 1
２．論文標題 Optimization of generalized C_{p} criterion for selecting ridge parameters in generalized ridge regression.	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Proceedings of the 12th KES International Conference on Intelligent Decision Technologies (KES-IDT-20)	６．最初と最後の頁 267-278
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 H. Wakaki and Y. Fujikoshi	４．巻 62(1)
２．論文標題 Computable error bounds for high-dimensional approximations of an LR statistic for additional information in canonical correlation analysis	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Theory of Probability and Its Applications	６．最初と最後の頁 194-211
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 T. Nakagawa and H. Wakaki	４．巻 47(2)
２．論文標題 Selection of the linear and quadratic discriminant functions when the difference between two covariance matrices is small	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Journal of Japan Satistical Society	６．最初と最後の頁 145-146
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕　計5件（うち招待講演　1件／うち国際学会　0件）

１．発表者名 若木　宏文
２．発表標題 大標本・高次元漸近展開と誤差評価
３．学会等名 日本統計学会春季大会（招待講演）
４．発表年 2022年

１．発表者名
若木　宏文

２．発表標題
Laplace expansion of the distribution funciton of Bartlett-Nanda-Pillai test and its error bound

３．学会等名
2019年日本数学会秋季総合分科会

４．発表年
2019年

１．発表者名
上野 哲矢,若木 宏文

２．発表標題
階層一般化線形モデルの尤度方程式のラプラス近似について

３．学会等名
統計関連学会連合大会

４．発表年
2018年

１．発表者名
若木 宏文

２．発表標題
ラプラス近似とその応用

３．学会等名
RIMS共同研究「高次元量子雑音の統計モデリング」

４．発表年
2018年

１．発表者名
若木宏文

２．発表標題
On a model selection criterion for a linear mixed model

３．学会等名
統計関連学会連合大会

４．発表年
2017年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

－

6．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考

7．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

8．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関