

ノンパラメトリック変換の諸型と診断

山之内製薬株式会社 伊藤 雅 憲

大阪大学大学院基礎工学研究科 後藤 昌 司

要 旨 本研究では、理論モデルの適合推測において、両辺ベキ変換方式(Power Transformation Both sides: PTB)の代替としてノンパラメトリック両辺変換接近法(Nonparametric Transformation Both sides: NTB)を導入し、その推定法として、3次スプライン曲線で変換関数を表現する方法を提示した。理論モデルの背後にある(実質科学分野の)現象から観測されたデータが公表され、非線形モデルの推測で諸種の難点が指摘されている2種の文献事例の検討から、対数尺度上でのNTBの適用による平滑化定数 ρ を動かしたときの残差診断の結果はPTBの妥当性をはかる評価指標となること、またNTBはPTBよりも「外れ値」に対して頑健であることを示唆した。さらに、これらの仮説の検証を目標としてシミュレーションを遂行した。PTBが至適といえるモデルのもとでシミュレーションを行った結果、NTBの平滑化定数の最適値が正の方向に発散し、NTBがPTBの適切性を示唆した。また、真の変換がベキ変換族に含まれない状況でのシミュレーションを行い、小標本でのNTBの有用性を示唆した。さらに、NTBのパラメータの推定値の安定性の評価を意図したシミュレーションでは、PTBと比較してNTBがモデル・パラメータの安定した推定値を与えた。経験モデルの適合推測、応答と説明関数の最適性に注目した2種のノンパラメトリック変換接近法として交替条件つき期待値法ACEと加法型分散均一化変換AVASを導入した。理論モデルを文献事例のデータに即してACEとAVASによる経験モデルの適合結果で吟味し、新たな知見を加えた。

1. はじめに

実質科学の現象が生起する機構を究明するには、主要な要因を想定あるいは抽出して現象を簡素化し、システムを構築することが試みられる。システムは入力から出力への変換の過程であり、これらの二つのシグナルの関係を構築することでシステムが同定される。この関係を定式化したものがモデルであり、統計的な観点では、入力は説明要因であり、出力は応答である。このとき、モデルは統計的な推測・評価・診断の過程を段階的に踏むことで実地での予測や制御の道具として用いられる。ただし、実際にはシステムを同定することが困難な場合も多くみられ、この状況では、現象から生起したデータのみに基づいて経験的にモデルを構築することが試みられる。このとき、既往の理論と知識に基づいて構築される前者のモデルを「理論モデル」、およびデータから段階的な推測を通して導出される後者のモデルを「経験モデル」と呼ぶ(後藤・田中, 1984)。

本稿の第1の目標は、理論モデルの適合推測における難点を拾い出し、対処の手段を提供することである。本研究ではとくに非線形モデルに焦点をあて、対処の方法として統計的変換諸法に

注目する．理論モデルの適合推測における難点は，理論モデルがデータの観測機構と無関係に想定されることから生じるモデルとデータの間の特有の乖離，すなわち誤差にある．ここでの目標は，理論モデルの誤差を統計的に設計すること，いいかえれば誤差の分布の対称性と分散均一性の充足をはかることである．これらの目標を達成するための常套手段がベキ変換接近法であり，とくに理論モデルの適合推測では，変換の前後でのモデルの不変性に留意して，応答と説明関数（説明変数とパラメータの組で表される非線形関数）の両方に同一のベキ変換を施す両辺ベキ変換接近法（Power-Transformation Both sides: PTB: Carroll and Ruppert, 1984）が提案されている．ただし，PTB はデータに過敏であり，とくに非線形モデルの推測で安定な結果を与えることが困難である．そこで，両辺ベキ変換方式におけるベキ変換関数の代わりに，ノンパラメトリック両辺変換（Nonparametric Transformation Both sides: NTB）接近法として，3 次スプライン曲線で変換関数を表現する方法（Nychka and Ruppert, 1995）を導入する．スプライン推定法は，平滑化定数を伴う罰則つき尤度を最大にすることで最適変換を示唆する．3 節では，理論モデルの背後にある（実質科学の）現象が既知で，しかもデータが公表され，非線形モデルの推測で難点が指摘されている文献事例を紹介し，この事例に PTB と NTB を適用し，両接近法の性能を評価する．4 節では，NTB が PTB の妥当性診断のツールになり得ることを示す．さらに NTB のモデル・パラメータの推定値の安定性に注目し，シミュレーションにより検証する．また，経験モデルの適合推測では，種々のノンパラメトリック回帰法が相応の成果をあげているが，そこには応答と説明関数（あるいはその変換関数）の最適な関係が導出されたとする保証はない．この最適性に着目し，ベキ変換接近法と同じくモデルの構築の前提に留意して応答の変換を考慮に入れた方法が交替条件つき期待値法（Alternating Conditional Expectation: ACE: Breiman and Friedman, 1985）と加法型分散均一化変換（Additivity and VAriance Stabilization: AVAS: Tibshirani, 1988）である．本稿では文献事例のデータに対して ACE と AVAS を適用し，経験モデルを構築して推測した結果と理論モデルでの適合結果とを比較する．

2. 変換に基づく理論モデルの適合推測

2.1. パラメトリック両辺変換方式

一般に非線形回帰モデルは

$$Y = f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon \quad (1)$$

と表される．ここに， \mathbf{X} は説明変数 X_p ($p = 1, 2, \dots, p_0$) の $p_0 \times 1$ ベクトル， $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta})$ はパラメータ β_i ($i = 1, 2, \dots, I$) をもつ既知の関数である． ε は誤差を表し，平均 0 の分布に従うと仮定する． Y は $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta})$ に対応する応答（確率変数）である．ベキ変換接近法は，誤差分布の対称化（正規化），誤差分散の同等化，モデルの加法化，独立観測値の獲得を目標としている．(1) において，このモデルの誤差に対称性あるいは分散均一性を与える一つの方法は，応答にベキ変換を施すことである．変数 t に関するベキ・パラメータ λ のベキ変換関数は

$$H_p(t; \lambda) = \begin{cases} (t^\lambda - 1)/\lambda & \lambda \neq 0, \\ \log t & \lambda = 0 \end{cases}$$

であり，通常，この変換が応答に施される（Box and Cox, 1964）．このとき，変換前と変換後の

誤差分布に対する想定の方によって、二つの立場がある。一つは、変換前の誤差分布はベキ正規分布に従い、変換後には近似的に正規分布になるとする立場である。もう一つは、誤差が当初から正規分布に従うと仮定して、変換の前後でその分布が変わらないとする立場である。このとき、無構造データに対しては前者、有構造データに対しては後者の立場を想定することが、推測の柔軟性を強めるとして推奨されている (Goto *et al.*, 1983)。ここに、無構造データとはデータに回帰関数や分類仕様などの構造を規定しない観測値の集合を意味している。また、データの観測機構に対して何らかの基準(一般に「外的基準」といわれる)が設けられており、その基準を線形あるいは非線形のモデルの想定に活かせる場合に、それらの観測値の集合は有構造データである (Gnanadesikan, 1977; 後藤, 1986; 後藤 他, 1991; 濱崎・後藤, 1996)。本稿では、理論モデルの適合推測を意図することから、後者の立場をとる。ただし、理論モデルで応答のみの変換は、応答 Y と説明関数 $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta})$ の間の既知の関係を崩す恐れがある。この問題に対する自然な設定は、応答 Y と説明関数 $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta})$ に同一のベキ変換、すなわち PTB を施すことである。すなわち、(1) の場合には

$$H_p(Y; \lambda) = H_p\{f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta}); \lambda\} + \varepsilon_p \quad (2)$$

となる (Carroll and Ruppert, 1984)。この操作は、変換後の誤差の正規性と分散均一性の充足を狙いとしている。ただし、一つの変換のみ、いいかえれば、一つのパラメータ λ の値の調整だけによる変換で、この二つの目標を同時に達成することは困難である (Goto *et al.*, 1987; Goto, 1992; Goto 1995; Goto *et al.*, 2000; 地村・後藤, 1997)。Goto (1992); Goto (1995); Goto *et al.* (2000) は、ベキ変換における「仮定」と「目標」を明確にして、3種の単一の目標だけを達成する単一ベキ変換方式と二つの目標を同時に達成する2重ベキ変換方式を提案し、評価している。ここで用いる PTB 接近法では、誤差分布に正規分布を想定し、変換の前後で誤差分布の形状は変わらないとして、誤差の分散の均一性をはかることになる。いま、変換前の誤差の分布を不等分散 σ_n^2 の正規分布 $N(0, \sigma_n^2)$, $n = 1, 2, \dots, N$ であると仮定する。そして、変換後に誤差分散 σ^2 が一定になることを意図して、 $\varepsilon_p \sim N(0, \sigma^2)$ と仮定する。変換で分散を均一にする通常の方法は、分散と平均の関係を経験的に、あるいは理論的に決定するか、もしくは分散均一性の Bartlett 基準 (Bartlett, 1937) を最小化することである。ここでは、後者の方法、すなわち変換後の分散を均一にする重みづけを行うベキ加重化変換方式を採用する。両辺変換の枠組みでは、観測値 $\{(\mathbf{x}_n, y_n), n = 1, 2, \dots, N\}$ に対する対数尤度

$$L(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \lambda) = \sum_{n=1}^N \left(-\frac{1}{2} [H_p(y_n; \lambda) - H_p\{f(\mathbf{x}_n; \boldsymbol{\beta}); \lambda\}]^2 / \sigma^2 + \log \frac{d}{dt} H_p(y_n; \lambda) - \frac{1}{2} \log \sigma^2 \right) + C_0 \quad (3)$$

を最大にする $\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \lambda$ を推定する (Carroll and Ruppert, 1984, 1988)。ここに、 C_0 は、誤差が正規分布に従うときの、その確率密度関数の係数を含む定数項である。

2.2. ノンパラメトリック両辺変換方式

PTB 接近法では、対数尤度を最大化することでベキ・パラメータとモデル・パラメータの推定を行う。この類推から、NTB 方式では、ノンパラメトリック変換関数の「粗さ」の調整を意図して、罰則つき尤度に基づく変換関数とモデル・パラメータの推定を行う。ここでは、前節の (3) に罰則項を付与した罰則つき尤度を定義し、これを最大化することで変換関数 $H_S(u)$ 、モデル・パラ

メータ(ベクトル) β , 誤差分散パラメータ σ^2 の推定を行う。ここに, $H_S(u)$ は, 狭義の単調性を満たす滑らかな関数であり, 2.1 節 (2) 式のベキ変換関数 $H_P(u)$ に対応する。罰則つき尤度関数は

$$L_P(\beta, \sigma^2, H_S(u)) = L(\beta, \sigma^2, H_S(u)) - \rho J(H_S(u)), \quad \rho > 0 \quad (4)$$

と書くことができる。ここに, $L(\beta, \sigma^2, H_S(u))$ は (3) 式のベキ変換関数 $H_P(u)$ を $H_S(u)$ におきかえたときの対数尤度であり, また $J(H_S(u))$ は $H_S(u)$ の「粗さ」, すなわちラフネス・ペナルティを表し, とくに

$$J(H_S) = \int_{u_L}^{u_U} \left(\frac{d^2 h_S(u)}{du^2} \right)^2 du$$

と定義する。ここに, u_L と u_U は $\{y_n\} \in [u_L, u_U]$ となるように選定される。 ρ はラフネス・ペナルティが罰則つき尤度に与える影響度を調整する定数であり, 平滑化定数と呼ぶ。また, $h_S(u)$ は $H_S(u)$ の対数導関数, すなわち $h_S(u) = \log(dH_S(u)/du)$ とおく。これより

$$H_S(u) = \int \exp[h_S(u)] du$$

となるので, $H_S(u)$ に狭義の単調性の制約が課される。ここでは, $L_P(\beta, \sigma^2, H_S(u))$ を最大にする変換関数 $H_S(u)$ と, モデル・パラメータ(ベクトル) β の推定を行う。実際には, 次の二つのステップを, 収束するまで交互に反復する。

- 【ステップ 1】 固定したモデル・パラメータ(ベクトル)のもとで $L_P(\beta, \sigma^2, H_S(u))$ を最大化する変換関数 $H_S(u)$ を推定する。このアルゴリズムを「変換アルゴリズム」と呼ぶ。
- 【ステップ 2】 推定した変換関数 $\hat{H}_S(u)$ による両辺変換を施したうえで $L_P(\beta, \sigma^2, H_S(u))$ を最大にするモデル・パラメータ(ベクトル)を推定する。このアルゴリズムを「パラメータ推定アルゴリズム」と呼ぶ。

これらのアルゴリズムは, 平滑化定数 ρ を固定したうえで遂行される。平滑化定数の選定でよく用いられるのが, 交差確認法に依る基準である。ただし, 両辺変換モデルは既知の理論式(構造)の成立を前提において推測を行うことから, 応答を最良に予測することを目標におく交差確認法の適用は推奨されない (Goto, 1979; Goto and Matsubara, 1979)。さらに, ノンパラメトリック回帰でも, この主旨にそえば, 平滑化スプラインの推定に対して Bayes 流接近法の観点から制約つき最尤推定法を適用することで, 構造の探索に主眼をおいた平滑化定数の選定が可能になる (坂本, 1999)。本稿では, 平滑化定数を幾つか設定し, 変換後の誤差分散の均一性, 変換後の誤差の正規性との関連を吟味する。

$H_S(u)$ は, 重みつき 3 次平滑化スプラインを用いて推定される。ここでは, (4) を $h_S(u)$ に関する罰則つき尤度でおきかえることにより, 無制約の最適化方式を用いてパラメータを推定する。変換の前後での誤差分布に対する仮定は PTB の場合と同様であるから, 罰則つき尤度は

$$L_P(\beta, \sigma^2, h_S(u)) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \left\{ - \left(\int_{y_n}^{f_n} \exp h_S(u) du \right)^2 / \sigma^2 + 2h_S(y_n) - \log \sigma^2 \right\} - \rho \int_{u_L}^{u_U} \left(\frac{d^2 h_S(u)}{du^2} \right)^2 du + C_0^* \quad (5)$$

となる。ここに, y_n ($n = 1, 2, \dots, N$) は応答の観測値であり, また $f_n = f(\mathbf{x}_n; \beta)$ とおく。 C_0^* は (3)

と同じく定数項である。このとき、 $h_S(u)$ の推定が必要になる。ここでは、重みつき 3 次平滑化スプラインを用いて $h_S(u)$ を推定する。いま、 $J \geq 3$ の時任意の j ($j = 1, 2, \dots, J$) に対して、 (u_j, Z_j) が与えられるという条件で

$$Z_j = h_S(u_j) + v_j$$

の平滑化を行う。ここに、 u_1, \dots, u_J は $[u_L, u_U]$ 内の点で、 $u_L < u_1 < \dots < u_J < u_U$ を満たし、かつ $\{y_n\} \in [u_1, u_J]$ となるように選定される。また、誤差 v_j は、不等分散 $1/\omega_j$ の正規分布 $N(0, 1/\omega_j)$ に従うとする。次に二つの関数空間を定義する。すなわち、 $\mathcal{S}_1[u_L, u_U]$ は $[u_L, u_U]$ 上の関数で微分可能かつ絶対連続な 1 次導関数をもつ関数すべての空間であり、 $\mathcal{S}_2[u_L, u_U]$ は $[u_L, u_U]$ 上の関数で 2 次連続導関数をもつ関数すべての空間であるとする。このとき、重み ω_j を伴う罰則つき平方和

$$\mathcal{S}(h_S(u)) = \sum_{j=1}^J \{Z_j - h_S(u_j)\}^2 \omega_j + \rho \int_{u_L}^{u_U} \left(\frac{d^2 h_S(u)}{du^2} \right)^2 du, \quad \rho > 0$$

を定義する。さらに、 $[u_L, u_U]$ 上のすべての十分に滑らかな曲線の集合である $\mathcal{S}_2[u_L, u_U]$ における $\mathcal{S}(h_S(u))$ を最小にする $h_S(u)$ の推定式が $\hat{h}_S(u)$ であるとする。このとき、 $\hat{h}_S(u)$ は点 u_j に節点をもつ(自然)3 次スプラインとなる (O'sullivan *et al.*, 1986)。

ここでは、Nychka and Ruppert (1995) の罰則つき尤度を最大にするアルゴリズムを用いて $h_S(u)$ の推定を行う。実際には、 $\{y_n\}$ と $\{f_n\}$ を含むように選定した区分点 u_1, \dots, u_J に基づいて、(5) の第 1 項の積分

$$\int_{y_n}^{f_n} \exp h_S(u) du$$

の近似を行うことで $\{Z_j\}$ を算出し、罰則つき尤度の最大化をはかる。すなわち、(5) を

$$L_{PA}(\sigma^2, h_S(u)) = \sum_{n=1}^N \left[- \left\{ \sum_{j=1}^J W_{nj} \exp h_S(u_j) \right\}^2 / 2\sigma^2 + \sum_{j=1}^J \zeta_{nj} h_S(u_j) \right] - \rho \int_{u_L}^{u_U} \left(\frac{d^2 h_S(u)}{du^2} \right)^2 du \quad (6)$$

で近似する。ここに、 W_{nj} は $n \times j$ 行列の成分であり

$$\left| \int_{y_n}^{f_n} \exp h_S(u) du \right| \approx \sum_{j=1}^J W_{nj} \exp(h_S(u_j))$$

となるように選定する。また、 ζ_{nj} は

$$h_S(y_n) \approx \sum_{j=1}^J \zeta_{nj} h_S(u_j)$$

となるように選定する $n \times j$ 行列の成分である。 u_1, \dots, u_J を節点とする自然 3 次スプライン $h_S(u)$ は

$$\begin{aligned}\mathbf{h}_S &= (h_S(u_1), \dots, h_S(u_J))^T, \\ \frac{d^2 \mathbf{h}_S(u)}{du^2} &= (d^2 h_S(u_1)/du^2, \dots, d^2 h_S(u_J)/du^2)^T\end{aligned}$$

とおくと、 \mathbf{h}_S によって一意に定まるので、ここでは (6) を

$$L_{\text{PA}}(\mathbf{h}_S) = -\frac{1}{2} \mathbf{h}_S^{*\text{T}} \boldsymbol{\Omega} \mathbf{h}_S^* + \boldsymbol{\zeta}^T \mathbf{h}_S^T - \rho \mathbf{h}_S^T \mathbf{R} \mathbf{h}_S \quad (7)$$

と書き直す。ここに

$$\mathbf{h}_S^* = (\exp[h_S(u_1)], \dots, \exp[h_S(u_J)])^T, \quad \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{W}^T \text{diag}(\mathbf{V}) \mathbf{W}$$

であり、 \mathbf{W} は成分 W_{nj} を伴う行列、 \mathbf{V} は $N \times N$ 行列で、その対角成分は $n = 1, 2, \dots, N$ について $V_{nn} = \sigma^2$ であり、その他の成分は 0 である。また、 $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_{\cdot 1}, \dots, \zeta_{\cdot J})^T$ である。ここに

$$\zeta_{\cdot j} = \sum_{n=1}^N \zeta_{nj}$$

であり、 \mathbf{R} は \mathbf{h}_S と $\frac{d^2 \mathbf{h}_S(u)}{du^2}$ を用いて構成される $J \times J$ 対称行列である。(7) を $\{h_S(u_j)\}$ で偏微分すると

$$\left. \frac{\partial L_{\text{PA}}(h_S(u))}{\partial h_S(u)} \right|_{u=u_j} = -h_S(u_j) [\boldsymbol{\Omega} \mathbf{h}_S^*]_j + \zeta_{\cdot j} - 2\rho [\mathbf{R} \mathbf{h}_S]_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (8)$$

となる。(8) を満たす $\{h_S(u_j)\}$ を求めれば、これを用いて推定式 $\hat{h}_S(u)$ が一意に定まる。

以上のことから、パラメータ $\boldsymbol{\beta}, \sigma^2$ を固定したときの $h_S(u)$ の推定アルゴリズムは以下のようになる。

【ステップ 1】 区分点 $\{u_j\}$ ($j = 1, 2, \dots, J$) を決定する。

【ステップ 2】 $\boldsymbol{\Omega}$ と $\boldsymbol{\zeta}$ を計算する。

【ステップ 3】 $h_{S0} = 0$ とする。

【ステップ 4】 $h_{S0}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\zeta}$ に基づいて、 $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_J)^T$ と重み $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_J)^T$ を計算する。

【ステップ 5】 h_{S0} 、重み $\{w_j\}$ 、 $\{u_j, Z_j\}$ に基づいて 3 次スプライン h_{S1} を推定する。

【ステップ 6】 $h_{S0} = \hat{h}_{S1}$ とする。

ステップ 1 からステップ 3 は初期化である。これらの値に基づいて、ステップ 4 からステップ 6 を $h_{S0} = \hat{h}_{S1}$ と収束するまで反復させる。なお、ステップ 5 では、初期値 h_{S0} によって重み $\{w_j\}$ および、格子点と作業応答の組 $\{u_j, Z_j\}$ が定められる。これらの値は $\boldsymbol{\Omega}_{jj}$ と D_j に依存しており、計算の過程は以下のようになる。

(i) $\boldsymbol{\Omega}_{jj} = 0$ の場合： $\boldsymbol{\Omega}_{jj} = 0$ の場合には、 $Z_j = D_j + h_{S0}(u_j)$ 、 $w_j = 1$ とおく。

(ii) $\boldsymbol{\Omega}_{jj} > 0$ 、 $D_j = 0$ の場合：(8) を $\boldsymbol{\Omega}_{jj}$ を用いて書き表すと、 $j = 1, 2, \dots, J$ について

$$\exp(2h_S(u_j)) \boldsymbol{\Omega}_{jj} + \exp h_S(u_j) \sum_{j' \neq j_0}^J \boldsymbol{\Omega}_{jj_0} \exp h_{S0}(u_{j_0}) + 2\rho [\mathbf{R} \mathbf{h}_S]_j = 0$$

となる。最初に、第 2 項において $h_{S0}(u_{j_0})$ を $S_0 \rightarrow S$ と更新したときの $h_S(u_{j_0})$ でおきかえ

ることによって行列の対角化を行う．ここでの線形化は， $h_{S0}(u_j)$ についての 1 次 Taylor 級数を用いる．すなわち，上式の第 1 項に対して

$$\exp(2h_S(u_j)) \approx \exp(2h_{S0}(u_j))\{1 + 2(h_S(u_j) - h_{S0}(u_j))\}$$

となる．また，第 2 項に対しては， $\exp h_{S0}(u_j)$ で $\exp h_S(u_j)$ を代替する．これより，近似式

$$\exp(2h_{S0}(u_j))\{1 + 2(h_S(u_j) - h_{S0}(u_j))\}\Omega_{jj} + \exp h_{S0}(u_j) \sum_{j \neq j_0}^J \Omega_{jj_0} \exp h_{S0}(u_j) + 2\rho[\mathbf{R}h_S]_j = 0$$

を得る． $h_S^*(u_j) \equiv \exp h_S(u_j)$ とすると

$$-2h_{S0}^*(u_j)^2 \Omega_{jj} \left(-\frac{1}{2h_{S0}^*(u_j) \Omega_{jj}} [\mathbf{\Omega} h_{S0}(u_j)]_j + h_{S0}^*(u_j) - h_S^*(u_j) \right) + 2\rho[\mathbf{R}h_S]_j = 0$$

となる．すなわち

$$-2w_j(Z_j - h_S(u_j)) + 2\rho[\mathbf{R}h_S]_j = 0$$

となり， w_j と Z_j で括弧内の 2 個の項を設定する．

(iii) $\Omega_{jj} > 0, D_j > 0$ の場合：(8) を Ω_{jj} と D_j を用いて書き表すと

$$\exp(2h_S(u_j)) \left\{ \Omega_{jj} + \exp(-h_S(u_j)) \sum_{j \neq j_0}^N \Omega_{jj_0} \exp h_S(u_j) - \exp(-2h_S(u_j)) D_j \right\} + 2\rho[\mathbf{R}h_S]_j = 0$$

となる．(ii) と同様にして，次の線形化

$$-2D_j \left(\frac{-h_{S0}(u_j) [\mathbf{\Omega} h_{S0}]_j}{2D_j + 1/2 + h_{S0}(u_j)} - h_S(u_j) \right) - 2\rho[\mathbf{R}h_S]_j = 0$$

を行う．上式に基づいて， $w_j = D_j$ とし，かつ括弧内の第 1 項が Z_j となるように設定する．

$H_S(u)$ は $\exp[h_S(u)]$ の不定積分で表されるので，本稿では区分点に基づいてこの積分を近似的に算出した．上記のアルゴリズムで $\hat{H}_S(u)$ が求まる．すなわち， $\{\beta, \sigma^2, H_S(u)\}$ は「変換アルゴリズム」と「パラメータ推定アルゴリズム」を交互に反復することで推定される．

なお，平滑化定数が正の方向に発散するとき，罰則つき尤度関数のラフネス・ペナルティの制約は外され，罰則つき尤度を最大にする変換 $H_S(u)$ はパラメトリック族に含まれる．すなわち

$$J(H_S(u)) = 0$$

であり，このとき $h_S(u)$ は線形関数になる．したがって， γ_1, γ_2 を定数として

$$h_S(u) = \gamma_1 + \gamma_2 u$$

と表され

$$H_S(u) - H_S(u_0) = \{\exp(\gamma_1/\gamma_2)\} \{\exp(\gamma_2 u) - \exp(\gamma_2 u_0)\}$$

となる．ここで $u = \log \omega$ とおくと

$$\begin{aligned}
 H_S(u) - H_S(u_0) &= H_S(\log \omega) - H_S(\log \omega_0) \\
 &= \exp(\gamma_1/\gamma_2)\{\exp(\gamma_2 \log \omega) - \exp(\gamma_2 \log \omega_0)\} \\
 &= \exp(\gamma_1/\gamma_2)\omega^{\gamma_2} - \exp(\gamma_1/\gamma_2)\omega_0^{\gamma_2} \\
 &= C_1\omega^{\gamma_2} - C_2
 \end{aligned}$$

となり、これはベキ関数である。ここに、 C_1 と C_2 はそれぞれ γ_1, γ_2 と γ_1, γ_2, u_0 に依存する定数である。以上のことから、対数尺度上では、平滑化定数が正の方向に発散するとき、変換関数は近似的にベキ変換関数族に含まれる。

2.3. 交替条件つき期待値法：ACE

Breiman and Friedman (1985) によって開発されたノンパラメトリック変換接近法 ACE (Alternating Conditional Expectations) の目標は、最も適合の良い加法モデルを与える変換関数の探索である。応答変数 Y と説明変数 X_1, \dots, X_{p_0} に対して、 $H_{AC}(Y), S_{AC_1}(X_1), \dots, S_{AC_{p_0}}(X_{p_0})$ は確率変数に対応する任意の関数とする。回帰解析において、想定した加法モデルが $E\{Y|X_1, \dots, X_{p_0}\}$ ではなく、ある応答関数の条件つき期待値 $E\{H_{AC}(Y)|X_1, \dots, X_{p_0}\}$ に対して適切となることがある。このとき、加法モデルの応答変換が必要となる。

$H_{AC}(Y)$ の $\sum_{p=1}^{p_0} S_{AC_p}(X_p)$ 上への回帰によって説明されない分散の比率 (e^2) は

$$e^2(H_{AC}, S_{AC_1}, \dots, S_{AC_{p_0}}) = \frac{E\{[H_{AC}(Y) - \sum_{p=1}^{p_0} S_{AC_p}(X_p)]^2\}}{E[H_{AC}^2(Y)]} \quad (9)$$

となる。このときに (9) を最小にする最適変換を $H_{AC}^*, S_{AC_1}^*, \dots, S_{AC_{p_0}}^*$ と定義する。すなわち

$$(H_{AC}^*, S_{AC_1}^*, \dots, S_{AC_{p_0}}^*) = \operatorname{argmin}_{H_{AC}, S_{AC_1}, \dots, S_{AC_{p_0}}} e^2(H_{AC}, S_{AC_1}, \dots, S_{AC_{p_0}})$$

となる。(9) は、分散比(相関比)あるいは規準化した平均平方誤差とみなすことができる。平均平方誤差を最小にする際の規準化は、 $H_{AC}(Y) \rightarrow 0$ かつ $\sum_{p=1}^{p_0} S_{AC_p}(X_p) \rightarrow 0$ のときに (9) を最小にする変換が選ばれないようにすること、および応答関数の尺度の調整をするために行われる。

最適変換関数 ($H_{AC}^*, S_{AC_1}^*, \dots, S_{AC_{p_0}}^*$) の探索には反復手順が用いられる。初めに、確率変数 Y, X_1, \dots, X_{p_0} について既知の分布を仮定する。さらに、一般性を失うことなく、上記の理由から $E[H_{AC}^2(Y)] = 1$ とする。すなわち、この制約のもとで応答関数が推定され、平均平方誤差の最小化がはかられる。また、評価基準量(平均平方誤差)が応答関数 $H_{AC}(Y)$ と各説明変数に対応する平滑化関数 $\{S_{AC_p}(X_p)\}$ の期待値に依存しないことから、すべての関数が期待値 0 をもつと仮定される。

2.4. 加法型分散均一化変換：AVAS

ACE は、最適変換の基準として(規準化)平均平方誤差を用いている。これは、回帰解析の観点からみれば、加法モデルの応答関数が説明変数あるいは説明関数で解釈される能力、すなわち説明力である。ただし、ACE は最適変換基準を規準化することによって、応答と説明関数を区別せず対称に捉えることから、推定された変換モデルを回帰モデルとして扱うことには難がある。このとき、ACE の代役として登場したのが AVAS である。

ACE で推定される応答関数と説明関数は、それぞれ

$$\sum_{p=1}^{p_0} \hat{S}_{AC_p}(X_p) = E[H_{AC}(Y)|X_1, \dots, X_{p_0}],$$

$$\hat{H}_{AC}(Y) = E\left[\sum_{p=1}^{p_0} S_{AC_p}(X_p)|Y\right] / \left\| E\left[\sum_{p=1}^{p_0} S_{AC_p}(X_p)|Y\right] \right\| \quad (10)$$

の形式であった。Tibshirani (1988) は、応答関数の推定の手順を改良して、(10) に分散安定化の概念を導入した。すなわち、上式をそれぞれ

$$\sum_{p=1}^{p_0} \hat{S}_{AV_p}(X_p) = E[H_{AV}(Y)|X_1, \dots, X_{p_0}], \quad (11)$$

$$\text{var}[\hat{H}_{AV}(Y)|\sum_{p=1}^{p_0} S_{AV}(X_p)] = \text{const}. \quad (12)$$

の形式でおきかえる。ここに、 H_{AV} と $S_{AV_1}, \dots, S_{AV_{p_0}}$ は、それぞれ (11) と (12) を満たす応答変換関数と説明変換関数である。この推定方式を基盤にしたアルゴリズムが AVAS (Additivity and Variance Stabilization: 加法型分散均一化変換) である。AVAS は、応答変数の漸近的な分散均一化変換を与える。実際に、変換 $H_{AV}(t)$ は狭義の単調増加関数であると仮定する。ここでの基礎モデルは

$$H_{AV}^0(Y) = \sum_{p=1}^{p_0} S_{AV_p}^0(X_p) + \varepsilon_{AV}$$

である。ここに、 $H_{AV}^0(Y)$ は狭義の単調増加関数であり、 ε_{AV} は平均 0 をもち X と独立である。 H_{AV} が既知であれば、 X_1, \dots, X_{p_0} の関数としての $H_{AV}(Y)$ の期待値は

$$\sum_{p=1}^{p_0} \hat{S}_{AV_p}(X_p) = E[H_{AV}(Y)|X_1, \dots, X_{p_0}]$$

となる。(12) が応答に対する分散均一化の操作を意味する。 Y の分布族が平均 s と分散 $v(s)$ をもつとすると、 Y に関する漸近的な分散均一化変換は、関数 $h_{AV}(t)$ に対して

$$h_{AV}(t) = \int_0^t 1/\sqrt{v(s)} ds$$

で与えられる (Bartlett, 1947)。これは Taylor 展開を用いて導出され、漸近的な分散均一化変換 $h_{AV}(t)$ を $H_{AV}(Y)$ の推定に適用することによって、 $\sum_{p=1}^{p_0} S_{AV_p}(X_p)$ が与えられたときの $H_{AV}(Y)$ を見いだすことができる。 $\hat{H}_{AV}(Y)$ が分散均一性を満たすならば、 $\text{var}[\hat{H}_{AV}(Y)|\sum_{p=1}^{p_0} S_{AV_p}(X_p)]$ は一定であり、 $h_{AV}(t)$ は恒等関数に等しく、 $\hat{H}_{AV}(Y)$ は更新されない。そうでなければ、 Y の新しい変換、すなわち $h_{AV}(H_{AV}(Y))$ が u の関数として $H_{AV}(Y)$ よりも一定に近い分散をもつ。AVAS では、応答変換が与えられたときに条件つき期待値を見出すステップと、条件つき期待値が与えられたときに近似的な分散均一化変換を見出すステップを反復することで最適変換が探索される。

3. 文献事例の検討

3.1. Ricker モデルと Beverton & Holt モデル

カナダのプリティッシュ・コロムビア州に流れるスキーナ川では、28 年間にわたり、産卵期の雌鮭の数と川に戻ってくる稚魚数が記録されている。この研究の目標は、産卵期の雌鮭の数と川に戻ってくる稚魚数の分布の関係を定式化することである。各年度における産卵期の雌鮭の数を x で表し、また、川に戻ってくる稚魚数を y とする。これら二つの変数の関係を記述する Ricker (1954) のモデルは

$$f(x; \beta) = \beta_1 x \exp(-\beta_2 x)$$

である。また、別に Beverton and Holt (1957) のモデル

$$f(x; \beta) = \frac{1}{\beta_1 + \beta_2/x}, \quad \beta_1 \geq 0, \beta_2 \geq 0$$

がある。データを視察すると、これら二つのモデルは、応答の中央値に対しては適切であると考えられるが、稚魚の数の分散は一定ではなく、応答の分布が右に歪んでいる。最小二乗法によるモデルの適合結果から、説明変数の値が大きくなるにつれて残差の分散が増大する傾向にあり、これは Beverton & Holt モデルでも同様である。すなわち、変換に基づく接近法が相応しいデータと思われる。最小二乗法によって Ricker モデルをあてはめたときの残差プロットを図 1 に示す。

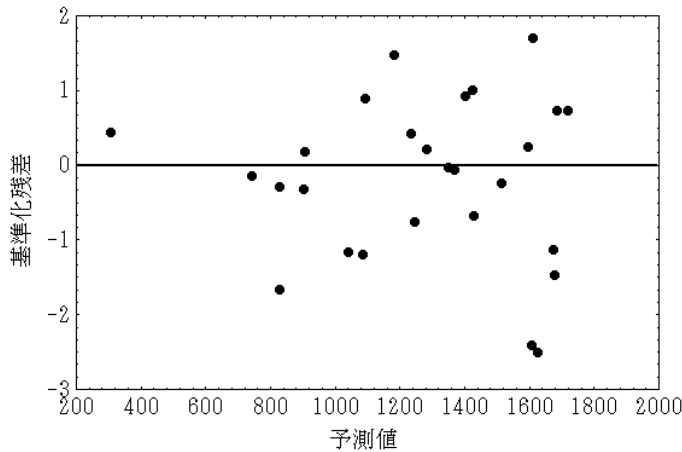


図 1. 最小二乗法により Ricker モデルをあてはめたときの残差プロット

表 1 には Ricker モデル、および表 2 には Beverton & Holt モデルに対する PTB と NTB によるパラメータの推定値、対数尤度の値 (L_p)、罰則つき対数尤度の値 (L_{pA}) を示す。NTB の場合には、変換のスプライン推定における 5 種の平滑化定数 ρ の値による結果を含めている。また、NTB における区分点 u_1, \dots, u_J の選定は、応答値とモデルの予測値の集合に対する最小値を u_1 、最大値を u_J とし、ここでは $J = 100$ とした。なお、NTB の PTB との対応関係、すなわち包含関係を示唆

表 1. Ricker モデルに対する $\hat{\beta}_1$ と $\hat{\beta}_2$

	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_1$ の標準誤差	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_2$ の標準誤差	L_P	L_{PA}
最小二乗法	3.78639	0.96136	0.00080	0.00035		
PTB	3.19451	0.83902	0.00068	0.00033	5.28152	
NTB; $\rho = 10,000$	3.11209	0.80313	0.00063	0.00033	7.94149	7.94147
NTB; $\rho = 0.1$	3.09605	0.68683	0.00063	0.00032	9.19694	8.69868
NTB; $\rho = 0.02$	2.86449	0.63369	0.00052	0.00034	10.12702	8.78235
NTB; $\rho = 0.01$	2.82136	0.49245	0.00051	0.00028	10.24184	7.86833
NTB; $\rho = 0.001$	2.70231	0.39032	0.00043	0.00026	11.79860	3.68070

表 2. Beverton & Holt モデルに対する $\hat{\beta}_1$ と $\hat{\beta}_2$

	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_1$ の標準誤差	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_2$ の標準誤差	L_P	L_{PA}
最小二乗法	0.00033	0.00015	0.23696	0.09871		
PTB	0.00029	0.00015	0.27512	0.07144	4.77308	
NTB; $\rho = 10,000$	0.00034	0.00015	0.26853	0.09709	7.71112	7.71111
NTB; $\rho = 0.1$	0.00031	0.00015	0.29792	0.09211	9.01737	8.51787
NTB; $\rho = 0.02$	0.00027	0.00015	0.32756	0.08834	10.10922	8.88342
NTB; $\rho = 0.01$	0.00026	0.00015	0.33463	0.08187	10.19377	7.92799
NTB; $\rho = 0.001$	0.00023	0.00016	0.34950	0.07842	11.74424	3.73989

するために、NTB では事前に理論モデルの両辺に対数変換を施した。 ρ が 1 より大きいところではパラメータの推定値に殆ど変化はなく、ここでは $\rho \approx \infty$ の代替値として $\rho = 10,000$ を選定した。このときのパラメータの推定値と PTB によるパラメータの推定値はほぼ同一である。なお、Ricker モデル、Beverton & Holt モデルに対する PTB でのベキ変換パラメータの推定値は、それぞれ $\hat{\lambda} = 0.3142$, $\hat{\lambda} = 0.2915$ であった。

次に、Ricker モデルに対して、罰則つき対数尤度の値と ρ の関係を見る。罰則つき対数尤度の値は、固定した ρ に対する $H_S(u)$ の「粗さ」のトレード・オフを加味した対数尤度関数の値である。 ρ を段階的に細かい刻み幅で変化させた結果、 $\rho = 0.0118$ のときに罰則つき対数尤度が最大となった ($L_{PA} = 10.24068$)。

図 2 と図 3 は、それぞれ Ricker モデルと Beverton & Holt モデルに対する数個の ρ の値に対する変換関数を示す。 $\rho = 10,000$ の変換関数が PTB と近似的に等しい。なお、Fortran プログラムによる計算では、 ρ が 0.0001 より小さくなると、変換関数 $H_S(u)$ が正しく収束しなかった。

次に、 ρ を細かく変化させたときの、変換後の絶対残差と予測値の間の Spearman 順位相関係数、および残差の正規性検定に対する Shapiro-Wilk 統計量を図 4 と図 5 に示す。図 4 から、NTB 方式において ρ が小さくなるほど、変換後の絶対残差と予測値の順位相関が小さくなる傾向にあった。また、図 5 から、 ρ が小さくなるほど、Shapiro-Wilk 統計量が小さくなる傾向にあった。

次に、ACE と AVAS をこのデータに適用し、理論モデルの結果と比較した。原尺度での予測値を得るために、ACE と AVAS の応答変換関数の逆関数を両辺に施して、スプラインに基づく補間を行うことで経験モデルの適合推測を試みた。ACE と AVAS のそれぞれの変換後の応答の説明関数による説明寄与率は、ACE で 0.72834、および AVAS で 0.51374 であり、ACE が AVAS に比べて高い回帰説明力を示した。また、残差の正規性検定に対する Shapiro-Wilk 統計量は ACE で 0.94509、および AVAS で 0.97614 であった。図 6 は、データに対して ACE と AVAS を適用した

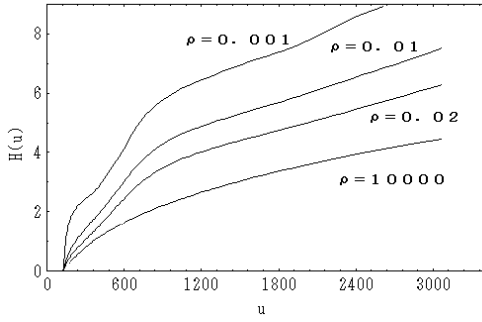


図 2. ρ に伴う NTB 変換関数の動き (Ricker モデル)

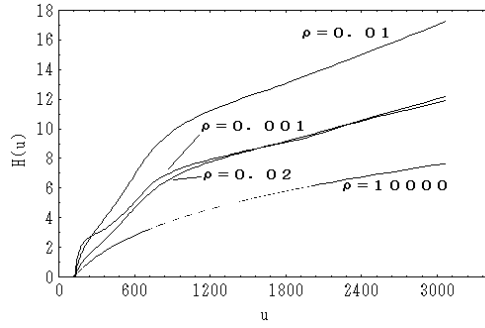


図 3. ρ に伴う NTB 変換関数の動き (Beverton & Holt モデル)

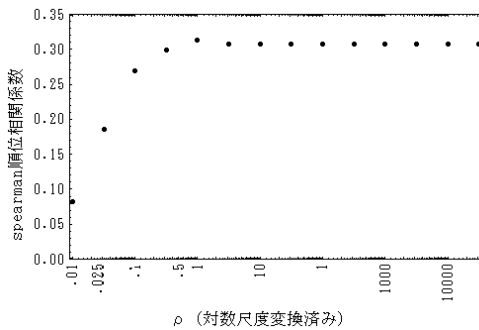


図 4. ρ と Spearman の順位相関係数 (Ricker モデル)

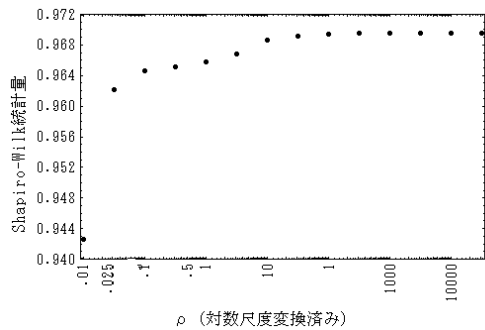


図 5. ρ と Shapiro-Wilk 統計量 (Ricker モデル)

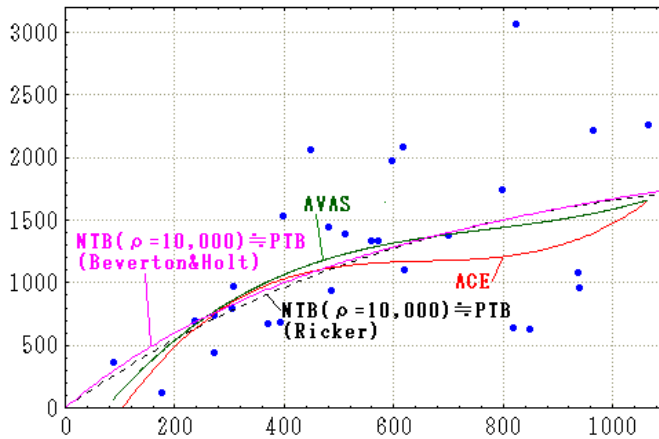


図 6. Ricker モデルと Beverton & Holt モデルの推測: ACE と AVAS の適用結果の比較

結果と, NTB($\rho = 10,000$)を適用して Ricker モデルと Beverton & Holt モデルのパラメータを推定した結果を示している. AVAS による結果は PTB による結果に近いが, これに対して ACE による結果は, 予測値が 1000 付近で増加しなくなった.

3.2. 円錐モデル

松や杉の木など、材木として用いられる樹木は、利用できる材木量によって価値が決定される。ただし、大木ともなると、その胴回りや高さは測れても、利用できる材木量、すなわち幹の体積は容易に計測できない。したがって、胴回りや高さを与えることで体積が得られるモデルが要望される。アメリカ産の松 70 本に対して、胴回りの長さ x_1 (フィート)、高さ x_2 (フィート)、体積 y (フィート³) のデータが得られている (Bruce and Schumacher, 1935)。木の幹が円錐形であることから、ここでは円錐モデル $y = \beta_1 x_1^2 x_2$ が用いられている。ここに、 β_1 はパラメータである。このモデルを最小二乗法であてはめた結果、応答の分散に不均一性がみられた。Atkinson and Rinai (2000) は、上記のモデルに対して PTB を適用している。ここでは、数個のベキ・パラメータ λ について仮説 $H_0: \beta_1 = 0$ の評点検定統計量の値が算出され、 β_1 の推定値 $\hat{\beta}_1$ の過敏性が吟味されている。最終的には、対数変換 ($\lambda = 0$) が良好な結果を与えるとして選定されている。ここでの目標は、Atkinson and Rinai (2000) の既存の結果 (対数変換) と、NTB 方式による β_1 の推定値の過敏性を比較することである。ここで、PTB と NTB の両方式で推測を行った。NTB 方式における ρ の各値に対する変換関数の視察の結果、応答 (松の体積) が 100 を超えるあたりから、異なる ρ に対して変換関数の形状が急激に変化する。これは、70 番目の観測値 $(x_1, x_2, y) = (23.4, 104, 163.5)$ の影響に依ることが明らかとなった。そこで、これらの観測値を順にとり除いて無変換での最尤推定を行い、個々の観測値がパラメータの推定値に及ぼす影響を吟味した結果、第 1 に 53 番目の観測値 $(x_1, x_2, y) = (14.3, 77, 58.9)$ 、第 2 に 70 番目の観測値が対数尤度に大きく影響することがみられた。ここでは、70 番目の観測値を削除した場合の最小二乗法、PTB、NTB の性能を吟味した。この場合のパラメータの推定値 $\hat{\beta}_1(-70)$ と、全観測値を用いたときのパラメータの推定値 $\hat{\beta}_1$ との絶対偏差を表 3 に示す。絶対偏差 $|\hat{\beta}_1(-70) - \hat{\beta}_1|$ は、 $\rho = 100$ の場合に最小であった。全体的に、 ρ を小さくすると、この絶対偏差も小さくなる傾向にあった。この結果から、PTB と比較して NTB のパラメータの推定値の安定性が示唆される。

表 3. 円錐モデルの $\hat{\beta}_1(-70)$ の挙動

	$\hat{\beta}_1(-70)$	$ \hat{\beta}_1(-70) - \hat{\beta}_1 $	$\hat{\beta}_1(-70)$ の標準誤差	$l(-70)$	$l_{PA}(-70)$
最小二乗法	0.0030099	2.7245×10^{-5}	1.62849×10^{-5}	-100.386121	
PTB	0.0030628	2.1244×10^{-5}	1.98726×10^{-5}	-89.926174	
NTB: $\rho = 10^5$	0.0030767	1.3489×10^{-5}	2.2188×10^{-5}	-63.816074	-63.560394
NTB: $\rho = 10^4$	0.0030707	2.4161×10^{-5}	2.2840×10^{-5}	-61.363755	-62.266675
NTB: $\rho = 10^3$	0.0030610	3.0438×10^{-5}	2.2805×10^{-5}	-59.158257	-60.246303
NTB: $\rho = 10^2$	0.0030262	1.4804×10^{-6}	1.6824×10^{-5}	-55.805107	-57.554684
NTB: $\rho = 10^1$	0.0030246	3.4147×10^{-6}	1.349×10^{-8}	-48.826680	-51.970798
NTB: $\rho = 1$	0.0030247	4.7827×10^{-6}	8.7127×10^{-9}	-44.007610	-47.914418
NTB: $\rho = 0.1$	0.0030252	6.3894×10^{-6}	9.5185×10^{-8}	-39.497221	-46.616845

4. シミュレーション

4.1. 動機と目標

文献事例の検討結果から、NTB に関して次の仮説が興味を惹く：

仮説 1：NTB が PTB の適切性を評価する診断ツールとなる。

仮説 2：仮説 1 のもとで、真の変換がベキ変換族に含まれないとき、NTB における平滑化定数の至適値は発散せず、ある正值をとる。

仮説 3：NTB は、PTB よりも「外れ値」に対して頑健である。

仮説 1 を検証するために、両辺に対数変換を施すことで誤差が分散一定の正規分布に従うモデルをたてる。すなわち、真の分散均一化変換が対数変換であるとする。この枠組みでモデルの適合に NTB を適用し、平滑化定数が発散する場合(近似的に PTB を意味する。この場合には近似的に対数変換である)を含む数種の平滑化定数を規定し、シミュレーションを実施する。この設定と対照的に、真の変換がベキ変換族に含まれない両辺変換モデルをたてて仮説 2 を検証する。仮説 3 の検証には、二三の外れ値を含めてデータを生成し、NTB を適用する。

NTB の性能評価の基準として、パラメータの同時平均平方誤差を用いる。これは、パラメータ・ベクトルの Mahalanobis 距離の類推である。2 変量の場合、すなわちパラメータ・ベクトルの真値 $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ に対する同時平均平方誤差は、パラメータ推定値 $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$ の分散共分散行列を Σ とするとき、次のようになる。すなわち

$$[\beta - E(\hat{\beta})]^T \Sigma^{-1} [\beta - E(\hat{\beta})]. \quad (13)$$

ただし、仮説 1 と仮説 2 の検証では、モデルの両辺に既知の変換を施していることから、真の変換関数と、NTB によって推定される変換関数の上限ノルムの期待値も評価の基準に用いる。とくに、同時平均平方誤差と上限ノルムによって NTB の性能を双方向から評価し、二つの結果を比較する。

4.2. デザイン

仮説 1 の場合では、モデルとして

$$f(x; \beta) = x\beta_1 \exp(-\beta_2 x) \quad (14)$$

を想定し、ノンパラメトリック両辺変換

$$H_S(y) = H_S\{f(x; \beta)\} + \varepsilon_S \quad (15)$$

を考察する。ここに、 ε_S は正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従うとする。モデル (15) に対して、次の変換関数

$$H_1(u) = \log(u) \quad (16)$$

を与える。モデル (15) における真の変換関数は対数変換であり、これはベキ変換族に含まれる。すなわち、NTB 方式では平滑化定数の真値は $\rho \rightarrow \infty$ となる。(15) と (16) より得られるモデル

$$Y = [\beta_1 x \exp(-\beta_2 x)] \exp(\varepsilon_S)$$

をシミュレーション・モデルとする。パラメータ β_1, β_2 の真値はそれぞれ $\beta_1 = 3, \beta_2 = 0.0008$ とおいた。これは、3.1 節の事例検討の推定結果に準じて定めた。さらに、説明変数 x の観測許容域を $x \in [0, 1,000]$ とした。また、結果に影響を与える因子として、ここでは標本サイズを 3 水準、誤差分散を 3 水準、NTB 方式における平滑化定数を 3 水準に規定した。

仮説 2 の場合にも、(14) を基礎モデルとする。真の変換関数がベキ変換族に含まれないモデルを得るために、次の関数

$$H_2(u) = \log(u/\sqrt{X}) \quad (17)$$

を真の変換関数とする。NTB 方式の枠組みでは、ある ρ_0 が存在して $H_S(u; \rho_0) = H_2(u)$ となる。(14) と (17) から、モデル

$$Y = [\beta_1 x \exp(-\beta_2 x)] \exp(\sqrt{x} \varepsilon_S)$$

をシミュレーションで用いた。仮説 1 と同様に、パラメータの真値を $\beta_1 = 3, \beta_2 = 0.0008$ とおいた。さらに、説明変数 x の観測許容域を $x \in [0, 1,000]$ とした。また、結果に影響を与える因子として、ここでは標本サイズを 3 水準、誤差分散を 3 水準とした。さらに、NTB 方式では、平滑化定数の真値が未知であるために、その暫定値を 5 水準に規定した。

仮説 3 の場合にも、モデル (14) を用いる。外れ値を含む場合として、誤差の分布を 2 個の正規分布からなる混合分布とし、そこからデータを生成した。このために、分散関数を $V(X) = f(X)$ とおき、分散の異なる 2 種の正規分布 $N_1(0, V(X))$ と $N(0, aV(X))$ を設定した。ここに a は定数である。以上より、定数 a, α に対して、誤差分布が $\alpha N_1(0, V(X)) + (1 - \alpha)N(0, aV(X))$ に従うとする。 α と a を設定して、外れ値の大きさと個数を定めた。ここでは、4.2 節と同様に、説明変数 x の観測許容域を $x \in [0, 1,000]$ とした。結果に影響を与える因子として、標本サイズを 3 水準、NTB の平滑化定数を 3 水準に設定した。さらに、 α を固定したうえで、 a の値を 4 水準に設定した。

4.3. データの生成

仮説 1 の検証では、先述した因子のすべての組み合わせ ($3 \times 3 \times 3 = 27$ 通り) について、 $[0, 1,000]$ で定義された一様分布に従う一様乱数(説明変数)と、平均 0 と分散 σ^2 の正規分布に従うサイズ N の正規乱数を発生させて、これを 1,000 回にわたって反復した。標本サイズ N の設定は、誤差分散の不均一性に着目してデータを $0 < X < 500$ (A 群) と $500 < X < 1,000$ (B 群) の 2 群に分割し、等分散性の成立に関する Bartlett 検定を行った。すなわち、A 群と B 群の分散 σ_A^2 と σ_B^2 について、帰無仮説 $H_0: \sigma_A^2 = \sigma_B^2$ を対立仮説 $H_1: \sigma_A^2 \neq \sigma_B^2$ に対して検定するとして、有意水準 0.05、誤差分散を $\sigma^2 = 0.05$ に固定した場合に、 $N = 29$ で検出力 0.80、 $N = 41$ で検出力 0.90、 $N = 63$ で検出力 0.95 が保証される。そこで「意味のある実験」として標本サイズを $N = 29, 41, 63$ の 3 水準とし、誤差分散を $\sigma^2 = 0.05, 0.075, 0.1$ の 3 水準に設定した。平滑化定数 ρ については、実際に二三のデータ集合に対して罰則つき尤度関数の罰則値を算出し、罰則値が 0 となった $\rho = 1,000,000$ を $\rho = \infty$ と想定し、なるべく等間隔で罰則値が増す形で $\rho = 0.01, \rho = 0.0001$ を選定した。

このように生成したデータに対して NTB でモデル (13) をあてはめ、パラメータの推定値ベクトル $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ と (β_1, β_2) の間の Maharanobis 距離に基づく平均平方誤差の推定値(以下、 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ の同時 MSE (Mean Squared Error) と呼ぶ) と、NTB の変換関数と真の変換関数との上限ノルム

$E[\sup|H_N - \hat{H}_N|]$ (以下, 上限ノルムと呼ぶ) をそれぞれ算出した. さらに, 標本サイズ N , 分散 σ^2 , 平滑化定数 ρ の変動因子が同時 MSE 推定値, あるいは上限ノルムに及ぼす影響を (3 元分類) 分散分析により評価した. ρ の第 i 水準 ($i = 1, \dots, 6$), 標本サイズの第 j 水準 ($j = 1, 2, 3$), 誤差分散の第 k 水準 ($k = 1, 2, 3$) に対する同時 MSE 推定値と $E[\sup|H_N - \hat{H}_N|]$ の値をそれぞれ M_{ijk}, N_{ijk} とするとき, 分散分析モデルは

$$M_{ijk} = \mu + \mu_{1i} + \mu_{2j} + \mu_{3k} + (\mu_1\mu_2)_{ij} + (\mu_2\mu_3)_{jk} + (\mu_3\mu_1)_{ki} + \varepsilon_{ijk},$$

$$N_{ijk} = \nu + \nu_{1i} + \nu_{2j} + \nu_{3k} + (\nu_1\nu_2)_{ij} + (\nu_2\nu_3)_{jk} + (\nu_3\nu_1)_{ki} + \varepsilon_{ijk}$$

と表される ($i = 1, \dots, 6, j = 1, 2, 3, k = 1, 2, 3$). ここに, $\mu_{1i}, \mu_{2j}, \mu_{3k}$ はそれぞれ第 i 水準, 第 j 水準, 第 k 水準の主効果, および $(\mu_1\mu_2)_{ij}, (\mu_2\mu_3)_{jk}, (\mu_3\mu_1)_{ki}$ はそれぞれ $\rho \times$ 標本サイズ, 標本サイズ \times 誤差分散, 誤差分散 $\times \rho$ 交互作用である. $\nu_{1i}, \nu_{2j}, \nu_{3k}, (\nu_1\nu_2)_{ij}, (\nu_2\nu_3)_{jk}, (\nu_3\nu_1)_{ki}$ についても同様である.

次に仮説 2 の検証について, 4.2 節に規定した因子のすべての組み合わせ ($3 \times 3 \times 5 = 45$ 通り) について, 一様乱数と正規乱数を発生させて, これを 500 回にわたって反復した. 等分散性に関する Bartlett 検定で有意水準を 0.05, 誤差分散 σ^2 を 0.05 に固定した場合に, $N = 26$ で検出力 0.80, $N = 49$ で検出力 0.90, $N = 64$ で検出力 0.95 となることから, 標本サイズを $N = 26, 49, 64$ の 3 水準とし, 誤差分散を $\sigma^2 = 0.05, 0.075, 0.1$ の 3 水準に設定した. また, 平滑化定数の設定は仮説 1 の方法に準じ, ここでは $\rho = \infty$ が真のモデルとならないことから, ρ の至適値を細かくみるために $\rho = \infty(1,000,000), 10, 1, 0.1, 0.01$ の 5 水準を設定した. さらに, 仮説 1 と同様の形式で, ρ を 5 水準に増して, パラメータの推定値 ($\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$) の挙動を同時 MSE 推定値と $E[\sup|H_5 - \hat{H}_5|]$ で評価した.

次に仮説 3 の検証について, 4.2 節で規定した因子のすべての組み合わせ ($4 \times 3 \times 3 = 36$ 通り) について, 仮説 1 の場合と同様に一様乱数と正規乱数を発生させて, これを 500 回にわたって反復した. 等分散性に関する Bartlett 検定で有意水準 0.05 とするとき, 分散不均一性が有意に検出できる最小標本サイズを次のように求めた. すなわち, $\alpha = 0.95, a = 1$ とおいた場合に $N = 48$ で検出力 0.80, $N = 55$ で検出力 0.90, $N = 81$ で検出力 0.95 となる. そこで, 計算を容易にするために標本サイズを $N = 50, 60, 80$ の 3 水準に設定した. さらに, 残差が有意に不均一となる状況を意図して, a の値を $a = 1, 3, 5, 7$ の 4 水準に設定した. すなわち, $a = 1$ は外れ値が発生しない場合であり, 「対照」の役割をはたす. $a = 3$ のとき, $0.05N$ 個の外れ値は標準偏差の 3 倍 (生起確率 0.3%) の位置におかれる. また, 平滑化定数 ρ については, $\rho = 1,000,000$ を $\rho = \infty$ とおき, なるべく等間隔で罰則値が増す形で $\rho = 0.1, \rho = 0.001$ を設定した. さらに, 仮説 1 の場合と同様の分散分析を行った. ただし, 分散分析モデルでの誤差分散の水準の代替として $a = 1, 3, 5, 7$ をおいた. ここでは, NTB によってモデル (14) を適合させるときのパラメータ ($\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$) の推定値の安定性を評価するために, ($\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$) の同時 MSE 推定値を用いた.

4.4. シミュレーション結果

上記の設定のもとで 1,000 回のシミュレーションを行った結果を以下に示す. 表 4 はパラメータの推定値 ($\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$) の同時 MSE 推定値に関する分散分析の結果を示す. 表 5 は変換関数の上限ノルムに関する分散分析の結果を示している. また, 仮説 2 に対するパラメータの推定値 ($\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$) の同時 MSE 推定値に関する分散分析の結果を表 6 に示す.

表 4. 仮説 1 に対する分散分析：同時 MSE 推定値による評価

因子	自由度	F 比	p 値	寄与率(%)
ρ	2	4.515	0.0487	0.17
N	2	698.382	near0	26.86
σ^2	2	1798.018	near0	69.18
$\rho \times N$	4	3.819	0.0505	0.15
$\rho \times \sigma^2$	4	6.183	0.0144	0.23
$N \times \sigma^2$	4	88.275	near0	3.39

表 5. 仮説 1 に対する分散分析：変換関数の上限ノルムによる評価

因子	自由度	F 比	p 値	寄与率(%)
ρ	2	647.547	near0	56.63
N	2	13.994	near0	1.22
σ^2	2	13.959	near0	1.22
$\rho \times N$	4	33.726	near0	2.95
$\rho \times \sigma^2$	4	0.787	near0	0.07
$N \times \sigma^2$	4	433.340	0.565	37.90

表 6. 仮説 2 に対する分散分析：同時 MSE 推定値による評価

因子	自由度	F 比	p 値	寄与率(%)
ρ	4	2.372	0.0959	38.97
N	2	59.919	near0	56.55
σ^2	2	41.282	near0	0.449
$\rho \times N$	4	1.026	0.4563	2.239
$\rho \times \sigma^2$	4	0.2784	0.5585	0.823
$N \times \sigma^2$	4	2.3722	0.0959	0.968

4.5. 解釈と知見

仮説 1 の場合に、表 4 の $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ の同時 MSE 推定値の分散分析から、 $\rho \times$ 標本サイズ交互作用を除くすべての因子が水準 0.05 で有意であった。とくに、同時 MSE 推定値の全変動に占める誤差分散と標本サイズの寄与が高く、寄与率はそれぞれ 79.54%と 17.58%であった。表 5 の上限ノルムによる分散分析の結果から、 ρ の値、標本サイズ、誤差分散、 $\rho \times$ 標本サイズ交互作用、 $\rho \times$ 誤差分散交互作用が水準 0.05 で有意であった。 ρ が同時 MSE 推定値と関連が薄いことは、 ρ の値にかかわらず NTB の結果が(近似的な)PTB の結果に近いことを示唆している。表 5 から、 ρ が上限ノルムに大きく関与する結果は、標本サイズと誤差分散の大きさの如何にかかわらず、 $\rho \approx \infty$ での同時 MSE 推定値が最小となったことと併せて、 $\rho \approx \infty$ のときの NTB の変換関数が対数変換関数に最も近いことを示唆する。図 7 は、誤差分散 σ^2 の各水準の値に対する同時 MSE 推定値の平均値プロットを示す。箱の幅は 95%信頼区間を示している。 $\sigma^2 = 0.075, \sigma^2 = 0.1$ の場合には、標本サイズが小さいとき ($N = 29$) に平滑化定数 ρ が小さいほど同時 MSE 推定値が小さくなる。標本サイズ $N = 63$ の場合には、平滑化定数の如何にかかわらず同時 MSE 推定値とその 95% 信頼区間は変動しない。図 8 は、誤差分散 σ^2 の各水準の値に対する上限ノルムの平均値プロットを示す。 $\rho = 0.0001$ の場合に上限ノルムが相当に大きい値をとる。ただし、標本サイズが大きくなるほどその傾向は緩和される。とくに、誤差分散 $\sigma^2 = 0.1$ の場合には、 $N = 29$ のとき

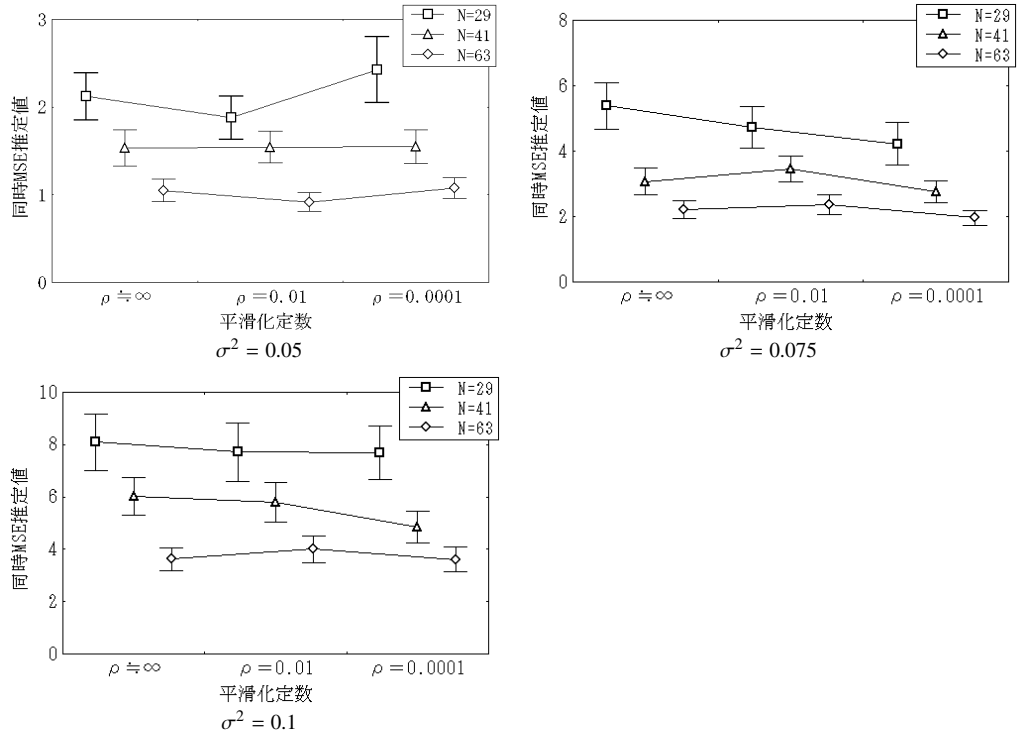


図 7. 仮説 1 に対する $\sigma^2 = 0.05, 0.075, 0.1$ の場合の同時 MSE 推定値の平均値プロット

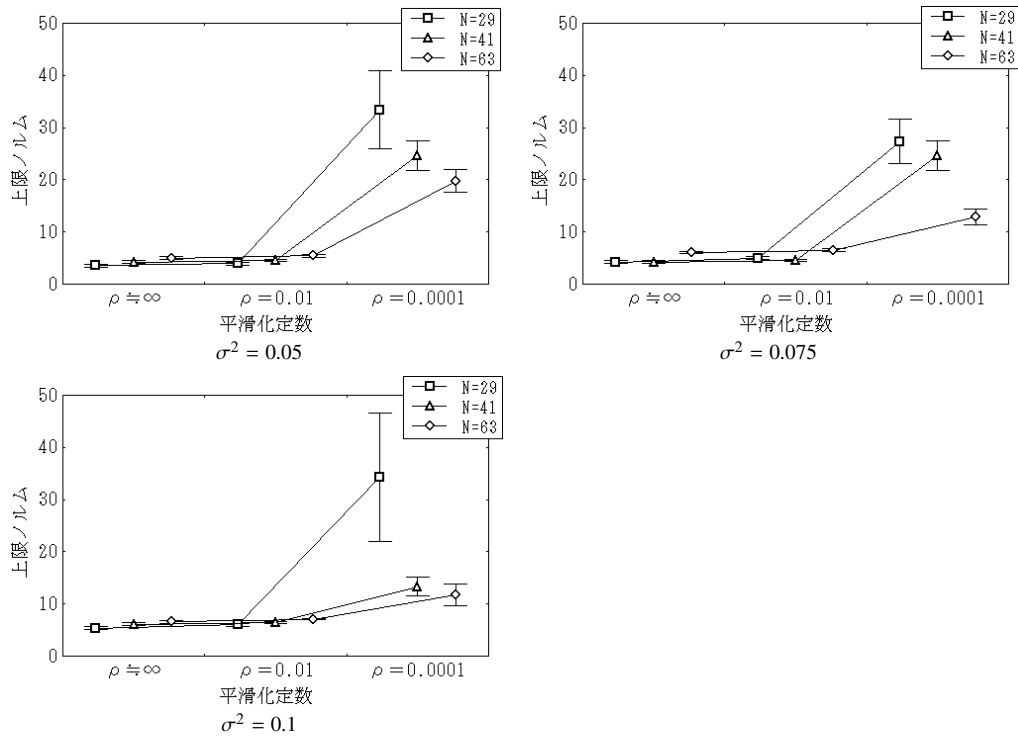


図 8. 仮説 1 に対する $\sigma^2 = 0.05, 0.075, 0.1$ の場合の上限ノルムの平均値プロット

に $\rho = 0.0001$ の場合の上限ノルムは大きい値をとり、95%信頼区間も大きい、 $N = 41, N = 63$ の場合には上限ノルムはそれほど増加しない。これは、標本サイズが大きくなると NTB の変換関数の「粗さ」が緩和されることを示している。また、どの因子の水準の組み合わせにでも $\rho \approx \infty$ の場合の上限ノルムが最小となったことは、近似的な PTB が真の変換関数(対数変換)を捉えることを示している。

仮説 2 の場合に、表 6 の $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ の同時 MSE 推定値の分散分析から、 ρ の値、標本サイズ、 $\rho \times$ 誤差分散交互作用が水準 0.05 で有意であった。同時 MSE 推定値の全変動に占める ρ の値と標本サイズの寄与が高く、寄与率はそれぞれ 38.97%と 56.55%であった。表 7 の上限ノルムによる分散分析の結果、 ρ 、標本サイズ、 $\rho \times$ 誤差分散交互作用が水準 0.05 で有意であった。上限ノルムの値の全変動に占める誤差分散の寄与が高く(寄与率 85.88%)、誤差分散だけでほぼ説明がついている。仮説 1 の場合と比較して、同時 MSE 推定値の動きに ρ が大きく関与している。すなわち、NTB の結果は ρ の値で変化する。仮説 2 のシミュレーション結果の一例として、表 9 に $N = 26, \sigma^2 = 0.075$ の場合の数値結果を示す。 $\rho = 0.1, \rho = 1$ のときにそれぞれ上限ノルムの期待値と同時 MSE 推定値が最も小さくなっていることから、ここでの NTB の変換関数が真の変換に近いことが考えられる。

表 7. 仮説 2 に対する分散分析：変換関数の上限ノルムによる評価

因子	自由度	F 比	p 値	寄与率(%)
ρ	4	71.877	near0	1.67
N	2	3.9518	0.0402	4.72
σ^2	2	1.3986	0.2755	85.88
$\rho \times N$	4	0.3791	0.9164	0.60
$\rho \times \sigma^2$	4	5.5811	0.0017	6.67
$N \times \sigma^2$	4	0.5054	0.7324	0.45

表 8. 仮説 3 に対する分散分析：同時 MSE 推定値による評価

因子	自由度	F 比	p 値	寄与率(%)
ρ	2	32.70	near0	5.41
N	2	208.2	near0	34.2
a	2	326.3	near0	53.6
$\rho \times N$	4	1.596	0.2381	0.38
$\rho \times a$	4	6.909	0.0002	1.16
$N \times a$	4	32.90	near0	5.49

表 9. 仮説 2 に対するシミュレーション： $N = 26, \sigma^2 = 0.075$

ρ	0.01000	0.10000	1.00000	10.00000	∞
$E\{\hat{\beta}_1\}$	2.98360	2.95524	2.97719	2.98868	2.99888
$E\{\hat{\beta}_2\}$	0.00080	0.00080	0.00082	0.00082	0.00083
$M\hat{S}E(\hat{\beta}_1)$	0.07253	0.07203	0.06643	0.07490	0.07736
$M\hat{S}E(\hat{\beta}_2)$	2.4940×10^{-8}	2.4638×10^{-8}	2.3793×10^{-8}	2.7074×10^{-8}	2.7782×10^{-8}
$\hat{\beta}_1$ の規準化 MSE	0.65098	0.64647	0.59618	0.67223	0.69430
$\hat{\beta}_2$ の規準化 MSE	1.09940	1.08610	1.04883	1.19348	1.22469
$(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ の規準化 MSE	3.30492	3.22734	3.06770	3.48425	3.59704
$E[\sup H_N - \hat{H}_N]$	9.4876	8.9985	9.0142	9.0538	9.0702

仮説3の場合に、表6の $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ の同時MSE推定値による分散分析から、 $\rho \times$ 標本サイズ交互作用を除くすべての因子が水準0.05で有意であった。とくに、同時MSE推定値の全変動に占める a と標本サイズ N の寄与が高く、寄与率はそれぞれ53.6%と34.2%であった。この結果は、大きい外れ値が出現するほど同時MSE推定値は大きくなること、また標本サイズが大きいほど同時MSE推定値が小さくなることを示唆する。平滑化定数 ρ と $a \times N$ 交互作用が同時MSE推定値の変動に寄与したのは、ある標本サイズでは ρ によって同時MSE推定値が異なることを示唆する。平滑化定数 ρ と標本サイズ N の関係の詳細をみるために、同時MSE推定値と各因子の関係を視察する。図9、図10、図11、図12は、それぞれ $a=1$ (外れ値を含まない)、 $a=3$ 、 $a=5$ 、 $a=7$ のときの平滑化定数、標本サイズの各値に対する同時MSE推定値の平均値プロットを示す。箱は同時MSE推定値の95%信頼区間を示す。図9では、標本サイズ50のときに $\rho=0.1$ での同時MSE推定値の値が $\rho=0.001$ での同時MSE推定値よりも小さくなっている。これに対して、図11、図12は、 ρ が小さくなるに従って同時MSE推定値が小さくなることを示唆する。すなわち、外れ値が大きくなるほど、平滑化定数が小さい場合のNTBが同時MSE推定値を小さくする。また、箱の大きさに注目すると、 $\rho=0.001$ の場合には、外れ値が大きくなったとしても箱の大きさが変化しない。逆に、 $\rho \approx \infty$ の場合には、外れ値が大きくなるほど同時MSE推定値の95%信頼区間は大きくなる。図13は、平滑化定数 ρ 、外れ値の係数 a 、標本サイズ N と同時MSE推定値の関係を示す。標本サイズ N

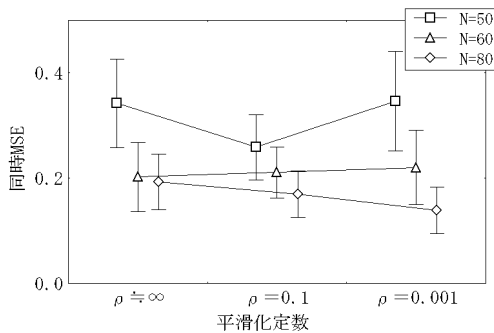


図9. 仮説3に対する同時MSE推定値の平均値プロット： $a=1$

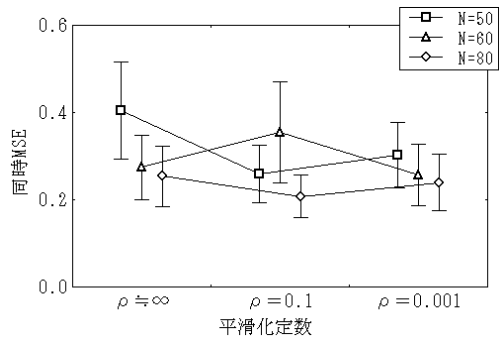


図10. 仮説3に対する同時MSE推定値の平均値プロット： $a=3$

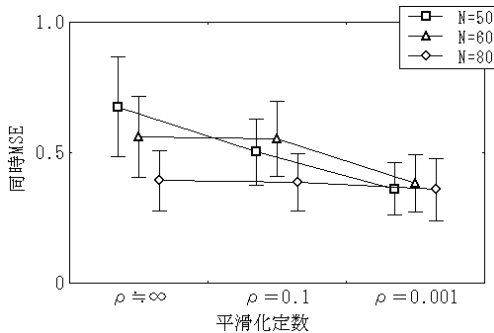


図11. 仮説3に対する同時MSE推定値の平均値プロット： $a=5$

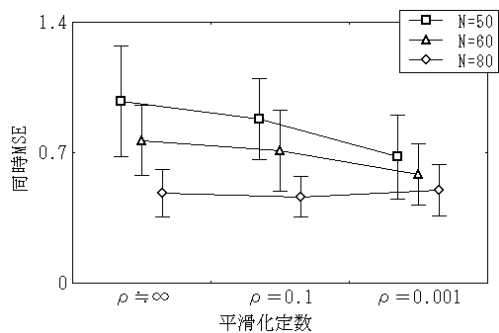


図12. 仮説3に対する同時MSE推定値の平均値プロット： $a=7$

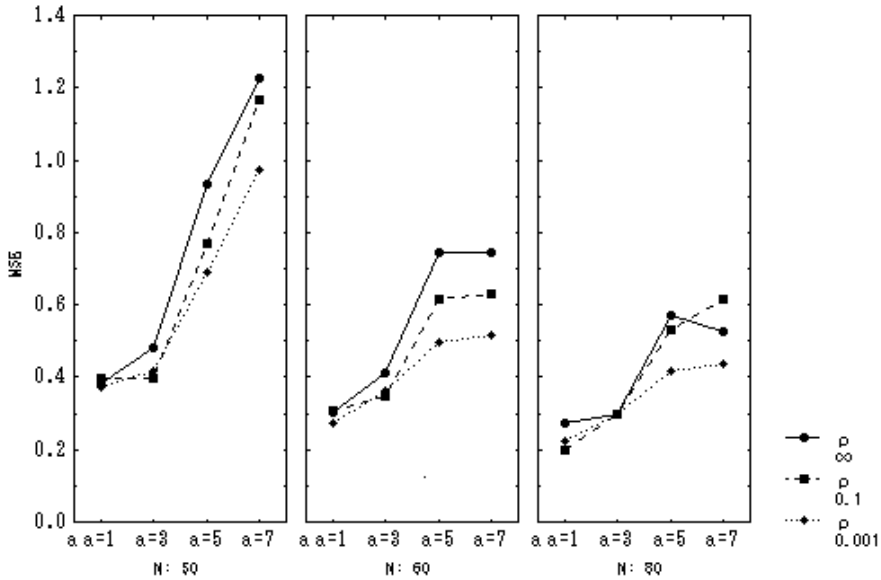


図 13. 仮説 3 に対する同時 MSE 推定値と N, ρ, a

が大きくなるにつれて、外れ値を大きくしたときの同時 MSE 推定値の増加率が減少している。とくに、推定値が最も真値から外れると予想される $N = 50, a = 7$ の場合では、 $\rho \approx \infty, \rho = 0.1$ の場合に比較して、 $\rho = 0.001$ の場合の同時 MSE 推定値が相当に小さかった。

5. おわりに

本稿では、理論モデルと経験モデルの適合推測で組上にあげられていた幾つかの難点について検討を試みた。とくに、理論モデルの両辺変換で従来のベキ変換接近法 PTB の適用と、データに過敏なその適合結果を緩和するために、新たにノンパラメトリック変換 NTB に基づく接近法を提示し、その適合推測の方法を考察した。円錐モデルの検討では、外れ値を除去した「浄化」データに対して NTB を適用した結果から、パラメータの推定値の安定性が示唆された。また、スキーナ川の鮭データに対して ACE と AVAS を適用し、理論モデルとの対比を行い、Beverton and Holt (1957) が主張した「予測値の頭打ち」を示唆した。予測値(川に戻ってくる鮭の数)が増加しなくなるという結果は、放流する稚魚の数の決定を左右する解釈を与えた。文献事例の検討と数値検証の結果を要約し、主に NTB が PTB の診断ツールであること、また NTB によるパラメータ推定値の安定性に関する仮説を設計した。これらの仮説の検証を意図してシミュレーションを行った。とくに、モデルに対して「真の両辺変換関数」を設定し、モデル・パラメータの真値からの平均平方誤差だけでなく真の変換と NTB の変換関数との関数距離の上限を評価においた。結果として、NTB は平滑化定数が発散する場合に近似的に PTB に等しくなることを示した。さらに、PTB は真の変換がベキ変換族に含まれない状況でも良好に振舞うことが示唆され、文献事例の適用での PTB の汎用性が裏づけられた。ただし、小標本では平均平方誤差と、真の変換と NTB の変換関数との関数距離の上限の評価によって NTB が PTB と比べて良好な結果を与えたことから、真の

変換がベキ変換族に含まれない場合に NTB が有用であることが考えられる。また、外れ値を考慮に入れたシミュレーションを遂行し、標本サイズと外れ値の大きさと平滑化定数の関連をみた。この結果、大きい外れ値が発生する状況では、とくに小標本の場合に平滑化定数の減少に伴って平均平方誤差が減少した。このことから、1 個の仮説の限られた検証であるが、小標本や外れ値を含むといった不完全データに対する NTB の有用性が示唆された。

今後の課題として、NTB において誤差の最適設計に基づく平滑化定数の選定法を確立することが挙げられる。本稿では平滑化定数の幾つかの値とそのときの残差診断の結果を吟味するに留めており、今後、変換後の誤差の正規性と分散均一性の両方を良好に満たす平滑化定数の選定法を構築する必要がある。また、本研究でとりあげた NTB は、モデルの両辺に対して同一のノンパラメトリック変換を施す接近法であることから、この類推で応答のみ、もしくは説明変数のみに対してノンパラメトリック変換を施す手法を開発し、NTB あるいは応答ベキ変換接近法との対比をはかることが考えられる。また、NTB は、次の三つの理由から、セミパラメトリック接近法と考えられる：①NTB は既知の説明関数(パラメトリック関数)に対してのみ適用される。②モデルの推測では、パラメータの推定と平滑化法に基づく変換関数の推定が交互に遂行される。③NTB の変換関数は、ベキ変換関数を基調としている。NTB の拡張形として、①と②の性質を活かす形で ACE や AVAS のような経験モデルの推測法に対して既知のパラメトリック関数(理論モデル)を導入し、セミパラメトリック ACE やセミパラメトリック AVAS を構築することが必要である。

謝 辞 本稿の構成につきまして、丁寧な査読を通して貴重なご指摘・ご指導を賜った審査員と編集委員の諸先生方に心より謝意を表します。

参 考 文 献

- Atkinson, A. and Riani, M. (2000): *Robust Diagnostic Regression Analysis*. Springer.
- Bartlett, M.S. (1937): Properties of sufficiency and statistical tests. *Proc. Roy. Soc.* **A160**, 268–282.
- Bartlett, M.S. (1947): The use of transformations. *Biometrics* **3**, 39–52.
- Beverton, R.J. and Holt, S.J. (1957): *On the Dynamics of Exploited Fish Populations*. Her Majesty's Stationery Office, London.
- Box, G.E.P. and Cox, D.R. (1964): An analysis of transformations. *J.R. Stat. Soc.* **B26**, 211–252.
- Breiman, L. and Friedman, J.H. (1985): Estimating optimal transformations for multiple regression and correlation (with discussion). *J. Amer. Statist. Assoc.* **80**, 580–619.
- Bruce, D. and Schumacher, F.X. (1935): *Forest Mensuration*. New York: McGraw-Hill.
- Carroll, R.J. and Ruppert, D. (1984): Power transformation when fitting theoretical models to data. *J. Amer. Statist. Assoc.* **79**, 321–328.
- Carroll, R.J. and Ruppert, D. (1988): *Transformation and Weighting in Regression*. Chapman and Hall.
- Gnanadesikan, R. (1977): *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*. John Wiley & Sons [丘本正・磯貝恭史 (1979). 統計的多変量データ解析. 日科技連出版社].
- Goto, M. (1979): Choice of shrinkage factors in the generalized ridge regression. *Math. Japonica*. **24**, 153–173.
- Goto, M. and Matsubara, Y. (1979): Evaluation of ordinary ridge regression. *Bull. Math. Statist.* **19** (1-2), 153–173.
- Goto, M., Matsubara, Y. and Tsuchiya, Y. (1983): Power-normal distribution and its applications. *Rep. Stat. Appl. Res. JUSE*, **30** (3), 8–28.
- Goto, M., Inoue, T., and Tsuchiya, Y. (1987): Double power-transformation and its performances: An extensive version of Box-Cox transformation. *J. Japan. Statist. Soc.* **17** (2), 149–163.
- Goto, M. (1992): Extensive views of power transformation: Some recent developments. *Invited paper at Honolulu Conference on Computational Statistics as a memorial of the fifth anniversary of JSCS, JAISMS*, December 1–5, 1992.
- Goto, M. (1995): Double power transformations and their applications. *Invited paper of International Conference on Statis-*

- tical Computing for Quality and Productivity Improvement*, Seoul, August, 17–19.
- Goto, M., Isomura, T., and Hamasaki, T. (2000): Guinea pigs in statistical science. *Proceedings of the Tenth Japan and Korea Joint Conference of Statistics 2000 (Invited paper)*, 265–285, December 4–5. B-Con Plaza, Beppu, Japan.
- 後藤昌司・田中浩光 (1984): 医薬分野における二三のモデル：統計的接近法. *オペレーションズ・リサーチ*, 29 (8), 501–506.
- 後藤昌司 (1986): 統計的データ解析の過程. *行動計量学*, 13 (2), 48–63.
- 後藤昌司・山本成志・井上俊昭 (1991): ベキ正規分布におけるパラメータの推定：推定量の漸近挙動について. *計算機統計学*, 4 (1), 45–60.
- 濱崎俊光・後藤昌司 (1996): ベキ変換の変換尺度の不変調整. *計算機統計学*, 9 (1), 37–53.
- Nychka, D. and Ruppert, D. (1995): Nonparametric transformations for both sides of a regression model. *J.R. Statist. Soc. B* **57** (3), 519–532.
- O’Sullivan, F., Yandell, B. and Raynor, W.J. (1986): Automatic smoothing of regression functions in generalized linear models. *J. Am. Statist. Ass.* **81**, 96–104.
- Ricker, W.E. (1954): Stock and recruitment. *J. Fish. Res. Bd Can.* **32**, 559–623.
- 坂本 亘 (1999): ノンパラメトリック回帰の諸法：平滑化スプラインによる非線形構造の探索. 大分統計談話会第 20 回大会・発表抄録, 1999-10-1.
- Tibshirani, R. (1988): Estimating transformations for regression via additivity and variance stabilization. *J. Am. Statist. Ass.* **83**, 394–405.
- 地村ゆり・後藤昌司 (1997): 変換に基づく非線形モデルの評価過程. 大阪大学 大学院基礎工学研究科 情報数理系専攻 統計数理講座 修士論文.

(2002 年 12 月 26 日受付 2003 年 9 月 22 日最終修正 12 月 17 日採択)

著者連絡先：〒 174-8612 東京都板橋区蓮根 3-17-1
山之内製薬株式会社 開発本部 統計解析部
臨床統計担当 伊藤雅憲
E-mail : ito.masanori@yamanouchi.co.jp
〒 560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3
大阪大学 大学院基礎工学研究科 数理科学領域
後藤昌司
E-mail : gotoo@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

Various Types of Nonparametric Transformation and Its Diagnosis

Masanori Ito¹ and Masashi Goto²

¹ Biometrics Department, Drug Development Division,
Yamanouchi Pharmaceutical Co., Ltd.,

17-1, Hasune 3-chome, Itabashi-ku, Tokyo 174-8612, Japan

² Division of Statistical Science, Graduate School of Engineering Sciences,
Osaka University,

1-3, Machikaneyama-cho, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan

Abstract

In this paper, we introduce a Nonparametric Transform-Both-sides (NTB) approach as an alternative to the Power Transform-Both-sides (PTB) approach to inference for theoretical models and propose a method of parameter estimation by expressing the function transformation as a cubic spline curve. From the investigation of two examples, we suggest that the NTB could be an index for the validation of the PTB and is more robust than PTB to outliers. Furthermore, we verify these results by three simulation experiments. In the methodology for fitting the empirical model, we introduce Alternating Conditional Expectation (ACE) and Additivity VAriance Stabilization (AVAS) as two nonparametric transformation approaches that optimize the relationship between response and explanatory variables. We examine the validity of the theoretical models by fitting empirical models via ACE and AVAS to the example data. Both method, ACE and AVAS, improve the normality and homoscedasticity of the error.

Key words: PTB, NTB, ACE, AVAS, transformation, normality, homoscedasticity

E-mail address: ito.masanori@yamanouchi.co.jp

Received December 26, 2002; Received in final form September 22, 2003; Accepted December 17, 2003.