

マルコフ連鎖モンテカルロ法による Box-Behnken 計画の解析と 中心対称配置

神戸大学・理 青木 敏
大阪大学・情報 日比 孝之
関西学院大学・理工 大杉 英史

本講演では、複数の多水準因子の一部実施計画により得られる頻度データの分析手法について、最近得られた結果 ([2]) を報告する。いま、複数の多水準因子の一部実施計画の各点において、非負の整数値であるような繰り返しのない観測値が得られているとする。この観測値の母集団にポアソン分布を仮定し、ポアソン分布の期待値母数に対する線形対数モデルを考える。この設定において、対数線形モデルの当てはまりを、適当な検定統計量による条件付検定の p 値により判断し、さらにその p 値をマルコフ連鎖モンテカルロ法により数値計算するという接近法は、最初 [4] により分割表解析の枠組みで提案され、実験計画法の枠組みでは [3] により定式化された。マルコフ連鎖モンテカルロ法の実行のための重要なステップとして、局外母数に対する十分統計量が観測値と一致するような標本空間上に、既約なマルコフ連鎖を構成するための推移基底（マルコフ基底）の計算がある。マルコフ基底が以下のように代数的に特徴付けられることを示したのが、[4] の主結果である。つまり、実験回数を k 、モデル行列を M とするとき、体 K 上の多項式環 $K[x_1, \dots, x_k]$ を考え、モデル行列 M の転置の整数核の元 $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_k)' \in \text{Ker}_{\mathbb{Z}} M'$ に対する二項式 $f_{\mathbf{b}} = \prod_{b_i > 0} x_i^{b_i} - \prod_{b_i < 0} x_i^{-b_i} \in K[x_1, \dots, x_k]$ を定義する。この二項式全体で生成されるイデアル $I_{M'} = \langle \{f_{\mathbf{b}} \mid \mathbf{b} \in \text{Ker}_{\mathbb{Z}} M'\} \rangle$ は、配置 M' に対するトーリックイデアルとよばれ、 $I_{M'}$ の任意の生成系 $\{f_{\mathbf{b}^{(1)}}, \dots, f_{\mathbf{b}^{(s)}}\}$ に対し、 $\{\mathbf{b}^{(1)}, \dots, \mathbf{b}^{(s)}\}$ がマルコフ基底をなす。

興味のあるモデル行列 M に対して、対応するトーリックイデアル $I_{M'}$ の生成系が得られれば、マルコフ連鎖モンテカルロ法によりモデルの当てはまりの評価ができる。逆に、性質が既知のトーリックイデアル $I_{M'}$ があれば、それがどのような統計モデルに対応するかを調べることは興味深い問題である ([1] 等)。[2] では、 D 型のルート系に付随する配置の中心対称配置が、3 水準の Box-Behnken 計画に対する自然な統計モデルに対応することを示し、ある単項式順序に対するグレブナー基底の具体形を導出した。詳細は当日報告する。

参考文献

- [1] S. Aoki, T. Hibi and H. Ohsugi (2013). Markov chain Monte Carlo methods for the regular two-level fractional factorial designs and cut ideals. *J. Statist. Plann. Infer.*, **143**, 1791–1806.
- [2] S. Aoki, T. Hibi and H. Ohsugi (2015). Markov chain Monte Carlo methods for the Box-Behnken designs and centrally symmetric configurations. arXiv:1502.02323.
- [3] S. Aoki and A. Takemura (2010). Markov chain Monte Carlo tests for designed experiments. *Journal of Statistical Planning and Inference*, **140**, 817–830.
- [4] P. Diaconis and B. Sturmfels (1998). Algebraic algorithms for sampling from conditional distributions. *Annals of Statistics*, **26**, 363–397.