

混合線形モデルにおける分散成分の平均情報アルゴリズム
による制限最尤推定に関する研究

蘆 田 一 郎

新潟大学大学院自然科学研究科博士後期課程
生命システム科学専攻

1999 年 3 月

目 次

	頁
第1章 序 論	1
第2章 MIVQUE アルゴリズムに基づく REML 推定量の抽出共分散行列	7
2.1 緒 言	7
2.2 理 論	8
2.2.1 混合線形モデル	8
2.2.2 EM-REML 推定量および漸近的共分散行列	9
2.2.3 MIVQUE 推定量	12
2.2.4 MIVQUE アルゴリズムによる抽出共分散行列	13
2.3 シミュレーション	15
2.4 考 察	19
2.5 要 約	22
第3章 擬似分散アプローチに基づく REML 推定量の抽出共分散行列	23
3.1 緒 言	23
3.2 理 論	24
3.2.1 MIVQUE 2 次形式の擬似期待値	24
3.2.2 PVA による抽出共分散行列の導出	26
3.2.3 V_2 行列と Fisher 情報行列の逆行列との関係	28
3.3 数値例	36
3.4 考 察	40
3.5 要 約	42
第4章 基本混合線形モデルに関する平均情報行列の一形態ならびに制限最尤 推定手法	44
4.1 緒 言	44

4.2	理 論	45
4.2.1	基本混合線形モデルならびに AI	45
4.2.2	Johnson と Thompson による AI 行列	49
4.2.3	予測残差ベクトルを含まない AI 行列の導出	50
4.2.4	AI アルゴリズムによる新たな REML 推定法	52
4.3	数値分析	54
4.3.1	データ	54
4.3.2	方 法	56
4.3.3	結 果	57
4.4	考 察	57
4.5	要 約	65
第 5 章 一般混合線形多分散成分モデルに関する平均情報行列の一形態ならびに		
	制限最尤推定手法	66
5.1	緒 言	66
5.2	理 論	67
5.2.1	一般混合線形モデルおよび混合モデル方程式	67
5.2.2	REML 対数尤度関数および偏導関数	69
5.2.3	平均情報行列の Johnson と Thompson による表記	70
5.2.4	予測残差ベクトルを含まない AI 行列の一形態	71
5.2.5	REML 推定のための準ニュートン型反復推定式	74
5.3	数値分析	74
5.3.1	データ	74
5.3.2	方 法	76
5.3.3	結 果	77
5.4	考 察	79
5.5	要 約	82

第6章 REML 推定のための AI および EM アルゴリズムを結合した演算手法	83
6.1 緒 言	83
6.2 理 論	84
6.2.1 混合線形モデル	84
6.2.2 EM-REML 反復推定式	85
6.2.3 AIREML _m 法における AI 行列	85
6.2.4 EM アルゴリズムを併用した AIREML _m 法	86
6.3 数値分析	89
6.3.1 データ	89
6.3.2 方 法	91
6.3.3 結 果	94
6.4 考 察	98
6.5 要 約	102
第7章 種々の REML 推定手法に関する演算特性の比較	104
7.1 緒 言	104
7.2 比較手法	105
7.2.1 データ	105
7.2.2 方 法	107
7.3 結 果	113
7.4 考 察	119
7.5 要 約	124
第8章 総 括	125
謝 辞	135
引用文献	136
英文要約	144

第1章 序 論

分散成分推定法は、様々な分野で広範に利用されている最も重要な統計的方法の一つであり、Sahai (1979)、Sahai ら (1985)、Khuri と Sahai (1985)、Rao と Kleffe (1988)、Searle (1989) ならびに Searle ら (1992) によるレビューからも明らかなように、これまでに種々の手法が開発されている。約 100 年に及ぶ分散成分推定法の発達の歴史の中で、家畜育種家の果たしてきた役割は大きく、現時点で最良な推定法の代表格と考えられている制限最尤法 (Restricted Maximum Likelihood; REML; Patterson と Thompson, 1971) は、家畜育種の分野で開発された。この REML 法は、分散成分の推定に関する最も複雑な問題すなわち混合モデル - 不釣り合い型構造のデータからの推定問題に容易に適用可能な方法であり、種々の点で優れた特性を有する推定量を与える手法である。家畜育種の分野では、家畜の経済的に重要な量的形質 (経済形質) に関与する遺伝子効果および環境効果の分散が不可欠なパラメータであり、それらの分散成分は、選抜対象個体の遺伝的能力の評価すなわち Henderson (1973) の混合モデル法による相加的遺伝子型価 (育種価) の最良線形不偏予測において必須の情報として利用される。また、適切な育種計画を立案する際に必要とされる遺伝率や遺伝相関のような遺伝的パラメータ値は、(共)分散成分の推定値に基づいて算出される。よって、家畜育種分野における分散成分のこのような必要性和そこで取り扱われるフィールドデータの構造的複雑さが、同分野での分散成分推定法に関する理論研究を促進させてきたものと考えられる。

分散成分の概念の初歩的記述は、天文学分野における Airy (1861) や Chauvenet (1863) の文献にみられるが、分散や分散成分といった用語を明確に定義して取り扱ったのは Fisher (1918) が最初である。その後、初期の段階では、一元あるいは二元配置の単純な分散分析法 (ANOVA) および分散成分推定法に関する研究 (例えば, Fisher, 1925a; Tippett, 1931; Winsor と Clarke, 1940; Ganguli, 1941; Crump, 1946, 1947; Hammersley, 1949) が実施され、家畜育種分野では、分散の分割に関する先駆的な研究、すなわち個体間変異の遺伝的要因による変異、環境的要因による変異およびそれらの交互作用による変異への分割など

に関する研究 (例えば, Lush と Jones, 1923; Lush, 1937; Dickerson, 1942; Hazel ら, 1943) が行われた。

分散成分の推定モデルは、1950 年代の初頭に至るまでは、一般に釣合い型データのための単純なモデルに限定されていた。しかし、家畜育種分野では、実際には最も複雑な不釣合い型 - 多因子構造のデータを取り扱う必要がある。そこで、家畜育種家である Henderson (1953) は、不釣合い型でかつ多因子構造のデータにも適用可能な最初の手法すなわち Methods 1, 2 および 3 と呼ばれる ANOVA 型の分散成分推定法を確立した。Method 1 は当時広範に用いられたが、混合モデル構造のデータに適用すると偏った推定値を与えることが知られている。Method 2 は、母数効果と変量効果との間の交互作用の存在下では不適な手法である。Method 3 は、最小自乗方程式および平方和のリダクションの概念に基づく手法であり、一般混合線形モデル下での推定のための先駆的な方法であるが、この方法では変量効果も母数効果と見なされる。また、Method 3 推定量は、ユニークな推定量ではないことが明らかにされている。そのため、Methods 1, 2 および 3 は、家畜育種の分野では既に過去の方法となっている。

一方、Lush (1931, 1933) によって提案された種畜の遺伝的評価法は、Hazel (1943) の選抜指数法と同様に最良線形予測法の一つであり、家畜の遺伝的改良の促進に大きく貢献した。しかし、これらの方法を (共) 分散成分が未知で高度に不釣合いなデータに適用することは妥当ではない (Henderson, 1973)。そこで、Henderson (1973, 1984) は、変量効果の混合モデル法による最良線形不偏予測の理論を大成させて、種畜評価法を大きく発展させた。混合線形モデルは、 \mathbf{y} を観測値の $N \times 1$ ベクトル、 \mathbf{b} を各母数効果の $p \times 1$ ベクトル、 \mathbf{u} を個体の育種価のような変量効果の $q \times 1$ ベクトル、 \mathbf{e} を残差の変量効果の $N \times 1$ ベクトル、 \mathbf{X} および \mathbf{Z} をそれぞれ $N \times p$ および $N \times q$ の計画行列、 $\mathbf{y} \sim N(\mathbf{Xb}, \mathbf{D}\sigma_e^2)$ 、 $\mathbf{u} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G}\sigma_u^2)$ および $\mathbf{e} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I}_N\sigma_e^2)$ 、 σ_u^2 および σ_e^2 をそれぞれ分散成分、 $\mathbf{D} = \mathbf{ZGZ}'r^{-1} + \mathbf{I}_N$ ならびに $r = \sigma_e^2/\sigma_u^2$ として、

$$\mathbf{y} = \mathbf{Xb} + \mathbf{Zu} + \mathbf{e}$$

と表される。Henderson の混合モデル法における連立方程式、いわゆる Henderson の混

合モデル方程式は、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

と記述され、この方程式の解ベクトル $\hat{\mathbf{b}}$ および $\hat{\mathbf{u}}$ は、それぞれ \mathbf{b} の推定可能関数の最良線形不偏推定値 (Best Linear Unbiased Estimator, BLUE) および \mathbf{u} の最良線形不偏予測量 (Best Linear Unbiased Predictor, BLUP) を与える。

Henderson の混合モデル方程式は、母数効果の最良線形不偏推定および変量効果の最良線形不偏予測に加えて、最小分散 2 次不偏推定 (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimation, MIVQUE; LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) などの分散成分の推定法にも活用される (Henderson, 1984)。MIVQUE 法は、1970 年代に入って開発された ANOVA 型の優れた分散成分推定法であるが、MIVQUE 推定の当初の理論では、観測値ベクトルの分散の逆行列を含む形で推定式が組み立てられていた。それに対して、Henderson (1984) は、混合モデル方程式を利用すれば、その解ベクトルおよび係数行列の一般化逆行列を含む演算を通じて、分散成分の MIVQUE 推定の可能なことを明らかにした。Henderson の混合モデル法の方法論と MIVQUE の推定理論とのこのような結合は、近年における極めて大きな理論的成果であったが、MIVQUE などの ANOVA 型の推定法は、演算に要する負荷が相対的に大きいなどの弱点を有するところから、家畜育種分野における利用頻度は高くないのが現状である。

1970 年前後に大きな発展を遂げ、現在、家畜育種・動物遺伝の分野で主流となっている分散成分の推定法は、尤度に基づく最尤法 (Maximum Likelihood, ML; Hartley と Rao, 1967) および REML 法 (Patterson と Thompson, 1971)、とくに REML 法である。ML 法は、古くは Fisher (1922, 1925b) により検討され、Crump (1947, 1951) により共変量を含む釣合い型一元配置法の変量モデルに適用された。Crump (1951) は、大標本の仮定下における ML 推定量の抽出 (共) 分散の計算式をも導いている。しかし、この時期には ML 法は多くの注目を集めず、1960 年代の半ばに至るまではごく限られた分野で小規模に用いられるに過ぎなかった。ML 法が総じて望ましい特性をもつこと自体は当時もよく知られていたが、軽視された原因は、主として尤度方程式の解を求める上での計算の繁雑さに

あった。ところが、Hartley と Rao (1967) が一般混合線形モデルにおける分散成分の ML 推定法を発展させ、ML 法に対する興味を一新させた。また、この時期にコンピュータの演算能力が飛躍的に向上したことも、ML 法の価値の再認識に貢献した。ただし、ML 法には、Anderson と Bancroft (1952) によって既に指摘されているように、母数効果の推定による自由度のロスの説明しないという特性がある。そこで、Thompson (1962) は、釣り合い型 - 変量モデルのデータ構造を仮定して、ML 法におけるそのような欠点を改善し、負の推定値を与えない REML 法を導出した。その後、Patterson と Thompson (1971) により、不釣り合い型 - 一般混合線形モデルのデータ構造のための REML 推定の一般理論が開発され、今日に至っている。

Patterson と Thompson (1971) の REML 法は、観測値の分布型として正規分布を仮定しうるときには、最も優れた特性を有する (共) 分散成分推定法である。REML 法では、対数尤度関数:

$$\lambda = -\frac{1}{2}N \log(2\pi) - \frac{1}{2}N \log(\sigma_e^2) - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{D}|) - \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{Xb})' \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{Xb}) / \sigma_e^2$$

を二つの部分:

$$\begin{aligned} \lambda_1 = & -\frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X})\} \log(2\pi) - \frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X})\} \log(\sigma_e^2) \\ & - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{SDS}'|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{S}' (\mathbf{SDS}')^{-1} \mathbf{S} \mathbf{y} / \sigma_e^2 \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} \lambda_2 = & -\frac{1}{2}r(\mathbf{X}) \log(2\pi) - \frac{1}{2}r(\mathbf{X}) \log(\sigma_e^2) - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{X}' \mathbf{D}^{-1} \mathbf{X}|) \\ & - \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{Xb})' \mathbf{D}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{D}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{Xb}) / \sigma_e^2, \end{aligned}$$

$\mathbf{SX} = \mathbf{0}$, $\mathbf{S}'(\mathbf{SS}')^{-1}\mathbf{S} = \mathbf{I}_N - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$, に分割し、これらのうちで母数効果ベクトルとは無関係である λ_1 の最大化を図ることによって分散成分の推定量が定義されている。よって、REML 推定量は、母数効果の同時推定による自由度のロスを的確に説明する推定量である。また、REML 推定量は、モデルにおける母数効果の真値に対して不変性をもつばかりでなく、母数効果の推定値に対してもフリーな関係にある推定量である。加えて、

この推定量は、釣合い型のデータ構造下では ANOVA 推定量と同値関係にあることも知られている。さらに、遺伝・育種の観点からみた場合には、REML 法はデータに含まれる種々のタイプの選抜の影響を説明する優れた能力を備えており、この点はとくに望ましい特性と考えられている (Thompson, 1973; Meyer と Thompson, 1984; Van Raden と Jung, 1988; Ouweltjes ら, 1988; Iwaisaki, 1992)。したがって、REML 推定量は‘最良な’推定量の一つであるが、一般混合線形モデルにおける (共) 分散成分の不釣合い型データからの REML 推定には、通常、特定の非線形連立方程式系に対する反復解の算出が必要とされる。それ故、そのための優れたアルゴリズムの開発がとくに重要な研究分野と認識されており、現時点までに、代表的なアルゴリズムとして、EM (Expectation-Maximization) アルゴリズム (Dempster ら, 1977) 様のアルゴリズムおよび反復 MINVQUE アルゴリズム (Harville, 1977) ならびに DF (Derivative-Free) アルゴリズム (Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987) などが開発され、多用されている。

点推定問題に限らず、REML 法の更なる利点は、推定量の抽出 (共) 分散に関する一統計量が明確に定義されている点である。これまでに、REML 法を含む多数の分散成分推定法が開発されてきているが、中には点推定の理論のみが提案されている方法も少なくない。点推定値のみならず、推定値の抽出 (共) 分散や区間推定値は、推定精度の指標として極めて重要な情報である。にもかかわらず、点推定の理論のみに留められている場合の一つの理由は、たとえ近似式の導出といえども、推定量の抽出 (共) 分散に関する理論式の導出の方が、より難度が高いためである。しかるに、REML 推定量に関しては、その一共分散行列が、Fisher 情報行列:

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = -E \left(\frac{\partial^2 \log(\lambda_1)}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'} \right) \mid \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \sigma_u^2 & \sigma_e^2 \end{bmatrix}'$$

の逆行列 $[\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta})]^{-1}$ として明瞭に定義されている。ただし、このような行列によって与えられる REML 推定量の共分散行列は、大標本理論に基づくものであり (Searle, 1970, 1979; Corbeil と Searle, 1976)、母分散のパラメータのみを含む形で与えられている漸近値である点に留意を要する。

以上のような REML 推定理論の歴史的発展の成果を踏まえて、最も複雑な混合モデル

- 不釣り合い型のデータを取り扱う家畜育種の分野でも、近年、北・南米諸国、ヨーロッパ諸国、オーストラリア・ニュージーランド、イスラエルならびに我が国などの畜産技術先進国を中心として、REML 法による (共) 分散成分の推定と Henderson の混合モデル法による育種価の経験的最良線形不偏予測を同時に実施するための国家的規模でのシステムが着実に整備されてきており、各国における家畜の遺伝的改良の急速な実現に大きく貢献するに至っている。

しかしながら、REML 推定の理論に関しては、現時点においても更に検討を要する重要課題がいくつか存在する。一つには、REML 推定量の抽出 (共) 分散の性質をより詳細に明らかにしていくこと、また、そのためのより充実した方法論を発展させていくことが必要である。さらに、点推定段階から抽出 (共) 分散の推定段階に至るまでのすべてのプロセスについて、演算の全体的効率化をいかに図っていくかという問題が、最重要な課題として挙げられる。とくに、この種の問題は、(巨) 大容量のデータセットを分析の対象とする家畜育種の分野などでは緊要な検討課題である。

そこで、本研究では、まず第 2 章において、MIVQUE 推定量と REML 推定量との関係に着目し、REML 対数尤度関数の偏導関数に依存しない手法を発展させることによって、REML 推定量の抽出共分散行列の一形態を導出する。さらに第 3 章では、当該共分散行列と Fisher 情報行列の逆行列として定義されている従来の大標本漸近共分散行列との理論的關係を明らかにするとともに、尤度関数を不要とする本アプローチの意義について論じる。次いで、第 4 章では、基本混合線形モデルを仮定して、平均情報 (Average Information, AI; Johnson と Thompson, 1995) の概念を利用した新たな REML 推定手法を提案し、第 5 章で一般混合線形モデルを仮定して、多分散成分推定手法への一般化を図る。さらに、第 6 章では、EM アルゴリズムの利点をも取り込んだ反復推定手法への改良を図り、最後に第 7 章では、本推定手法と他の代表的な REML 推定手法との間で演算特性の比較を行い、本推定手法の相対的演算効率を明らかにする。

第2章 MIVQUE アルゴリズムに基づく REML 推定量の抽出共分散行列

2.1 緒言

分散成分の推定のための ML 法の基本理論は、Fisher (1922, 1925b) および Crump (1947, 1951) などにより構築され、当時も ML 推定量は概して望ましい特性を有することが知られていた。しかしながら、ML 法では尤度方程式の解を求めるための複雑な計算過程が必要であるところから、その後長らく実用性の面で難がある方法と考えられていた。ところが、Hartley と Rao (1967) が ML 推定の一般理論を発展させ、さらに、Thompson (1962) による REML 法の初歩的研究を経て後、家畜育種分野に係わる研究者によって一般混合線形モデル - 不釣り合い型データをカバーし得る REML 推定法の一般理論の骨子が開発され (Patterson と Thompson, 1971)、(RE)ML 法の価値の再認識が進んだ。加えて、近年における計算機性能の急速な発達にも支えられて、(RE)ML 推定法は今日、理論的にも実用性の面でも最も優れた分散成分推定法としての地位を確立するに至っており、家畜育種・動物遺伝をはじめとする様々な分野で利用されている。

尤度依存型の (共) 分散成分推定法である (RE)ML 法は、他の推定法が有している様々な欠点の大部分を克服した方法であり、(RE)ML 推定量は十分統計量としての特性とともに、不変性、一致性、漸近正規性および有効性の各特性を備えている (Miller, 1973)。また、(RE)ML 法は、一般混合線形モデル - 不釣り合い型構造のデータへの適用が可能な方法であり、しかも常にパラメータ空間内の非負値の推定量を与える。さらに、これらの方法は観測値ベクトルに関して多変量正規性を仮定して定義された推定法ではあるが、たとえ連続分布の分布型が特定されない状況下でも、(RE)ML 推定量は合理的な推定量であると考えられている (Harville, 1977)。ただし、両方法のうちの ML 法には、母数効果の推定に起因する自由度のロスの説明しないという欠点が存在する。しかるに、REML 法はこの欠点が克服された推定法であり、REML 推定量は混合モデルに含まれる母数効果の真値に対して不変性をもつばかりでなく、その推定値に対してもフリーな関係にある推定量である。

このように、REML 推定量は種々の望ましい特性を備えているが、REML 法の他の重要な特性は、推定精度の指標である推定量の一共分散行列がいわゆる Fisher (期待) 情報行列の逆行列として明確に定義され、いかなる数学モデルに関しても与えられる点である (Searle, 1970, 1979; Corbeil と Searle, 1976)。しかし、REML 推定量が漸近正規推定量である点からも明らかなように、情報行列に基づく REML 推定量の共分散行列は大標本理論に依っている。すなわち、 N を観測値数、 θ を分散パラメータのベクトル、 $[\mathbf{I}(\theta)]^{-1}$ を Fisher 情報行列の逆行列として、 $N \rightarrow \infty$ で、

$$\hat{\theta} \sim N[\theta, [\mathbf{I}(\theta)]^{-1}]$$

が成立する。また、漸近有効性により、 $N \rightarrow \infty$ につれて、REML 推定値の当該共分散行列は不偏推定量の (共) 分散行列の Cramér-Rao 下限を形成することが知られている (例えば、Casella と Berger, 1990)。よって、母分散の関数である Fisher 情報行列の逆行列によって与えられる REML 推定量の抽出 (共) 分散は、あくまでも大標本を前提とした漸近値である。

そこで、本章では、尤度関数に依存しない ANOVA 型の分散成分推定法である MIVQUE 法 (LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) を取り上げ、REML 推定値を事前情報とする MIVQUE 推定値と REML 推定値との間に同値性が成立する点に着目することによって、尤度の利用およびその 2 階偏導関数の演算を前提とせず、しかも母分散に加えて REML 推定量の項をも含む、REML 推定量の一共分散行列について検討を加える。

2.2 理 論

2.2.1 混合線形モデル

いま、混合線形モデルを、

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e} \quad (2.1)$$

と仮定する。ただし、

\mathbf{y} : 観測値の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{b} : 母数効果の $p \times 1$ ベクトル

\mathbf{u} : 個体の効果のような変量効果の $q \times 1$ ベクトル

\mathbf{e} : 残差効果 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{X} および \mathbf{Z} : それぞれ $N \times p$ および $N \times q$ の計画行列,

であり、 \mathbf{y} 、 \mathbf{u} 、 \mathbf{e} の期待値および \mathbf{u} 、 \mathbf{e} の分散は、それぞれ

$$E \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Xb} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

および

$$\text{Var} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}\sigma_u^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\sigma_e^2 \end{bmatrix}$$

であると仮定する。ここで、 σ_u^2 および σ_e^2 はそれぞれ変量効果 \mathbf{u} および \mathbf{e} についての分散成分であり、 \mathbf{G} は変量効果 \mathbf{u} 間の共分散構造を表す $q \times q$ の行列である。これらの仮定の下で、観測値ベクトル \mathbf{y} の分散は、

$$\text{Var}(\mathbf{y}) = \mathbf{ZGZ}'\sigma_u^2 + \mathbf{I}\sigma_e^2 \equiv \mathbf{V}_y$$

として与えられる。

2.2.2 EM-REML 推定量および漸近的共分散行列

モデル (2.1) に関する混合モデル方程式は、 r を分散比 σ_e^2/σ_u^2 として、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{y} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

と表される。ここで、 $N \times N$ の射影行列 $\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ を用いて母数効果の吸収を行えば、(2.2) 式は、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}} &= (\mathbf{Z}'\mathbf{MZ} + \mathbf{G}^{-1}r)^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{My} \\ &\equiv \mathbf{CZ}'\mathbf{My} \end{aligned} \quad (2.3)$$

と表される。ただし、 \mathbf{C} は $q \times q$ の混合モデル方程式の係数行列の逆行列であり、

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\mathbf{r})\mathbf{C} = \mathbf{I}$$

より、

$$\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C} = \mathbf{I} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{r} \quad (2.4)$$

なる関係が成立している。

一方、分散成分の REML 推定量は、制限対数尤度関数:

$$\lambda = -\frac{1}{2}N \log(2\pi) - \frac{1}{2}N \log(\sigma_e^2) - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{D}|) - \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})/\sigma_e^2$$

ただし、

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{r}^{-1} + \mathbf{I}_N \\ &= \mathbf{V}_y\sigma_e^{-2}, \end{aligned}$$

を二つの部分:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -\frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X})\} \log(2\pi) - \frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X})\} \log(\sigma_e^2) \\ &\quad - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}'|) - \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{S}'(\mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}')^{-1}\mathbf{S}\mathbf{y}/\sigma_e^2 \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= -\frac{1}{2}r(\mathbf{X}) \log(2\pi) - \frac{1}{2}r(\mathbf{X}) \log(\sigma_e^2) - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{X}'\mathbf{D}^{-1}\mathbf{X}|) \\ &\quad - \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'\mathbf{D}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{D}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})/\sigma_e^2 \end{aligned}$$

ただし、

$$\mathbf{S}\mathbf{X} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{S}'(\mathbf{S}\mathbf{S}')^{-1}\mathbf{S} = \mathbf{I}_N - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}',$$

に分割し、母数効果を含まない関数 λ_1 を未知パラメータでそれぞれ偏微分して、

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \sigma_e^2} = -\frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X})\}/\sigma_e^2 + \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{S}'(\mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}')^{-1}\mathbf{S}\mathbf{y}/\sigma_e^4$$

および

$$\begin{aligned}\frac{\partial \lambda_1}{\partial r^{-1}} &= -\frac{1}{2} \text{tr}\{\mathbf{Z}'\mathbf{S}'(\mathbf{SDS}')^{-1}\mathbf{SZ}\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{S}'(\mathbf{SDS}')^{-1}\mathbf{SZZ}'\mathbf{S}'(\mathbf{SDS}')^{-1}\mathbf{Sy}/\sigma_e^2\end{aligned}$$

を 0 と置いて形成される非線形連立方程式系を解くことによって得られる。

よって、EM アルゴリズム (Dempster ら, 1977) に基づく REML 推定式の一つは、 θ を両分散成分を要素とする 2×1 ベクトル、 $\tilde{\theta}$ をその REML 推定量 すなわち EM-REML 推定量のベクトルとして、

$$\tilde{\theta} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_u^2 \\ \tilde{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q & -\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) \\ 0 & N - r(\mathbf{X}) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

として与えられる。ここで、最右辺の右側のベクトルは、REML (および MIVQUE) の 2 次形式であり、具体的には、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{M}(\mathbf{I} - \mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}')\mathbf{M}\mathbf{y} \end{bmatrix} \equiv \mathbf{s} \quad (2.6)$$

なる構造をとっている。

このとき、Fisher 情報行列 $\mathbf{I}(\theta)$ は、尤度関数 λ_1 の対数すなわち対数尤度関数 $\log(\lambda_1)$ の θ による 2 階偏微分により、

$$\begin{aligned}\mathbf{I}(\theta) &= -E \left[\frac{\partial^2 \log(\lambda_1)}{\partial \theta \partial \theta'} \right] \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} i_{11} & i_{12} \\ i_{12} & i_{22} \end{bmatrix} \quad (2.7)\end{aligned}$$

ただし、

$$\begin{aligned}i_{11} &= \left[q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}r^2 \right] / \sigma_u^4 \\ i_{12} &= \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}r^2 \right] / \sigma_u^2 \sigma_e^2 \\ i_{22} &= \left[N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}r^2 \right] / \sigma_e^4,\end{aligned}$$

と表され、REML 推定量 $\tilde{\theta}$ の情報行列アプローチに基づく共分散行列は、情報行列の逆行列として、

$$\text{Var}(\tilde{\theta}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\tilde{\sigma}_u^2) & \text{Cov}(\tilde{\sigma}_u^2, \tilde{\sigma}_e^2) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\tilde{\sigma}_e^2) \end{bmatrix} \simeq [\mathbf{I}(\theta)]^{-1} \quad (2.8)$$

で与えられる。

2.2.3 MIVQUE 推定量

一方、分散成分の MIVQUE 推定式の一つは、(2.6) 式の両 2 次形式の期待値に基づき、 $\hat{\theta}$ を MIVQUE 推定量、 \tilde{r} を r の事前情報として、

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_u^2 \\ \hat{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{s} \quad (2.9)$$

ただし、

$$\begin{aligned} h_{11} &= \text{tr}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}) \\ h_{12} &= \text{tr}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) \\ h_{21} &= \text{tr}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}) - \text{tr}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}) \\ h_{22} &= N - r(\mathbf{X}) - \text{tr}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}), \end{aligned}$$

として与えられる。そこで、(2.4) 式を適用してさらに整理すれば、要素 h_{11} は、

$$\begin{aligned} h_{11} &= \text{tr}\{(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{r})\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{r})'\mathbf{G}\} \\ &= \text{tr}(\mathbf{I}_q - 2\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{r} + \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{r}^2) \\ &= q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 \equiv t_{11} \end{aligned}$$

と表される。 \mathbf{H} 行列の他の要素についても同様に、

$$\begin{aligned} h_{12} &= \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} \equiv t_{12} \\ h_{21} &= q\tilde{r} - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 \equiv t_{21} \\ h_{22} &= N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} \equiv t_{22} \end{aligned}$$

と変形され、(2.9) 式については結果的に、 \mathbf{G} 行列そのものを含まない形で、

$$\hat{\theta} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{s} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{s} \quad (2.10)$$

として表すことができる。

2.2.4 MIVQUE アルゴリズムによる抽出共分散行列

従来、分散成分の点推定の理論に関して、反復 MIVQUE 法によるパラメータ空間内の収束値は REML 推定値と同値関係にあることが知られている (LaMotte, 1970; Rao, 1972, 1979; Hocking と Kutner, 1975; Harville, 1977) ので、ここではこの関係に注目する。すなわち、REML 推定量を事前情報とする MIVQUE 推定量を考え、当該推定量が REML 推定量に一致する点に着目すれば、REML 推定量の一抽出共分散行列の以下のような新たな定義が可能となる。

いま、ある種の事前情報に基づく MIVQUE 推定量、ただし、REML 推定量を事前情報とする MIVQUE 推定量 $\hat{\theta}$ を考えれば、

$$\tilde{\theta} = \hat{\theta}$$

であるので、

$$\text{Var}(\tilde{\theta}) = \text{Var}(\hat{\theta})$$

であり、

$$\text{Var}(\tilde{\theta}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\tilde{\sigma}_u^2) & \text{Cov}(\tilde{\sigma}_u^2, \tilde{\sigma}_e^2) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\tilde{\sigma}_e^2) \end{bmatrix} = \mathbf{T}^{-1} \text{Var}(\mathbf{s}) \mathbf{T}^{-1'} \quad (2.11)$$

が成立する。ただし、 $\text{Var}(\mathbf{s})$ は、(2.6) 式で与えられた両 2 次形式の共分散行列、すなわち

$$\text{Var}(\mathbf{s}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) & \text{Cov}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}, \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

である。なお、(2.11) 式で与えられた MIVQUE アルゴリズムによる REML 推定量の共分散行列を、ここでは \mathbf{V}_1 行列と呼ぶことにする。

そこで、 \mathbf{y} が多変量正規分布に従う場合の 2 次形式 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}\mathbf{y}$ の分布論により、 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}\mathbf{y}$ の c 次のキュミュラントを考えれば、

$$K_c(\mathbf{y}'\mathbf{Q}\mathbf{y}) = 2^{c-1}(c-1)! \left[\text{tr}\{(\mathbf{Q}\mathbf{V}_y)^c\} + c\mathbf{b}'\mathbf{X}'(\mathbf{Q}\mathbf{V}_y)^{c-1}\mathbf{X}\mathbf{b} \right]$$

として与えられるので、 $c=2$ として分散を求めれば、

$$\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}\mathbf{y}) = 2\text{tr}\{(\mathbf{Q}\mathbf{V}_y)^2\} + 4\mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{Q}\mathbf{V}_y\mathbf{Q}\mathbf{X}\mathbf{b}$$

となる。ただし、ここでは $\mathbf{MX} = \mathbf{0}$ より $4\mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{Q}\mathbf{V}_y\mathbf{Q}\mathbf{X}\mathbf{b} = 0$ であるので、2 次形式 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ の分散は、

$$\begin{aligned} \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) &= 2\text{tr}(\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_y\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_y) \\ &= 2\text{tr}\left[\{\mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}(\mathbf{ZGZ}'\sigma_u^2 + \mathbf{I}\sigma_e^2)\}^2\right] \\ &= 2\text{tr}\{\mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{MZGZ}'\mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{MZGZ}'\sigma_u^4 \\ &\quad + 2\mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{MZGZ}'\mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_u^2\sigma_e^2 \\ &\quad + \mathbf{MZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{MMZCG}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_e^4\} \\ &= 2\text{tr}\{(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})'\mathbf{G} \\ &\quad (\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})'\mathbf{G}\sigma_u^4 \\ &\quad + 2(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})'\mathbf{G}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_u^2\sigma_e^2 \\ &\quad + (\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I}_q - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})'\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^4\} \\ &= 2\left[\{q - 4\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + 6\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 - 4\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3 \right. \\ &\quad \left. + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^4\}\sigma_u^4 \right. \\ &\quad \left. + 2\{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - 3\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + 3\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 \right. \\ &\quad \left. - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3\}\sigma_u^2\sigma_e^2 \right. \\ &\quad \left. + \{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} \right. \\ &\quad \left. + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2\}\sigma_e^4\right] \end{aligned}$$

として得られる。同様の手法により、 $\text{Cov}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}, \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y})$ および $\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y})$ についても展開・整理を行えば、MIVQUE の 2 次形式 \mathbf{s} の分散共分散行列は、結果として、

$$\begin{bmatrix} \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) \\ \text{Cov}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}, \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \\ \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_u^4 \\ \sigma_u^2\sigma_e^2 \\ \sigma_e^4 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

ただし,

$$\begin{aligned}
k_{11} &= 2 \left[q - 4\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + 6\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 - 4\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^3 \right. \\
&\quad \left. + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^4 \right] \\
k_{12} &= 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} + 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^2 \right. \\
&\quad \left. - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^3 \right] \\
k_{13} &= 2 \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\} - 2\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r} + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^2 \right] \\
k_{21} &= 2 \left[q\tilde{r} - 3\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 + 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^3 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^4 \right] \\
k_{22} &= 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} - 2\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^3 \right] \\
k_{23} &= 2 \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^2 \right] \\
k_{31} &= 2 \left[q\tilde{r}^2 - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^4 \right] \\
k_{32} &= 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^3 \right] \\
k_{33} &= 2 \left[N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 \right],
\end{aligned}$$

として与えられる。なお、ここでとくに留意されるべき点は、分散比 \tilde{r} は REML 推定量に基づく分散比すなわち $\hat{\sigma}_e^2/\hat{\sigma}_u^2$ であり、導出された (2.13) 式には、母分散すなわち分散成分の真値の情報に加えて REML 推定量の情報も含まれている点である。

2.3 シミュレーション

前節で導出した REML 分散成分推定量の MIVQUE アルゴリズムによる抽出共分散行列 \mathbf{V}_1 の妥当性について、本節では、モンテカルロシミュレーションにより数値的に検討を加えた。母数効果として群の効果、変量効果として父親および残差の効果を含む交叉型の混合線形モデルにより不釣り合い型のデータを発生させ、同一のモデルにより分析を行った。群の数は 10、父親の数は 30、父親当たりの後代の数は等しく 15 と設定し、計 450 頭の後代を群に対して無作為に割り当てた。群の効果は正規乱数を用いて発生させ、母数効果として取り扱った。その際、全変動に対する群の効果による変動の割合は 50% と仮定した。父親および残差の効果は、平均が 0 で分散がそれぞれ σ_s^2 および σ_e^2 の正規分布

に従うと仮定して発生させ、変量効果として取り扱った。 σ_s^2 および σ_e^2 の真値は、ここでは、それぞれ 1 および 7 と設定した。すなわち遺伝率の真値としては、

$$h^2 = \sigma_A^2 / (\sigma_A^2 + \sigma_E^2) = 4\sigma_s^2 / (\sigma_s^2 + \sigma_e^2)$$

により、.5 の値を設定した。ただし、 σ_A^2 および σ_E^2 は、それぞれ相加的遺伝分散および環境分散を示す。

異なる乱数の種を用いたデータ発生を 300 回繰り返し、各標本について EM アルゴリズムによる REML 推定を行った。REML 推定においては、分散比 σ_e^2/σ_s^2 の初期情報を 7 と設定し、反復推定における二つの連続した推定値間の差がいずれの分散成分についても 10^{-8} 未満となったときに収束に至ったと判定した。300 回の繰り返しの後、両分散成分の推定値について Smirnov の棄却検定を行い、異常値を 5% の危険率で棄却した後、総標本数が 300 となるように更にデータを発生させた。

以上のような標本データを対象として、ここでは、REML 推定値の抽出 (共) 分散を推定するための 3 種類のアプローチを比較した。すなわち、アプローチ I では、300 組の両分散成分の推定値について、常法により、不偏分散および共分散の実際の値を算出した。アプローチ II では、本章で導出した \mathbf{V}_1 行列を取り上げ、各標本から算出した \mathbf{V}_1 の値について、当該要素の平均値を計算した。さらにアプローチ III では、(2.8) 式に示した Fisher 情報行列の逆行列を取り上げ、 r のかわりに \hat{r} を用いる一方、 σ_u^4 , $\sigma_u^2\sigma_e^2$ および σ_e^4 には仮定された真値をそのまま用いる方法を設定し、算出された 300 個の値の平均値を求めた。

アプローチ I による結果は、表 2.1 に示したとおりである。 $\hat{\sigma}_s^2$ の 300 個の推定値の範囲は 1.961 から .115 に亘り、 $\hat{\sigma}_e^2$ の範囲は 8.259 から 5.732 までの値であった。また、それらの推定値の (共) 分散すなわち $\text{Var}(\hat{\sigma}_s^2)$, $\text{Cov}(\hat{\sigma}_s^2, \hat{\sigma}_e^2)$ および $\text{Var}(\hat{\sigma}_e^2)$ の値は、それぞれ、.135, -.016 および .238 と計算された。

一方、アプローチ II および III による結果は、表 2.2 に示したとおりである。アプローチ II による $\text{Var}(\hat{\sigma}_s^2)$, $\text{Cov}(\hat{\sigma}_s^2, \hat{\sigma}_e^2)$ および $\text{Var}(\hat{\sigma}_e^2)$ の推定値の平均は、それぞれ、.152, -.016 および .238 であり、300 回の繰り返しを通じての推定値のバラツキは、分散・共分

表 2.1 アプローチ I による REML 推定値の (共) 分散推定値

標本数	父親分散				残差分散				共分散
	平均	最大	最小	分散	平均	最大	最小	分散	
300	1.002	1.961	.115	.135	7.010	8.259	5.732	.218	-.020
3,000	1.000	2.543	.065	.159	7.008	8.670	5.229	.234	-.014

表 2.2 アプローチ II および III による REML 推定値の
(共)分散推定値

アプローチ	統計量 /	父親分散	残差分散	共分散
II	平均	.152	.238	-.016
	最大	.152	.238	-.016
	最小	.152	.239	-.016
	範囲	.000	.000	-.000
III	平均	.182	.238	-.019
	最大	2.325	.238	-.159
	最小	.103	.238	-.007
	範囲	2.222	.000	.152

散のいずれについても 1×10^{-3} 未満の値を示し、非常に安定していた。しかし、 $\text{Var}(\hat{\sigma}_s^2)$ の推定値の平均については、アプローチ I による結果と概ね一致していたが、厳密には未だ差異が認められた。そこで、標本数を 3,000 としてアプローチ I による再計算を実施した (表 2.1)。その結果、アプローチ I による当該推定値は .159 を示し、アプローチ II による当該値に更に近づいた。このような結果は、標本数をさらに増加させれば、アプローチ I および II による推定値間の差は次第により小さくなっていく事実を示唆している。一方、アプローチ III による $\text{Var}(\hat{\sigma}_s^2)$, $\text{Cov}(\hat{\sigma}_s^2, \hat{\sigma}_e^2)$ および $\text{Var}(\hat{\sigma}_e^2)$ の推定値は、それぞれ、.182, -.019 および .238 として得られ、 $\text{Var}(\hat{\sigma}_s^2)$ の推定値については明らかに過大評価された。

2.4 考 察

一般混合線形モデルにおける (共) 分散成分の不釣り合い型データによる ML および REML 推定には、通常、制限付与下での非線形連立方程式系に対する反復解を必要とする。それ故、ML および REML 推定量の正確な抽出 (共) 分散を導くことはほぼ不可能に近いと考えられてきた。Kendall と Stuart (1973) などの多くの統計関係のテキストブックには、大標本 - ML 推定量の分布および性質について詳しく述べられている。すなわち、パラメータの ML 推定量は、 $-\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta})^{-1}$ すなわち Fisher (期待) 情報行列の逆行列の要素の負値を分散行列の下限として、多変量正規分布に漸近的に従うことが知られている。このような ML 推定についての大標本理論 (Hartley と Rao, 1967; Searle, 1970; Searle ら, 1992) は、分散成分の REML 推定量についても当てはまる (Corbeil と Searle, 1976; Casella と Berger, 1990)。したがって、REML 推定値の抽出 (共) 分散を得るための常法としては、情報行列の逆行列が一般に用いられている。しかしながら、先にも述べたように、情報行列の逆行列の要素は母分散の関数であり、情報行列のアプローチによる REML 推定量の抽出 (共) 分散は大標本 - 漸近値すなわち下限値を表すに過ぎない。

それに対して、本章では、REML 推定量の抽出共分散行列の別形態 \mathbf{V}_1 行列 ((2.11) 式) を導出した。この \mathbf{V}_1 行列は、REML 推定量に基づく分散比を事前情報として用いた

MIVQUE 推定量と REML 推定量との一致性に着目し、かつ、MIVQUE 推定法が尤度関数に基づく方法ではなく、また反復推定法でもないという利点を利用して導出されている。REML 法は、観測値ベクトルの分布型として多変量正規分布を仮定し、母数効果の項を含まない尤度関数に基づいて定義された反復推定法である一方、MIVQUE 法は、多変量正規分布の仮定を要するが、尤度に依存しない非反復の推定法であり、両者の来歴は全く異なる。しかしながら、両者は密接に関連しており、REML 推定値は反復 MIVQUE によるパラメータ空間内の収束値と同値性をもつことが知られている (LaMotte, 1970; Rao, 1972, 1979; Hocking と Kutner, 1975; Harville, 1977)。さらに、分散比の初期値を設定して直後の REML 推定量は、局所的最良の特性をもたない一種の MIVQUE 推定量であることも知られている (例えば、Searle, 1979)。したがって、反復 MIVQUE 推定値がパラメータ空間内に収束した時点での当該推定方程式の状態は、REML 推定値を事前情報とする非反復 MIVQUE 推定式であると解釈できる。本研究では、この点に着目することにより、混合モデル方程式の分散比として REML 推定量による項を設定し、このような方程式の解ベクトルによる MIVQUE 2 次形式のセットに対してキュミュラント理論に基づく分散・共分散のオペレーションを加えた。従来、点推定の観点から、REML および反復 MIVQUE の二つの推定値が一致性を有することは知られていたが、両者のこのような関係を利用して REML 推定量の抽出 (共) 分散の定義を試みた研究は現在までのところ見当たらない (L.R. Schaeffer, 1995, 私信)。

一般理論として、混合線形モデル (2.1) 式における分散成分の「ある推定量」の抽出分散は、真の分散比 r の逆数の 2 次関数に比例し、この 2 次関数の係数は計画行列 \mathbf{X} および \mathbf{Z} 、 \mathbf{G} 行列ならびに r の事前情報 \bar{r} に依存することが知られている。よって、本章で導出された \mathbf{V}_1 行列の対角要素は、「ある推定量」を REML 推定量に特定した場合の抽出分散の具体的な形態を表していると考えられる。(2.11) 式には、 \mathbf{X} および \mathbf{Z} の計画行列は含まれていないが、 \mathbf{C} 行列は母数効果吸収後の混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列であり、混合モデル方程式の係数行列には \mathbf{X} および \mathbf{Z} の計画行列などが含まれる点に留意を要する。

LaMotte (1971) によれば、MIVQUE 2 次形式の期待値には、(2.9) 式で示したように

G^{-1} 行列のみならず G 行列も含まれてくる。しかし、本研究での (2.10) 式および (2.11) 式における T 行列の中では G 行列は消去され、 G^{-1} 行列のみが含まれている。その理由は、例えば家畜育種・動物遺伝の分野においては、 G 行列は分析対象個体に関する相加的血縁行列 (いわゆる A 行列) に相当する。その場合に、標本サイズが大きければ、血統情報から A 行列を作出する作業およびその後その逆行列を求める作業には多大な労力を要することになる。しかし、実際には、 A 行列を計算することなく、血統情報から直接的にしかもより容易に A^{-1} 行列を算出することができる (Henderson, 1976; Quaas, 1976) からである。よって V_1 行列は、 $G^{-1}C$ のベキ乗項のみによって表されている。

V_1 行列の要素には、母分散の情報のみならず、REML 推定量 (の比) の情報も取り込まれている。そのことによって、情報行列のアプローチで必要とされる $\text{tr}(G^{-1}C)$ および $\text{tr}\{(G^{-1}C)^2\}$ 項に加えて $\text{tr}\{(G^{-1}C)^3\}$ および $\text{tr}\{(G^{-1}C)^4\}$ の項も含まれ、行列の形態が情報行列の逆行列に比べてより複雑となった。しかしその分、 V_1 行列は REML 推定値の抽出共分散行列としてより適切な形態を表していると考えられる。事実、数値シミュレーションを実施したところ、 V_1 行列による抽出 (共) 分散値は実現値と極めて良好に一致し、その妥当性が数値的にも実証された。さらに注目すべき点は、 V_1 行列による推定値には標本の違いによる変動が実質的に認められなかった点である。標本サイズが一定であっても、REML 推定値自体は当然のことながら標本ごとに異なるが、それらの標本推定値の分布の分散は一定値であり、 V_1 行列はこのような理論的に期待される望ましい特性を有していることが窺われる。また、 V_1 行列は、小標本からの REML 推定量の抽出 (共) 分散を表す理論式として、情報行列の逆行列よりも優れた特性を備えているものと推察される。すなわち、情報行列および本研究で用いた 2 次形式の分散のいずれについても正規分布を仮定して定義されているが、より歪んだ観測値分布を示す小標本では、一般に正規分布の仮定が満たされない。その場合、 V_1 行列の前提条件自体も満たされないことになるが、本研究での数値的結果は、 T 行列の小標本に関する相対的有効性が反映された結果と解釈される。

結論として、本章で導出された V_1 行列は、理論分析の手法あるいは母分散を既知とするコンピュータシミュレーションの手法により、REML 推定量の抽出 (共) 分散の特性を

より詳細に解明していく上で有用な理論式であると考えられる。しかしながら、 V_1 行列の演算には、最大の計算要素として $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}$ が必要であり、さらに、情報行列の場合と同様に母分散すなわち分散成分の真値の情報が必要であるところから、実用性という観点からは、より簡略化された形態への変形の必要性が示唆される。

2.5 要 約

従来、分散成分の REML 推定量の共分散行列として Fisher (期待) 情報行列の逆行列が知られているが、この逆行列は抽出 (共) 分散の大標本 - 漸近値を与える。そこで、本章では、REML 推定値を事前情報とする MIVQUE 推定値と REML 推定値との同値性に着目し、残差効果および一変量効果を含む基本混合線形モデルを仮定して、母分散の情報に加えて REML 推定量自体の情報をも取り込んだ一抽出共分散行列 V_1 を導出した。この共分散行列 V_1 には、情報行列の逆行列の場合とは異なり、 $\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})$ および $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}$ の項に加えて $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}$ および $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}$ の項が含まれた。モンテカルロシミュレーションにより、 V_1 行列の妥当性について数値的検討を加えたところ、 V_1 行列による推定値は実現値と極めて良好に一致し、また、標本サイズを一定にした場合の当該推定値には標本の違いによるバラツキがほとんど認められなかった。よって、 V_1 行列は、REML 推定量の抽出 (共) 分散の特性をより詳細に明らかにしていく上で、情報行列の逆行列よりもより有効な理論式であると考えられた。しかし、 V_1 行列の計算負荷は相対的に大きいところから、より簡便な形態への変形の必要性が示唆された。

第3章 擬似分散アプローチに基づく REML 推定量の抽出共分散行列

3.1 緒言

Patterson と Thompson (1971) の REML 法による分散成分推定量 (REML 推定量) の抽出 (共) 分散の算出に関しては、これまでに、Fisher (期待) 情報行列の逆行列をとる方法すなわち情報行列アプローチが確立されている (例えば, Corbeil と Searle, 1976)。しかし、REML 推定量の情報行列アプローチによる (共) 分散は、大標本理論に基づく漸近値であることが知られている (Searle, 1970, 1979; Corbeil と Searle, 1976)。そこで、第2章において、REML 推定値を事前情報とする MIVQUE 推定のアプローチ (LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) に着目することによって、REML 推定量の抽出 (共) 分散を表す共分散行列 \mathbf{V}_1 を導出した。 \mathbf{V}_1 行列の各要素には、母分散の情報のみならず REML 推定量そのものの情報が取り込まれており、最大の計算要素として $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}$ までもが含まれた。したがって、この \mathbf{V}_1 行列については、情報行列の逆行列の場合に比べてより適切な多くの情報が導入された形態であると捉えうる。事実、先の数値シミュレーションではこのような見解を強く支持する結果が得られ、 \mathbf{V}_1 行列は、REML 推定値の抽出 (共) 分散の数値的特性をより詳細に明らかにしていく上で有用な形態を呈していると考えられる。

しかしながら、家畜集団をはじめとする実際の母集団に関して分散成分の真値が事前に既知であることは極めて稀であり、また、大容量のデータセットを対象とする場合には、 $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4$ の演算を行うことはほぼ不可能に近い。

そこで、本章では、大標本理論を導入し、母分散の推定量が母分散に等しいと仮定したオペレーションによってより簡略化された構造の抽出共分散行列を導く手法 (擬似分散アプローチ; Pseudo Variance Approach; PVA と呼ぶ) を提案する。さらに、この PVA 手法を前章で導出した \mathbf{V}_1 行列に適用し、抽出共分散の新たな形態を導くとともに、得られた共分散行列と従来の Fisher 情報行列アプローチによる共分散行列との間の理論的關係を明らかにする。

3.2 理論

3.2.1 MIVQUE 2 次形式の擬似期待値

混合線形モデルを

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}$$

ただし,

\mathbf{y} : 観測値の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{b} : 母数効果の $p \times 1$ ベクトル

\mathbf{u} : 個体の効果のような変量効果の $q \times 1$ ベクトル

\mathbf{e} : 残差効果 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{X} および \mathbf{Z} : それぞれ $N \times p$ および $N \times q$ の計画行列,
と仮定する。このとき、母数効果を吸収した後の混合モデル方程式は、

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}} &= (\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r)^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{y} \\ &\equiv \mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{y}\end{aligned}$$

ただし,

\mathbf{M} : 母数効果の吸収を示す $N \times N$ 射影行列

\mathbf{G}^{-1} : $\text{Var}(\mathbf{u}) = \mathbf{G}\sigma_u^2$ における \mathbf{G} 行列の $q \times q$ 逆行列

\mathbf{C} : 母数効果を吸収した混合モデル方程式の係数行列の
 $q \times q$ 逆行列

r : 分散比 $r = \sigma_e^2/\sigma_u^2$; $\text{Var}(\mathbf{e}) = \mathbf{I}\sigma_e^2$

σ_u^2 および σ_e^2 : それぞれ分散成分のパラメータ,
と表される。

そこで、いま、REML 推定量を事前情報とする MIVQUE 2 次形式の期待値を考えれば、

$$\mathbf{E}(\mathbf{s}) \equiv \mathbf{E} \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_u^2 \\ \sigma_e^2 \end{bmatrix} \equiv \mathbf{T}\boldsymbol{\theta}$$

ただし,

$$t_{11} = q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2$$

$$t_{12} = \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}$$

$$t_{21} = q\tilde{r} - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2$$

$$t_{22} = N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}$$

\tilde{r} : 分散成分の REML 推定量 ($\tilde{\sigma}_u^2$ および $\tilde{\sigma}_e^2$) の比; $\tilde{\sigma}_e^2/\tilde{\sigma}_u^2$,

となるが、さらに $E(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y})$ を書き下せば、

$$\begin{aligned} E(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) &= \left[q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 \right] \sigma_u^2 \\ &\quad + \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} \right] \sigma_e^2 \\ &= q\sigma_u^2 - 2\left\{ \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{\sigma}_e^2/\tilde{\sigma}_u^2 \right\} \sigma_u^2 + \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{\sigma}_e^4/\tilde{\sigma}_u^4 \right] \sigma_u^2 \\ &\quad + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2 - \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{\sigma}_e^2/\tilde{\sigma}_u^2 \right] \sigma_e^2 \end{aligned} \quad (3.1)$$

と表される。

次に、ここで、REML 推定量が本来は未知である分散成分の真値に等しいと仮定すれば、すなわち、

$$\tilde{\theta} = \theta$$

と置けば、(3.1) 式は、さらに、

$$\begin{aligned} E(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) &\Rightarrow q\sigma_u^2 - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\ &\quad + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\ &= q\sigma_u^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

と変形される。この (3.2) 式で示した結果を、2 次形式 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ の擬似期待値 (Pseudo Expectation, PE) と呼び (Schaeffer, 1986)、記号 $\mathcal{E}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y})$ により記述する。同様に、 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ の PE は、

$$\mathcal{E}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) = \{N - r(\mathbf{X})\}\sigma_e^2 \quad (3.3)$$

で与えられる。なお、これらの PE の形態は、(2.5) 式として記述した EM-REML 推定式の基礎を形成している。

3.2.2 PVA による抽出共分散行列の導出

第2章で導出した、MIVQUE アルゴリズムによる REML 推定量の抽出共分散行列 V_1 は、

$$V_1 = \text{Var}(\hat{\theta}) = T^{-1} \text{Var}(s) T^{-1'}$$

ただし、

$$\text{Var}(s) = \begin{bmatrix} \text{Var}(y'Q_1y) & \text{Cov}(y'Q_1y, y'Q_2y) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(y'Q_2y) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \text{Var}(y'Q_1y) \\ \text{Cov}(y'Q_1y, y'Q_2y) \\ \text{Var}(y'Q_2y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_u^4 \\ \sigma_u^2 \sigma_e^2 \\ \sigma_e^4 \end{bmatrix}$$

$$k_{11} = 2 \left[q - 4\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + 6\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 - 4\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^3 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^4 \right]$$

$$k_{12} = 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} + 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^2 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^3 \right]$$

$$k_{13} = 2 \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\} - 2\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r} + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\tilde{r}^2 \right]$$

$$k_{21} = 2 \left[q\tilde{r} - 3\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 + 3\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^3 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^4 \right]$$

$$k_{22} = 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} - 2\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^3 \right]$$

$$k_{23} = 2 \left[\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r} - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\tilde{r}^2 \right]$$

$$k_{31} = 2 \left[q\tilde{r}^2 - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^4 \right]$$

$$k_{32} = 4 \left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^3 \right]$$

$$k_{33} = 2 \left[N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\tilde{r}^2 \right],$$

として与えられた。そこで、いま、2 次形式のベクトル s の分散 $\text{Var}(s)$ の代わりに、前節のごとく、REML 推定量が分散成分の真値に等しいと仮定することによって、いわば

\mathbf{s} の擬似分散 (Pseudo Variance, PV; $\text{Var}(\mathbf{s})$) と呼ぶべき形態の利用を考える。すなわち、2 次形式 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ の分散 $\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y})$ は、

$$\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) = k_{11}\sigma_u^4 + k_{12}\sigma_u^2\sigma_e^2 + k_{13}\sigma_e^4$$

で与えられたが、ここで、REML 推定量と分散成分の真値が等しいと仮定することにより、 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ の擬似分散を、

$$\begin{aligned}\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) &= 2\left[q\sigma_u^4 - 4\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_u^2\sigma_e^2 + 6\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4 - 4\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\sigma_e^6/\sigma_u^2\right. \\ &\quad \left.+ \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\sigma_e^8/\sigma_u^2\right. \\ &\quad \left.+ 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_u^2\sigma_e^2 - 6\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4 + 6\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\sigma_e^6/\sigma_u^2\right. \\ &\quad \left.- 4\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\sigma_e^8/\sigma_u^2\right. \\ &\quad \left.+ \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4 - 2\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^3\}\sigma_e^6/\sigma_u^2 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}\sigma_e^8/\sigma_e^4\right] \\ &= 2\left[q\sigma_u^4 - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_u^2\sigma_e^2 + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\sigma_e^4\right]\end{aligned}$$

として表現する。同様に、 $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}$ と $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ の擬似共分散および $\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}$ の擬似分散を、結果的に、それぞれ、

$$\text{Cov}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}, \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) = 2\{q\sigma_u^2\sigma_e^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^4\}$$

および

$$\text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) = 2\{N - r(\mathbf{X})\}\sigma_e^4$$

と表す。なお、このように、REML 推定量が真値に等しいと置くオペレーションは、

$$N \rightarrow \infty, \quad \tilde{\boldsymbol{\theta}} \rightarrow \boldsymbol{\theta}$$

に基づき、REML 推定量の抽出 (共) 分散を大標本漸近値として定義することを意味する。

そこで、これらの MIVQUE 2 次形式の擬似 (共) 分散の情報を用いて REML 推定量の共分散行列を定義すれば、

$$\text{Var}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{T}^{-1}\text{Var}(\mathbf{s})\mathbf{T}^{-1'} \quad (3.4)$$

ただし,

$$\text{Var}(\mathbf{s}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}) & \text{Cov}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y}, \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y}) \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

と記述される。なお、本節で導入した、擬似(共)分散の概念に基づき(3.4)式を導くためのアプローチを PVA (Pseudo Variance Approach; 擬似分散アプローチ)と呼ぶこととし、(3.4)式を PVA による REML 推定量の共分散行列 \mathbf{V}_2 と呼ぶ。

3.2.3 \mathbf{V}_2 行列と Fisher 情報行列の逆行列との関係

PVA により導出された \mathbf{V}_2 行列は、前章で導出した \mathbf{V}_1 行列と比較すると、REML 推定量が分散成分の真値に置換されている分、形態的には簡略化されており、その計算はより容易となる。では、 \mathbf{V}_2 行列は、情報行列のアプローチによる漸近的な共分散行列とは理論的にどのような関係にあるのであろうか? 以下に、(3.4)式と(2.8)式の理論的關係を明らかにする。ただし、理論展開の都合上、ここでは、これまで取り扱ってきた

$$\mathbf{s} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y} \\ \mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

なる形態の 2 次形式すなわち「観測値ベクトルの 2 次形式」ではなく、「混合モデル方程式の解ベクトルの 2 次形式」すなわち

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}} \\ \hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}} \end{bmatrix}$$

を取り扱う。なお、最初に \mathbf{r} を用いた REML 推定法について述べる。次に、 \mathbf{r} を利用した PVA を記述して \mathbf{V}_2 行列と同等な REML 推定量の抽出共分散行列 \mathbf{V}_2^* を導出し、最後に、 \mathbf{V}_2^* 行列と情報行列の逆行列との関係を明らかにする。

いま、混合モデル方程式

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

を考えるが、分散成分の比 $r = \sigma_e^2/\sigma_u^2$ は通常は未知であるため、ここでは r を REML 推定量に基づく分散比 $\tilde{r} = \tilde{\sigma}_e^2/\tilde{\sigma}_u^2$ に置き換えた形態、すなわち

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\tilde{r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{y} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

をも考える。ここで、混合モデル方程式 (3.6) の $\hat{\mathbf{b}}$ に関する方程式を展開・整理し、

$$\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$$

とした後、 $\hat{\mathbf{u}}$ に関する方程式に吸収すると、母数効果を吸収した混合モデル方程式

$$\{\mathbf{Z}'(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}')\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}}\}\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{Z}'(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}')\mathbf{y} \quad (3.7)$$

が得られる。そこで、

$$\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \equiv \mathbf{M}$$

と置くと、(3.7) 式は

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{y}$$

と表される。なお、この \mathbf{M} は母数効果の吸収を示す射影行列である。

さらに、

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})^{-1} \equiv \mathbf{C}$$

と置けば、

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{y}$$

$$\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$$

$$= \mathbf{M}(\mathbf{y} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}})$$

と書ける。

また、

$$\mathbf{C}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}}) = \mathbf{I}$$

より、

$$\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z} = \mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}}$$

なる関係が成立する。

以上の情報を用いれば、混合モデル方程式の解 $\hat{\mathbf{u}}$ 、すなわち \mathbf{u} の最良線形不偏予測量のベクトルの分散は、 $\mathbf{V}_y = \text{Var}(\mathbf{y})$ として、

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\mathbf{u}}) &= \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\mathbf{V}_y\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C} \\
 &= \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\sigma_u^2 + \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\sigma_e^2 \\
 &= (\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\sigma_u^2 + (\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{C}\sigma_e^2 \\
 &= \mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\sigma_u^2 - \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_u^2 + \mathbf{C}\sigma_e^2 - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_e^2 \\
 &= (\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})'\sigma_u^2 - (\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_u^2 + \mathbf{C}\sigma_e^2 - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_e^2 \\
 &= (\mathbf{G} - 2\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}^2)\sigma_u^2 + (\mathbf{C} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\sigma_e^2
 \end{aligned}$$

により与えられる。そこで、分散成分の REML 推定量を真値と見なせば、 $\hat{\mathbf{u}}$ の分散は

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\mathbf{u}}) &= \mathbf{G}\sigma_u^2 - 2\mathbf{C}\sigma_e^2 + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^4/\sigma_u^2 + \mathbf{C}\sigma_e^2 - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\
 &= \mathbf{G}\sigma_u^2 - \mathbf{C}\sigma_e^2
 \end{aligned}$$

として得られる。

同様の手法により、残差効果の最良線形不偏予測量のベクトル $\hat{\mathbf{e}}$ の分散 $\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})$ および $\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})$ は、

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\mathbf{e}}) &= (\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})\mathbf{V}_y(\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})' \\
 &= (\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} \\
 &\quad - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})\sigma_u^2 \\
 &\quad + (\mathbf{M} - 2\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})\sigma_e^2 \\
 &= \left[\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} - \{\mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{Z}'\mathbf{M}\}' \right. \\
 &\quad \left. - \mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{Z}'\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M} \right]\sigma_u^2 \\
 &\quad + \left[\mathbf{M} - 2\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M} \right]\sigma_e^2 \\
 &= (\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \text{MZGZ'MZCZ'M} - \text{MZCZ'MZCZ'M}\tilde{r})\sigma_u^2 \\
& + (\text{M} - 2\text{MZCZ'M} + \text{MZCZ'M} - \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r})\sigma_e^2 \\
= & \left[2\text{MZCZ'M}\tilde{r} - \text{MZGZ'M} + \{\text{MZ}(\text{G} - \text{C}\tilde{r})\text{Z'M}\}' \right. \\
& \left. - \text{MZ}(\text{I} - \text{CG}^{-1}\tilde{r})\text{CZ'M}\tilde{r} \right] \sigma_u^2 \\
& + (\text{M} - \text{MZCZ'M} - \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r})\sigma_e^2 \\
= & \left[2\text{MZCZ'M}\tilde{r} - \text{MZGZ'M} + \text{MZGZ'M} - \text{MZCZ'M}\tilde{r} \right. \\
& \left. - \text{MZCZ'M}\tilde{r} + \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r}^2 \right] \sigma_u^2 \\
& + (\text{M} - \text{MZCZ'M} - \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r})\sigma_e^2 \\
= & \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r}^2\sigma_u^2 \\
& + (\text{M} - \text{MZCZ'M} - \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r})\sigma_e^2
\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}
\text{Var}(\hat{\mathbf{e}}) &= \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\
&+ (\text{M} - \text{MZCZ'M})\sigma_e^2 - \text{MZCG}^{-1}\text{CZ'M}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\
&= (\text{M} - \text{MZCZ'M})\sigma_e^2
\end{aligned}$$

により与えられ、また、両者の共分散は、

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{e}}) &= \text{CZ'MV}_y(\text{M} - \text{MZCZ'M})' \\
&= (\text{CZ'MZGZ'M} - \text{CZ'MZGZ'MZCZ'M})\sigma_u^2 \\
&+ (\text{CZ'M} - \text{CZ'MZCZ'M})\sigma_e^2 \\
&= \{(\text{G} - \text{C}\tilde{r})\text{Z'M} - (\text{G} - \text{C}\tilde{r})\text{Z'MZCZ'M}\}\sigma_u^2 \\
&+ \{\text{CZ'M} - (\text{I} - \text{CG}^{-1}\tilde{r})\text{CZ'M}\}\sigma_e^2 \\
&= (\text{GZ'M} - \text{CZ'M}\tilde{r} - \text{GZ'MZCZ'M} + \text{CZ'MZCZ'M}\tilde{r})\sigma_u^2 \\
&+ (\text{CZ'M} - \text{CZ'M} + \text{CG}^{-1}\text{CZ'M}\tilde{r})\sigma_e^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\mathbf{GZ}'\mathbf{M} - \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} - \{\mathbf{MZ}(\mathbf{G} - \mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\}' + (\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}})\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} \right] \sigma_u^2 \\
&\quad + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_e^2 \\
&= (\mathbf{GZ}'\mathbf{M} - \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{GZ}'\mathbf{M} + \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}^2) \sigma_u^2 \\
&\quad + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_e^2 \\
&= (\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}^2) \sigma_u^2 + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\tilde{\mathbf{r}}\sigma_e^2
\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{e}}') &= \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_e^2 - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_e^4/\sigma_u^2 + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_e^4/\sigma_u^2 \\
&= \mathbf{CZ}'\mathbf{M}\sigma_e^2 \\
\text{Cov}(\hat{\mathbf{e}}, \hat{\mathbf{u}}') &= \mathbf{MZC}\sigma_e^2
\end{aligned}$$

として与えられる。

次に、2 次形式 $\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}$ の期待値は、

$$\begin{aligned}
E(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}) &= \text{tr}\{\mathbf{G}^{-1}\text{Var}(\hat{\mathbf{u}})\} \\
&= \text{tr}\left[\mathbf{G}^{-1}\{(\mathbf{G} - 2\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}^2)\sigma_u^2 + (\mathbf{C} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\sigma_e^2\}\right] \\
&= \text{tr}(\mathbf{I}_q - 2\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}}^2)\sigma_u^2 \\
&\quad + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\tilde{\mathbf{r}})\sigma_e^2 \\
&= \{q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{\mathbf{r}} + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{\mathbf{r}}^2\}\sigma_u^2 \\
&\quad + \{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{\mathbf{r}}\}\sigma_e^2 \\
&\equiv t_{11}^*\sigma_u^2 + t_{12}^*\sigma_e^2
\end{aligned}$$

であるが、さらに擬似期待値を考えれば、

$$\mathcal{E}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}) = q\sigma_u^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2$$

となる。一方、2 次形式 $\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}$ の期待値および擬似期待値は、

$$E(\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) = \text{tr}\{\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})\}$$

$$\begin{aligned}
&= \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})\tilde{r}^2\sigma_u^2 \\
&\quad + \{\text{tr}(\mathbf{M}) - \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}) - \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M})\tilde{r}\}\sigma_e^2 \\
&= \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C})\tilde{r}^2\sigma_u^2 \\
&\quad + \{\text{tr}(\mathbf{M}) - \text{tr}(\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}) - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{C})\tilde{r}\}\sigma_e^2 \\
&= \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{r})\mathbf{C}\}\tilde{r}^2\sigma_u^2 \\
&\quad + \left[\text{tr}(\mathbf{M}) - \text{tr}(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{r}) - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\tilde{r})\mathbf{C}\}\tilde{r}\right]\sigma_e^2 \\
&= \{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3\}\sigma_u^2 \\
&\quad + \{\text{tr}(\mathbf{M}) - \text{tr}(\mathbf{I}_q) + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r} + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2\} \\
&= \{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^3\}\sigma_u^2 \\
&\quad + \{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\tilde{r}^2\}\sigma_e^2 \\
&\equiv t_{21}^*\sigma_u^2 + t_{22}^*\sigma_e^2 = t_{12}^*\tilde{r}^2\sigma_u^2 + t_{22}^*\sigma_e^2 \\
\mathcal{E}(\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) &= \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r\sigma_e^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^6/\sigma_u^4 \\
&\quad + \{N - r(\mathbf{X}) - q\}\sigma_e^2 + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^6/\sigma_u^4 \\
&= \{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r\}\sigma_e^2
\end{aligned}$$

として与えられる。

よって、分散成分の MIVQUE および REML 推定式は、それぞれ

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_u^2 \\ \hat{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}^* & t_{12}^* \\ t_{21}^* & t_{22}^* \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}} \\ \hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

および

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_u^2 \\ \tilde{\sigma}_e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q & -\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) \\ 0 & N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}} \\ \hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}} \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

として与えられる。これら (3.8) 式および (3.9) 式は、それぞれ (2.10) 式および (2.5) 式で示された MIVQUE および REML の推定式とは異なる形態を取っているが、同一の推定量を与える。

また、この場合の各 2 次形式の擬似 (共) 分散:

$$\text{Var}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}) & \text{Cov}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) \end{bmatrix}$$

は、それぞれ、母分散で REML 推定量を置換した $\text{Var}(\hat{\mathbf{u}})$ および $\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})$ を用いて、

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}) &= 2\text{tr}\{\mathbf{G}^{-1}\text{Var}(\hat{\mathbf{u}})\mathbf{G}^{-1}\text{Var}(\hat{\mathbf{u}})\} \\ &= 2\text{tr}\left[\{\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{G}\sigma_u^2 - \mathbf{C}\sigma_e^2)\}^2\right] \\ &= 2\text{tr}\{(\mathbf{I}\sigma_u^2 - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^2)^2\} \\ &= 2\text{tr}(\mathbf{I}_q\sigma_u^4 - 2\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^2\sigma_u^2 + \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\sigma_e^4) \\ &= 2\{q\sigma_u^4 - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^2\sigma_u^2 + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\sigma_e^4\} \\ &= 2\sigma_u^4\left[q - 2\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}r^2\right] \\ &\equiv 2\sigma_u^4 f(r)_{11} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) &= 2\text{tr}\{\mathbf{G}^{-1}\text{Cov}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{e}}')\text{Cov}(\hat{\mathbf{e}}, \hat{\mathbf{u}}')\} \\ &= 2\{\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})\}\sigma_e^4 \\ &= 2\sigma_u^4\left[\text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}) - \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}\right]r^2 \\ &\equiv 2\sigma_u^4 r^2 f(r)_{12} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}) &= 2\text{tr}\{\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})\text{Var}(\hat{\mathbf{e}})\} \\ &= 2\{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})r^2\}\sigma_e^4 \\ &= 2\sigma_u^4\left[N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}r^2\right]r^2 \\ &\equiv 2\sigma_u^4 r^2 f(r)_{22} \end{aligned}$$

として表される。よって、これらの結果より、2 次形式のベクトル \mathbf{r} を用いた記述による REML 分散成分推定量の抽出 (共) 分散:

$$\text{Var}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \begin{bmatrix} \text{Var}(\tilde{\sigma}_u^2) & \text{Cov}(\tilde{\sigma}_u^2, \tilde{\sigma}_e^2) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\tilde{\sigma}_e^2) \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

は、 $\mathbf{T}^* = \{t_{ij}^*\} (i, j = 1 \sim 2)$ として、

$$\mathbf{V}_2^* = \text{Var}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{T}^{*-1} \text{Var}(\mathbf{r}) \mathbf{T}^{*-1'} \quad (3.11)$$

により与えられる。この (3.11) 式は、先に示した \mathbf{V}_2 行列すなわち (3.4) 式とは形態的に異なるが、これら両式は同等な関係にある。

そこで、最後に、この \mathbf{V}_2^* 行列が Fisher 情報行列の逆行列に対していかなる関係にあるかを示す。一般に、 2×2 正則行列 \mathbf{B} の逆行列は、

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{-1} &= \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \begin{bmatrix} b_{22} & -b_{12} \\ -b_{21} & b_{11} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

で与えられるので、(3.11) 式における \mathbf{T}^{*-1} は、

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^{*-1} &= \begin{bmatrix} t_{11}^* & t_{12}^* \\ t_{21}^* & t_{22}^* \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} f(r)_{11} & f(r)_{12} \\ r^2 f(r)_{12} & f(r)_{22} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} f(r)_{22} & -f(r)_{12} \\ -r^2 f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と書ける。

さらに、2 次形式 \mathbf{r} の擬似 (共) 分散行列 $\text{Var}(\mathbf{r})$ は、

$$\text{Var}(\mathbf{r}) = 2\sigma_u^4 \begin{bmatrix} f(r)_{11} & f(r)_{12}r^2 \\ r^2 f(r)_{12} & r^2 f(r)_{22} \end{bmatrix}$$

と書けるので、(3.11) 式は、

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^{*-1} \text{Var}(\mathbf{r}) \mathbf{T}^{*-1'} &= \frac{1}{f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} f(r)_{22} & -f(r)_{12} \\ -r^2 f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \\ &\quad 2\sigma_u^4 \begin{bmatrix} f(r)_{11} & r^2 f(r)_{12} \\ r^2 f(r)_{12} & r^2 f(r)_{22} \end{bmatrix} \frac{1}{f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} f(r)_{22} & -r^2 f(r)_{12} \\ -f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\sigma_u^4}{(f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2)^2} \\
&\quad \begin{bmatrix} f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2 & r^2 f(r)_{12}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}f(r)_{22} \\ \text{Sym.} & -r^4 f(r)_{12}^2 + r^2 f(r)_{11}f(r)_{22} \end{bmatrix} \\
&\quad \begin{bmatrix} f(r)_{22} & -r^2 f(r)_{12} \\ -f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \\
&= \frac{2\sigma_u^4}{(f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2)^2} \\
&\quad \begin{bmatrix} (f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2)f(r)_{22} & -(f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2)f(r)_{12}r^2 \\ \text{Sym.} & (-r^4 f(r)_{12}^2 + r^2 f(r)_{11}f(r)_{22})f(r)_{11} \end{bmatrix} \\
&= \frac{2\sigma_u^4}{f(r)_{11}f(r)_{22} - r^2 f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} f(r)_{22} & -r^2 f(r)_{12} \\ -r^2 f(r)_{12} & r^2 f(r)_{11} \end{bmatrix} \\
&= \frac{2\sigma_u^4}{r^{-2}f(r)_{11}f(r)_{22} - f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} r^{-2}f(r)_{22} & -f(r)_{12} \\ -f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \tag{3.12}
\end{aligned}$$

と変形される。一方、(2.7) 式で与えられた Fisher 情報行列は、 $f(r)_{ij}$ を用いれば、

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}(\theta) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sigma_u^{-4} f(r)_{11} & r\sigma_u^{-2}\sigma_e^{-2} f(r)_{12} \\ \text{Sym.} & \sigma_e^{-4} f(r)_{22} \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{2\sigma_u^4} \begin{bmatrix} f(r)_{11} & f(r)_{12} \\ f(r)_{12} & r^{-2}f(r)_{22} \end{bmatrix} \tag{3.13}
\end{aligned}$$

と表されるので、その逆行列すなわち Fisher 情報行列のアプローチに基づく REML 推定量の漸近的共分散行列は、

$$[\mathbf{I}(\theta)]^{-1} = \frac{2\sigma_u^4}{r^{-2}f(r)_{11}f(r)_{22} - f(r)_{12}^2} \begin{bmatrix} r^{-2}f(r)_{22} & -f(r)_{12} \\ -f(r)_{12} & f(r)_{11} \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

と書ける。

よって、以上より、(3.12) 式と (3.14) 式が等しいことは明らかであり、 \mathbf{V}_2^* 行列および \mathbf{V}_2 行列は、Fisher 情報行列に基づく漸近的共分散行列と同等な大標本漸近行列であると結論づけられる。

3.3 数値例

ここでは、Henderson (1986) により取り上げられた個体モデル構造の小データを用いて、 \mathbf{V}_2 行列の算出に関する数値例を示す。

当該データの場合、混合線形モデルは、

$$y = Xb + Za + e$$

ただし、

y : 観測値の $N \times 1$ ベクトル

b : 母数効果の $p \times 1$ ベクトル

a : 個体の育種価 (変量効果) の $q \times 1$ ベクトル

e : 残差効果 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

X および Z : それぞれ $N \times p$ および $N \times q$ の計画行列,

と書け、 y 、 X および Z は、具体的には、それぞれ

$$y' = [14.3 \quad 17.5 \quad 14.6 \quad 14.7 \quad 15.7 \quad 15.2 \quad 21.8 \quad 20.9 \quad 21.1]$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad Z = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

である。また、共分散行列 G は、ここでは分析対象個体に関する相加的血縁行列 A として定義され、

$$A = \begin{bmatrix} 1 & .25 & .625 & .625 & .8125 & .8125 & .4375 & .625 & .3125 & 0 \\ & 1 & .625 & .625 & .4375 & .4375 & .8125 & .625 & .3125 & 0 \\ & & 1.125 & .625 & .875 & .875 & .875 & .875 & .5625 & 0 \\ & & & 1.125 & .625 & .625 & .625 & .875 & .3125 & 0 \\ & & & & 1.3125 & .84375 & .65625 & .75 & .4375 & 0 \\ & & & & & 1.3125 & .65625 & .75 & .4375 & 0 \\ & & & & & & 1.3125 & .75 & .4375 & 0 \\ & & & & & & & 1.3125 & .4375 & 0 \\ & & & & & & & & 1 & 0 \\ & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

として与えられている。

さらに、

$$N = 9$$

$$p = r(\mathbf{X}) = 2$$

$$q = 10$$

であり、また、 \mathbf{A} 行列の逆行列 \mathbf{A}^{-1} および射影行列 \mathbf{M} は

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 3.1333 & .7333 & .0667 & -1 & -1.0667 & -1.0667 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 2.6 & -.4667 & -1 & 0 & 0 & -1.0667 & 0 & 0 & 0 \\ & & 4.5193 & .5714 & -1.0667 & -1.0667 & -1.0667 & -1.1429 & -.6957 & 0 \\ & & & 2.5714 & 0 & 0 & 0 & -1.1429 & 0 & 0 \\ & & & & 2.1333 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 2.1333 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & 2.1333 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 2.2857 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 1.3913 & 0 \\ & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} .8864 & -.0909 & -.1364 & -.0909 & -.1136 & -.1364 & -.1136 & -.0909 & -.1136 \\ & .7273 & .0909 & -.2727 & -.0909 & .0909 & -.0909 & -.2727 & -.0909 \\ & & .6364 & .0909 & -.1364 & -.3636 & -.1364 & .0909 & -.1364 \\ & & & .7273 & -.0909 & .0909 & -.0909 & -.2727 & -.0909 \\ & & & & .8864 & -.1364 & -.1136 & -.0909 & -.1136 \\ & & & & & .6365 & -.1364 & .0909 & -.1364 \\ & & & & & & .8864 & -.0909 & -.1136 \\ & & & & & & & .7273 & -.0909 \\ & & & & & & & & .8864 \end{bmatrix}$$

である。そこで、REML 反復推定に際しての分散成分 σ_a^2 および σ_e^2 の初期値を、例えばそれぞれ 5 および 6 と設定すれば、 \mathbf{C} 行列は、

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} .6382 & .1798 & .3569 & .3685 & .4495 & .4445 & .2747 & .3483 & .2338 & .1403 \\ & .6157 & .3816 & .4090 & .2857 & .3062 & .4835 & .3890 & .2311 & .1689 \\ & & .6823 & .3638 & .5147 & .4976 & .4894 & .5012 & .4014 & .2006 \\ & & & .7105 & .3429 & .3776 & .4268 & .5023 & .2199 & .1849 \\ & & & & .7688 & .4586 & .3705 & .4207 & .3493 & .1812 \\ & & & & & .7348 & .3994 & .4302 & .3155 & .1863 \\ & & & & & & .7842 & .4543 & .2807 & .2017 \\ & & & & & & & .7535 & .3105 & .2019 \\ & & & & & & & & .6613 & .1409 \\ & & & & & & & & & .5577 \end{bmatrix}$$

となり、このとき、 $\text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})$ の値は、

$$\text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}) = 6.4131$$

となる。最終的に収束に至った時点での両 REML 推定値、混合モデル方程式の解ベクトル $\hat{\mathbf{b}}$ および $\hat{\mathbf{a}}$ は、それぞれ、

$$\tilde{\sigma}_a^2 = 4.9549$$

$$\tilde{\sigma}_e^2 = 6.7232$$

$$\hat{\mathbf{b}}' = [20.1861 \quad -1.1681]$$

$$\hat{\mathbf{a}}' = [-1.0513 \quad -1.3973 \quad -1.0502 \quad -.9512 \quad -1.8897 \quad -1.3330 \\ -1.2900 \quad .2064 \quad 0.3084 \quad 1.3790]$$

となる。また、このときの当該 2 次形式、 $\text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})$ および $\text{tr}\{(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})^2\}$ の値は、それぞれ、

$$\mathbf{y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{y} = 10.5669$$

$$\mathbf{y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{y} = 47.0627$$

$$\text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}) = 5.7981$$

$$\text{tr}\{(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})^2\} = 3.5293$$

となる。

よって、REML 推定値の抽出 (共) 分散の PVA による推定値は、 \mathbf{V}_2 行列における REML 推定量の項に REML 推定値を代入することにより、

$$\widehat{\text{Var}}\{(\tilde{\sigma}_a^2 \quad \tilde{\sigma}_e^2)'\} = \mathbf{T}^{-1}\text{Var}(\mathbf{s})\mathbf{T}^{-1'} \\ = \begin{bmatrix} .7630 & 1.0094 \\ 1.8584 & 3.4978 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 37.4634 & 91.2544 \\ 91.2544 & 316.2117 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} .7630 & 1.0094 \\ 1.8584 & 3.4978 \end{bmatrix}^{-1'} \\ = \begin{bmatrix} 216.6568 & -115.1142 \\ -115.1142 & 87.0088 \end{bmatrix}$$

として与えられる。

一方、期待情報行列の逆行列の母分散の項に REML 推定値を代入すれば、

$$\widehat{\text{Var}}\{(\tilde{\sigma}_a^2 \quad \tilde{\sigma}_e^2)'\} = [\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta})]^{-1} \\ = \begin{bmatrix} .0155 & .0206 \\ .0206 & .0390 \end{bmatrix}^{-1} \\ = \begin{bmatrix} 216.6568 & -115.1142 \\ -115.1142 & 87.0088 \end{bmatrix}$$

であり、 V_2 行列による推定値と同値をとることが分かる。

3.4 考 察

第2章で導出した、REML 法 (Patterson と Thompson, 1971) による分散成分推定量の MIVQUE アルゴリズム (LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) に基づく抽出共分散行列 V_1 には、分散成分の真値と REML 推定量がともに明確に区別された形で考慮されており、 V_1 行列は、REML 推定量の抽出 (共) 分散を記述した理論式として、従来の Fisher 情報行列アプローチに基づく共分散行列よりも、より適切な形態を呈していると考えられる。しかしながら、分析対象の属性に関する標本データが収集される母集団での母分散は、通常は未知である場合が一般的である。さらに、 V_1 行列によって抽出 (共) 分散を求める上では最大で $(G^{-1}C)^4$ の演算が必要とされ、大容量データを分析の対象とする場合には、計算に要する時間およびコスト面での負荷が非常に大きくなると予想される。

そこで、本章では、大標本理論に基づく PVA 手法すなわち REML 推定量が分散成分の真値に等しいと置くオペレーションを提案し、 V_1 行列に対して PVA 手法を適用することによって、より簡略化された形態の共分散行列 V_2 を導いた。その結果、 V_2 の要素には $G^{-1}C$ および $(G^{-1}C)^2$ のトレース項のみが出現し、最大で $(G^{-1}C)^4$ のトレース項を含む V_1 行列の場合に比べて計算負荷自体は大きく軽減された。なお、通常の REML 分析の場合のように、一標本からのみ REML 推定値を得て、それらの推定分散および標準誤差を求める場合には、(3.4) 式に含まれる REML 推定量の項に標本から得られた REML 推定値を代入して計算することになる。

第2章で V_1 行列の導出を行った際には、あわせてその特性を数値シミュレーションにより検証した。 V_1 行列は、REML 法および MIVQUE 法に関する従来の理論的到達点 (LaMotte, 1970, 1971, 1973; Searle, 1970, 1979; Patterson と Thompson, 1971; Rao, 1971, 1972, 1979; Hocking と Kutner, 1975; Corbeil と Searle, 1976; Harville, 1977) を踏襲し、また、2 次形式のキュミュラントに関する理論体系を正確に踏まえて導出されているので、その理論的妥当性は明白であるが、具体的な数値的特性までも理論的に詳しく解明するこ

とは、筆者にとっては現時点では難しい課題と考えられた。よって、第2章では、理論分析の手法に依らず、より容易な数値シミュレーションの手法を採用して、(2.11)式の妥当性および数値的な特性を明らかにした。一方、本章で導出した V_2 行列に関しては、そのような数値シミュレーションの手法による検証は実施せず、代わりに V_2 行列と同等である V_2^* 行列を取り上げて情報行列の逆行列との理論的關係について検討を加え、来歴の全く異なる両者が同等であることを明らかにした。したがって、このような事実から、本章で導いた V_2 行列の各要素は、REML 推定量の抽出(共)分散の漸近値としての数値的特性を有していることが明らかとなり、 V_2 行列のもつ REML 推定量の抽出共分散の一形態としての価値は、情報行列に基づく抽出共分散のそれと同等であった。なお、 V_2 行列が Fisher 情報行列アプローチに基づく従来の共分散行列に対して前述のような理論的關係をとったという事実は、前章で採用した MIVQUE アルゴリズムの利用によって V_1 行列を導出したアプローチの理論的妥当性を別角度から裏付ける根拠としても、極めて重要な知見であると考えられる。

本章で提案した PVA 手法については、(2.1)式のような残差以外の変量効果として一種類の効果のみを含む混合線形モデルすなわち基本混合線形モデルの場合のみならず、より多数の変量効果を含むモデルや多形質モデルを対象とする ML 推定 (Hartley と Rao, 1967) および REML 推定への適用も可能である。PVA 手法は尤度関数に基づく方法ではないので、Fisher 情報行列アプローチの場合のように尤度関数およびその2階偏微分を必要としない。よって、この PVA アプローチによれば、比較的簡単な線形代数演算すなわち2次形式のセットの期待値および擬似分散・擬似共分散をとるオペレーションのみによって、推定量の抽出(共)分散の大標本漸近値が算出可能であるという点で、この手法は有用であると判断される。

さらに、前述したように、PVA 手法は尤度依存の方法ではないので、ML 法や REML 法以外の尤度に基づかない分散成分の推定法(による推定量)にも応用が可能である。例えば、家畜育種の分野においては、分散成分推定の対象となるデータセットは一般に大容量であるが、最近では次第に巨大容量のデータセットも取り扱われつつある。しかし、巨大容量のデータセットに対しては、REML 法では SPARSPAK (Chu ら, 1984) および

FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) などの疎行列演算ツールおよび最高性能の今日の計算機の利用下でも容易に対応できないか、あるいは極めて非効率的な演算しか実現できないと考えられている。そこで、巨大容量データセットを対象とする (共) 分散成分の推定法として、これまでに、Method R (Reverter ら, 1994)、Gibbs Sampler の手法 (例えば、Wang ら, 1993; Van Tassell ら, 1995) ならびに混合モデル方程式の係数行列の近似行列に基づく各種の PE 推定法 (Schaeffer, 1986; Van Raden と Jung, 1988; Iwaisaki, 1992) などが開発・提案されている。これらのうちで、PE 法は、擬似期待値の理論に基づく REML 類似の推定法であるが、尤度に基づく方法ではなく、PE 推定量の抽出 (共) 分散を求める際に尤度に基づく情報行列の理論を用いることはできない。しかし、このような PE 推定法に対しても PVA 技法の適用は可能であり、PE 推定量の大標本漸近抽出 (共) 分散の導出が可能であると考えられる。

このように、本章で提案した PVA 手法は、分散成分推定量の大標本漸近抽出 (共) 分散を導くための有効な手法であると考えられるが、本法により REML 推定量に関して導出された \mathbf{V}_2 行列の構造については、従来の Fisher 情報行列の逆行列と同等であることが知られた。このような事実から、 \mathbf{V}_2 行列の計算での演算負荷が未だ大きいことは明らかであり、とりわけ大容量データセットの分析のためには、より演算負荷の小さい抽出 (共) 分散推定手法の開発が必要と思われる。

3.5 要 約

本章では、大標本理論を導入して母分散の推定量が母分散に等しいと仮定し、分散成分推定量の抽出共分散行列の一形態を導くための擬似分散アプローチ (PVA) を提案した。この PVA 手法を、第 2 章で導出した MIVQUE アルゴリズムに基づく REML 推定量の抽出共分散行列 \mathbf{V}_1 に対して適用し、REML 推定量に関するより簡略化された抽出共分散行列 \mathbf{V}_2 (および \mathbf{V}_2^*) を導出した。その結果、 \mathbf{V}_2 行列での最大の計算要素は $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4\}$ から $\text{tr}\{(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2\}$ へと軽減され、この行列の各要素は母分散の関数として表された。そこで、 \mathbf{V}_2 行列の構造について理論的に解析したところ、この行列は多変量正規分布下で

の尤度関数に依存しないにもかかわらず、尤度由来の行列である Fisher 情報行列の逆行列と同等であることが明らかとなった。よって、大標本漸近抽出 (共) 分散行列の一形態を示す V_2 行列の演算負荷が未だ大きいことは明らかであり、更なる検討の必要性が示唆された。なお、本章で開発した PVA 手法は、尤度関数の概念に基づかず、しかも数学モデルの如何や変量因子の数によって適用範囲を限定されない一般的な手法であるところから、尤度関数に由来しない分散成分推定法である PE 法などでの大標本抽出 (共) 分散の定義・導出にも利用可能な実用的な手法と考えられた。

第4章 基本混合線形モデルに関する平均情報行列の一形態ならびに 制限最尤推定手法

4.1 緒言

分散成分の REML 点推定 (Patterson と Thompson, 1971) のための代表的なアルゴリズムは、REML 対数尤度関数の偏導関数を用いるアルゴリズム (Derivative, D) および偏導関数に依存しないアルゴリズム (Derivative-Free, DF) に大別され、それぞれが演算特性面で固有の利点を有する一方、同時に欠点をも合わせ持っている (Patterson と Thompson, 1971; Harville, 1977; Laird, 1982; Dempster ら, 1984; Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987; Harville と Callanan, 1990; Johnson と Thompson, 1995)。D アルゴリズムには、DF アルゴリズムでは用いられない対数尤度関数の 1 階および/あるいは 2 階偏導関数の情報を利用するという利点がある。しかし、EM アルゴリズム (Dempster ら, 1977) を用いる 1 階偏導関数由来のアルゴリズムには、混合モデル方程式の係数行列の逆行列の演算が必要であること、ならびに相対的収束速度が遅いなどの弱点がある。また、準ニュートン法のような 2 階偏導関数に基づくアルゴリズムの場合には、収束は速いものの演算上の複雑さを無視できない。DF アルゴリズムは演算負荷の面では比較的望ましい性質を持つが、推定されるべき (共) 分散成分の数が多くなると、それらの推定値は貧弱な数値的特性を示すことが知られている (Misztal, 1994)。

これらの種々のアルゴリズムによる REML 推定のアプローチは、推定値の抽出 (共) 分散の算出手順に関してもそれぞれが特徴を有しており、点推定のための演算過程の実行が比較的簡単な EM タイプのアルゴリズムや DF アルゴリズムでは、点推定後に抽出 (共) 分散を算出するためのより複雑な計算過程が要求される。2 階偏導関数の情報を用いる D アルゴリズムを利用すれば、概念的には点推定と抽出 (共) 分散の推定を同時に行うことができるが、そのための全体的な演算負荷は大きい。一方、本研究の第 2 章で新たに導出した一抽出共分散行列 \mathbf{V}_1 の形態には $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4$ 項が含まれ、非常に複雑であり、 \mathbf{V}_1 行列を簡略化した \mathbf{V}_2 行列にも $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2$ 項が含まれるところから、 \mathbf{V}_2 行列を利用した REML 推定値の抽出 (共) 分散の算出においては、従来の種々のアプローチの場合と同程

度の大きさの演算負荷が必要とされる。それ故、REML 推定において点推定値とその抽出(共)分散の推定値をいかに効率的に算出するかという問題が、最も重要な検討課題の一つとして位置づけられる。とくに、家畜育種分野のように本格的な(巨)大容量データセットを用いて REML 推定を実施している分野では、このような研究の推進が極めて重要かつ緊急の課題と考えられる。

この点に関して、最近、平均情報 (Average Information, AI) すなわち観測情報と期待情報との平均の REML 推定への利用が提案され (Johnson と Thompson, 1995)、その有効性が示唆されており、注目に値する。Johnson と Thompson (1995) は、疎行列の演算ツール (例えば, Chu ら, 1984; Perez-Enciso ら, 1994) を利用すれば、AI によるアルゴリズムは D および DF アルゴリズムを凌駕する演算特性を有する可能性を示している。しかしながら、Johnson と Thompson により導出されたオリジナルな AI 行列には予測残差の情報がそのまま残されており、彼らの手法とは異なるタイプの新たな AI アルゴリズム - REML 推定法の開発が可能と考えられる。

そこで、本章では、混合線形モデルの基本形を仮定し、予測残差を含まない AI 行列の一形態を導出して、当該の AI 行列を利用した新たな REML 推定手法を定義するとともに、一数值分析を実施して、点推定および抽出(共)分散推定に当っての演算能力を実証する。

4.2 理 論

4.2.1 基本混合線形モデルならびに AI

ここでは、基本混合線形モデルすなわち残差以外に一変量効果を含む混合線形モデルを、以下のように記述する。

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e} \quad (4.1)$$

ここで、 \mathbf{y} は観測値の $N \times 1$ ベクトル、 \mathbf{b} は母数効果の $p \times 1$ ベクトル、 \mathbf{u} は変量効果の $q \times 1$ ベクトル、 \mathbf{e} は残差(変量効果)の $N \times 1$ ベクトル、 \mathbf{X} および \mathbf{Z} はそれぞれ母数効

果および変量効果 (\mathbf{u}) を観測値に関連付ける計画行列, を表す。両変量効果に関する期待値および共分散構造に関しては

$$E \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Xb} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \text{Var} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_y & \mathbf{ZG}_0 & \mathbf{R} \\ \mathbf{G}_0\mathbf{Z}' & \mathbf{G}_0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{R} & \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{V}_y = \mathbf{ZG}_0\mathbf{Z}' + \mathbf{R}$$

$$\mathbf{G}_0 = \mathbf{G}\sigma_1^2, \quad \mathbf{R} = \mathbf{I}_N\sigma_0^2$$

と仮定する。ここで、 \mathbf{G} は変量効果 \mathbf{u} の共分散構造を表す $q \times q$ 行列, \mathbf{I}_N は $N \times N$ 単位行列, σ_1^2 および σ_0^2 はそれぞれ \mathbf{u} および \mathbf{e} に関する分散成分を表す。

以上のような混合線形モデルに関する混合モデル方程式は

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}_0^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

または

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

と書ける。ただし、 r は分散成分の関数で $r = \sigma_0^2\sigma_1^{-2}$ と表される。このとき、混合モデル方程式の解は $\mathbf{W} = [\mathbf{X} : \mathbf{Z}]$ として

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} = \mathbf{CW}'\mathbf{y} \quad (4.2)$$

により与えられる。ここで、 \mathbf{C} は混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{00} & \mathbf{C}_{01} \\ \mathbf{C}'_{01} & \mathbf{C}_{11} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix}^{-} \end{aligned}$$

を示す。

一方、モデル (4.1) 下における REML 対数尤度関数は、

$$L = \text{const.} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{V}_y| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{X}'\mathbf{V}_y^{-1}\mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}$$

ただし,

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}_y^{-1} - \mathbf{V}_y^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}_y^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}_y^{-1},$$

と表される。この対数尤度関数 L の分散成分 σ_0^2 および σ_1^2 に関する 1 階偏導関数は、それぞれ

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_0^2} = -\frac{1}{2} \text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_0^2} \mathbf{P} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_0^2} \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (4.3)$$

および

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_1^2} = -\frac{1}{2} \text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_1^2} \mathbf{P} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_1^2} \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (4.4)$$

となり、また、 σ_i^2 および σ_j^2 ; $i, j = 0, 1$ に関する 2 階偏導関数は

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_j^2} \mathbf{P} \right) - \mathbf{y}' \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_j^2} \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (4.5)$$

となる。

そこで、2 階偏導関数 (4.5) の期待値をとれば

$$\mathbf{E} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} \right] = -\frac{1}{2} \text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_j^2} \mathbf{P} \right) \quad (4.6)$$

と表される。よって、式 (4.5) と (4.6) を加えて平均を求めることにより、 σ_i^2 と σ_j^2 に関する観測情報と期待情報の平均、すなわち平均情報 (Average Information, AI) が

$$\begin{aligned} AI(\sigma_i^2, \sigma_j^2) &= \frac{1}{2} \left[- \left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} + \mathbf{E} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} \right) \right\} \right] \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_j^2} \mathbf{P} \mathbf{y} \end{aligned} \quad (4.7)$$

として得られる (Johnson と Thompson, 1995)。

なお、1 階偏導関数 (4.3) 式および (4.4) 式に関しては、以下の諸式が成立する。まず、(4.3) 式については、

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_0^2} &= -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P}) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P}^2 \mathbf{y} \\ &= -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{R}) \sigma_0^{-2} + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P}^2 \mathbf{y} \end{aligned}$$

であり、ここで

$$\mathbf{P} = \mathbf{S} - \mathbf{SZ}(\mathbf{Z}'\mathbf{SZ} + \mathbf{G}_0^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{S} \quad (4.8)$$

ただし、

$$\mathbf{S} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}, \quad (4.9)$$

を利用すれば、 $\mathbf{SRS} = \mathbf{S}$ より、

$$\text{tr}(\mathbf{PR})\sigma_0^{-2} = \text{tr}(\mathbf{SR})\sigma_0^{-2} - \text{tr}\{(\mathbf{Z}'\mathbf{SZ} + \mathbf{G}_0^{-1})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{SZ}\}\sigma_0^{-2}$$

が成立し、さらに、 $(\mathbf{Z}'\mathbf{SZ} + \mathbf{G}_0^{-1})^{-1}$ は係数行列の逆行列の部分行列に相当することに留意すれば、(4.9) 式とあわせて

$$\text{tr}(\mathbf{PR})\sigma_0^{-2} = \{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11})r\}\sigma_0^{-2} \quad (4.10)$$

が得られる。

また、 \mathbf{Py} については、(4.8) 式および $\mathbf{SX} = \mathbf{0}$ より、

$$\begin{aligned} \mathbf{Py} &= \mathbf{Sy} - \mathbf{SZ}\hat{\mathbf{u}} \\ &= \mathbf{S}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}) \\ &= \hat{\mathbf{e}}\sigma_0^{-2} \end{aligned} \quad (4.11)$$

と表される。よって、最終的に (4.10) 式および (4.11) 式より、

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_0^2} = -\frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11})r\}\sigma_0^{-2} + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}\sigma_0^{-4}$$

が得られる。なお、ここで、 $\hat{\mathbf{e}}$ は予測残差のベクトル $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$ を表す。

一方、(4.4) 式については、まず、

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_1^2} &= -\frac{1}{2}\text{tr}\left[\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_1^2}\mathbf{P}\right] + \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{P}\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_1^2}\mathbf{Py} \\ &= -\frac{1}{2}\text{tr}(\mathbf{GZ}'\mathbf{PZ}) + \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{PZGZ}'\mathbf{Py} \end{aligned} \quad (4.12)$$

と書ける。さらに、

$$\mathbf{Z}'\mathbf{P}\mathbf{Z} = \mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}_0^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{S}\mathbf{Z} + \mathbf{G}_0^{-1})^{-1}\mathbf{G}_0^{-1}$$

および

$$\mathbf{Z}'\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{G}_0^{-1}\hat{\mathbf{u}} \quad (4.13)$$

より、(4.12) 式はさらに

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_1^2} &= -\frac{1}{2}\text{tr}(\mathbf{I}_q\sigma_1^{-2} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}r\sigma_1^{-2}) + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}\sigma_1^{-4} \\ &= -\frac{1}{2}\{q - \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11})r\}\sigma_1^{-2} + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}\sigma_1^{-4} \end{aligned}$$

と表される。

4.2.2 Johnson と Thompson による AI 行列

(4.7) 式として与えられた AI は、 $\mathbf{f}(\sigma_i^2) = \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P}\mathbf{y}$; $i = 0, 1$ と定義することにより、

$$AI(\sigma_i^2, \sigma_j^2) = \frac{1}{2}\mathbf{f}(\sigma_i^2)'\mathbf{P}\mathbf{f}(\sigma_j^2); \quad i, j = 0, 1 \quad (4.14)$$

と表される (Johnson と Thompson, 1995)。さらに、式 (4.14) に関して、(4.11) 式より

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\sigma_0^2) &= \mathbf{P}\mathbf{y} \\ &= \hat{\mathbf{e}}\sigma_0^{-2} \end{aligned} \quad (4.15)$$

であり、また

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\sigma_1^2) &= \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_1^2} \mathbf{P}\mathbf{y} \\ &= \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}'\mathbf{P}\mathbf{y} \end{aligned}$$

は、(4.13) 式より、

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\sigma_1^2) &= \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{G}_0^{-1}\hat{\mathbf{u}} \\ &= \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}\sigma_1^{-2} \end{aligned}$$

と表される。

一方、 $\mathbf{Pf}(\sigma_j^2)$ については、 \mathbf{P} は \mathbf{y} を予測残差ベクトル $\hat{\mathbf{e}}$ の σ_0^{-2} 倍へと変換する行列であるので、 \mathbf{y} を $\mathbf{f}(\sigma_j^2)$ で置換した混合モデル方程式を解くことにより得られる残差として表現され得る。

その結果、Johnson と Thompson の AI 行列の各要素はベクトル積として定義される。

4.2.3 予測残差ベクトルを含まない AI 行列の導出

先にみたように、Johnson と Thompson (1995) の AI 行列には予測残差ベクトルが含まれるが、これを消去することにより、AI 行列の別形態の定義が可能となる。

まず、 $\mathbf{Pf}(\sigma_0^2)$ は \mathbf{y} を $\mathbf{f}(\sigma_0^2)$ で置換した混合モデル方程式を解いたときの残差として定義される。よって、

$$\begin{aligned}\mathbf{Pf}(\sigma_0^2) &= \mathbf{P}\hat{\mathbf{e}}\sigma_0^{-2} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}')^2 \mathbf{y}\sigma_0^{-4}\end{aligned}$$

および (4.15) 式から、

$$AI(\sigma_0^2, \sigma_0^2) = \frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}')^3 \mathbf{y}\sigma_0^{-6} \quad (4.16)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{p \times p} & \mathbf{0}_{p \times q} \\ \mathbf{0}_{q \times p} & \mathbf{G}^{-1} \mathbf{r} \end{bmatrix}$ とすれば、

$$\begin{aligned}\mathbf{CW}'\mathbf{W} &= \mathbf{C} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \mathbf{r} \end{bmatrix} - \mathbf{B} \right) \\ &= \mathbf{C}(\mathbf{C}^{-1} - \mathbf{B}) \\ &= \mathbf{I} - \mathbf{CB}\end{aligned}$$

と表されるので、式 (4.16) は

$$AI(\sigma_0^2, \sigma_0^2) = \frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}' - \mathbf{WCBCW}' - \mathbf{WCBCBCW}') \mathbf{y}\sigma_0^{-6}$$

となる。さらに (4.2) 式を適用すれば、

$$\begin{aligned}
 AI(\sigma_0^2, \sigma_0^2) &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{y} \\
 &\quad - \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{y})\sigma_0^{-6} \\
 &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'\mathbf{y} \\
 &\quad - [\hat{\mathbf{b}}' \quad \hat{\mathbf{u}}'] \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix} \\
 &\quad - [\hat{\mathbf{b}}' \quad \hat{\mathbf{u}}'] \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{00} & \mathbf{C}_{01} \\ \mathbf{C}'_{01} & \mathbf{C}_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}^{-1}r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{bmatrix})\sigma_0^{-6} \\
 &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'\mathbf{y} \\
 &\quad - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r^2)\sigma_0^{-6} \tag{4.17}
 \end{aligned}$$

が得られる。同様に、

$$\begin{aligned}
 AI(\sigma_0^2, \sigma_1^2) &= \frac{1}{2}\mathbf{y}'(\mathbf{I} - \mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}')^2\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}\sigma_0^{-4}\sigma_1^{-2} \\
 &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}})\sigma_0^{-4}\sigma_1^{-2} \\
 &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} + \mathbf{y}'\mathbf{X}\mathbf{C}_{01}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r - \mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} \\
 &\quad + \mathbf{y}'\mathbf{Z}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r + \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r^2)\sigma_0^{-4}\sigma_1^{-2} \\
 &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{W} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{01} \\ \mathbf{C}_{11} \end{bmatrix} \mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r + \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r^2)\sigma_0^{-4}\sigma_1^{-2} \\
 &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r^2\sigma_0^{-4}\sigma_1^{-2} \tag{4.18}
 \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}
 AI(\sigma_1^2, \sigma_1^2) &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'(\mathbf{I} - \mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}')\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \\
 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'\mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}})\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \\
 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}' \begin{bmatrix} -\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{01}r & \mathbf{I} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}r \end{bmatrix} \mathbf{W}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}})\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \\
 &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{01} \\ \mathbf{C}_{11} \end{bmatrix} \mathbf{W}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}r\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \\
 &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}r)\hat{\mathbf{u}}r\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \\
 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}r^2)\sigma_0^{-2}\sigma_1^{-4} \tag{4.19}
 \end{aligned}$$

が得られる。

これらの表記の中には、予測残差のベクトル $\hat{\mathbf{e}}$ および計画行列 \mathbf{W} は含まれておらず、また、REML 対数尤度関数の 2 階偏導関数を利用するアルゴリズムで必要とされる $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}$ の項なども含まれていない。

4.2.4 AI アルゴリズムによる新たな REML 推定法

いま、(4.17) 式、(4.18) 式および (4.19) 式として表された $AI(\sigma_1^2, \sigma_j^2)$ を要素とする AI 行列を $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})$; $\boldsymbol{\theta} = [\sigma_0^2 \ \sigma_1^2]'$ と定義すれば、この AI 行列を用いて、Johnson と Thompson (1995) の REML 法とは異なるタイプの AI アルゴリズム - REML 法が定義され得る。その場合、反復推定に当っては、Johnson と Thompson (1995) に応じて、ニュートン法の反復推定式においてヘシアン行列を $\mathbf{A}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})$ に替えた反復推定式、すなわち

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t+1]} = \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]} + \mathbf{A}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]})^{-1} \mathbf{d}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}) \quad (4.20)$$

が利用できる。ただし、 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t+1]}$ および $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}$ はそれぞれ $t+1$ および t 反復ラウンドにおける $\boldsymbol{\theta}$ の推定値であり、 $\mathbf{d}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]})$ は REML 対数尤度関数の $\boldsymbol{\theta}$ に関する 1 階偏導関数のベクトルにおいて $\boldsymbol{\theta}$ を $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}$ で置換したものである。

なお、(4.20) 式の反復的適用による収束値 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は REML 推定値を与えるが、収束時点での平均情報行列を $\mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ と表せば、各分散成分の REML 推定値の抽出 (共) 分散行列もその時点で同時に

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{\boldsymbol{\theta}}] &= \begin{bmatrix} \text{Var}(\hat{\sigma}_0^2) & \text{Cov}(\hat{\sigma}_0^2, \hat{\sigma}_1^2) \\ \text{Sym.} & \text{Var}(\hat{\sigma}_1^2) \end{bmatrix} \\ &\simeq \mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}})^{-1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

として与えられる。また、REML 推定値の標準誤差は

$$\text{S.E.}(\hat{\sigma}_i^2) = \sqrt{\text{Var}(\hat{\sigma}_i^2)}; \quad i = 0, 1$$

により算出され得る。

以上より定義される REML 推定手順の概要は図 4.1 に示したとおりであり、本 REML

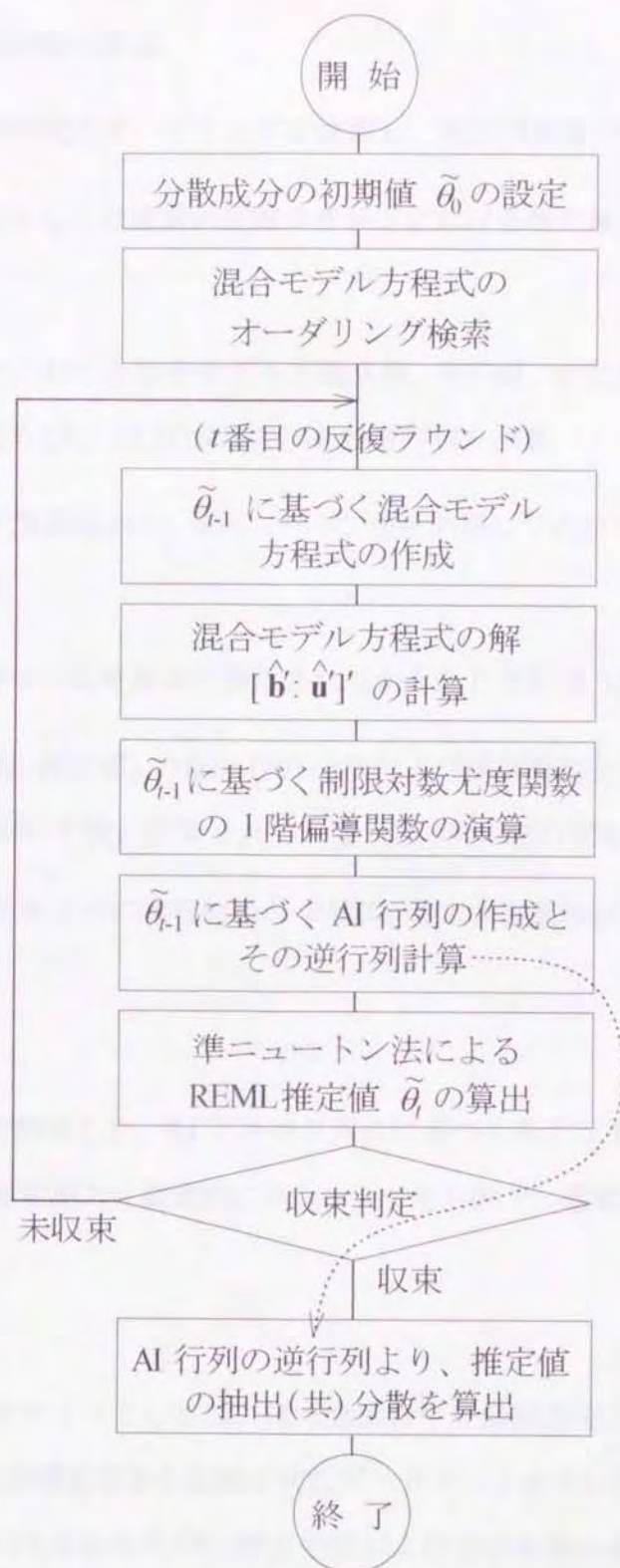


図 4.1 AIREMLm 法における推定手順の概要

推定手法 (AIREMLm 法と呼ぶ) では、

- 1) 分散成分の初期値の設定
- 2) 混合モデル方程式のオーダリングを検索し、逆行列演算の効率化を図る
- 3) 所与の初期値もしくは直前の反復ラウンドにおける推定値に基づき混合モデル方程式を作成
- 4) 当該ラウンドにおける混合モデル方程式解、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数のベクトルならびに AI 行列およびその逆行列を演算
- 5) 4) で得られた演算項より、準ニュートン法を利用して当該ラウンドにおける REML 推定値を更新
- 6) 収束判定。所与の収束基準が満たされなかったときには 3) に戻る
- 7) 収束値 (REML 推定値) の抽出 (共) 分散および標準誤差を算出。その際、最終ラウンドの 4) において既に計算されている AI 行列の逆行列を再利用

の一連の反復推定ステップの実行により REML 推定が実施される。

4.3 数値分析

本節では、前節で開発した、AI アルゴリズムに基づく新たな REML 推定法 (すなわち AIREMLm 法) の推定能力を数値的にチェックする目的で、数値分析を実施した。

4.3.1 データ

分析対象のデータセットとしては、(社) 全国和牛登録協会を介して I 県より提供された、4,412 頭の黒毛和種肥育牛の記録を含むデータセットを用いた。本データセットに係わる母数因子および水準数ならびに肥育牛数および分析対象の個体数などの概要は、表 4.1 に示したとおりである。分析対象の形質は、ここでは枝肉重量とし、分析に当っては、肥育牛の血統上の血縁個体をも含む計 12,204 個体を取り上げた。

表 4.1 数値分析に用いたデータセットの概要

母数因子	区 分	水準数	備 考
出荷年次	主効果	7	1988 年 ~1995 年 (一部グループ化)
肥育農家	主効果	122	出荷規模 10 頭以上の 農家
食肉市場	主効果	6	
性	主効果	2	去勢牛・雌牛
屠殺月齢	共変量	2	平均: 28.7 (± 2.91) カ月
近交度	共変量	1	平均: 2.43 (± 3.32) %
肥育牛数			4,412 頭
血統上の個体数			7,792 頭
分析対象個体数			12,204 頭

4.3.2 方 法

本数値分析では、前節で開発した AIREMLm 法に加えて、Johnson と Thompson (1995) による AI アルゴリズムを利用した REML 法 (Johnson & Thompson 法と呼ぶ) および EM アルゴリズムによる REML 法 (EMREML 法と呼ぶ) による推定をも実施して比較・検討した。

これらの推定法のための演算プログラムは、疎行列演算用のルーティンである FS-PAK サブルーティン (Perez-Enciso ら, 1994) を利用して、WATCOM FORTRAN 77/32 (LIFEBORT Inc., 1993) を用いて開発した。ただし、Johnson & Thompson 法では、4.2 節での 4.2.3 項で解説した AI 行列を用い、反復推定は準ニュートン法によった。また、EMREML 法の反復推定式としては、

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{0[t]}^2 &= \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}\hat{r}_{[t-1]}}{N - r(\mathbf{X}) - q + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11})\hat{r}_{[t-1]}} \\ \hat{\sigma}_{1[t]}^2 &= \{\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}} + \text{tr}(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11})\hat{\sigma}_{0[t]}^2\}/q\end{aligned}\quad (4.22)$$

ただし、添字の $[t]$ および $[t-1]$ は、それぞれ t 番目および $t-1$ 番目の反復ラウンドにおける推定値であることを示す、

を用いた。分析に際しての実用モデルには、変量効果として個体および残差を、母数効果 (主効果) として出荷年次 (7 水準)、肥育農家 (122 水準)、食肉市場 (6 水準) および性 (2 水準) を取り上げた。また、同時に屠殺月齢および肥育牛の近交度を共変量として考慮して、屠殺月齢への 1 次および 2 次偏回帰ならびに近交度への 1 次偏回帰を当てはめた。

σ_1^2 および σ_0^2 の反復推定のための初期値には、それぞれ $800kg^2$ および $1,200kg^2$ を設定した。これらの値は遺伝率として .4 を仮定した値であり、 σ_0^2 に関する初期値 $1,200kg^2$ は、単純に生の観測値の不偏分散を求めて設定した概算値である。収束条件は、隣接した 2 反復ラウンドにおける分散比 r の推定値の差が $10^{-6}\%$ 未満と設定した。演算時間は、WATCOM FORTRAN 77/32 の付属ライブラリに含まれる GETTIM サブルーティンにより計測した。ただし、演算時間の計測は、 \mathbf{G} 行列 (すなわちここでは相加的血縁行列) の逆行列の計算、混合モデル方程式の作成準備およびオーダリング検索を行って後の「ホットリスタート」の下で行った。なお、演算には、CPU として Intel 社 Pentium プロセッサ (クロック周波数: 120MHz) を搭載し、128MB の拡張メモリを実装したパーソ

ナルコンピュータ (EPSON 社: VT-512R) を用いた。

4.3.3 結 果

AIREMLm、Johnson & Thompson および EMREML の 3 方法による分散成分推定値、収束に至るまでの反復回数および総演算時間は表 4.2 に示したとおりである。また、図 4.2 および 4.3 には、EMREML 推定値および AIREMLm 推定値が収束に至るまでの様相、すなわち収束曲線を示した。Johnson & Thompson 推定値の収束様相は、AIREMLm 推定値のそれと同様であった。

AIREMLm 法は良好に機能し、理論的に期待されたとおり、その推定値は十分な精度で Johnson & Thompson 推定値と一致した。しかしながら、所与の収束条件を用いた結果、AI アプローチによる推定値と EM アルゴリズムによる推定値との間には若干の差異が認められた。この点は、EMREML 法での収束速度が相対的に遅い点に起因する現象であり、更なる反復の継続により、EMREML 推定値は AI アプローチによる推定値に一致する。収束までの反復回数については、EMREML 法では 2,771 ラウンドを要したのに対して、Johnson & Thompson 法および AIREMLm 法では 7 ラウンドの反復を要するのみであった。Johnson & Thompson 法での演算時間は AIREMLm 法の 107% を示し、EMREML 法は両 AI 行列手法よりかはるかに長い演算時間を要した。

4.4 考 察

第 3 章では、大標本理論に基づく PVA 手法により、REML 推定量の抽出 (共) 分散の一形態である \mathbf{V}_1 行列の簡略化を図ることによって \mathbf{V}_2 行列を導出したが、 \mathbf{V}_2 行列の計算における演算負荷が未だ大きいことは、Fisher 情報行列の逆行列と同等であった点からも明らかであった。そこで、本章では、基本混合線形モデルを仮定して、点推定から抽出 (共) 分散推定までのすべてのプロセスの演算をより効率的に行い得る、新たな REML 推定手法の可能性について理論的検討を加えた。ここでは、Johnson と Thompson (1995) による平均情報 (AI) に関する報告に着目し、REML 対数尤度関数の観測情報 (2 階偏導

表 4.2 三通りの REML 法による数値分析結果ならびに演算特性

推定手法	推定値 (kg^2)		反復回数	演算時間	
	個体分散 (σ_1^2)	残差分散 (σ_0^2)		時間 (秒)	相対値
AIREMLm	1216.0543 (± 192.6303) ²⁾	585.0803 (± 131.0805) ²⁾	7	134	1
J & T ¹⁾	1216.0543	585.0803	7	143	1.07
EMREML	1215.7281	585.2978	2,771	32,302	241.06

¹⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による REML 法

²⁾ AI 行列に基づく推定値の標準誤差

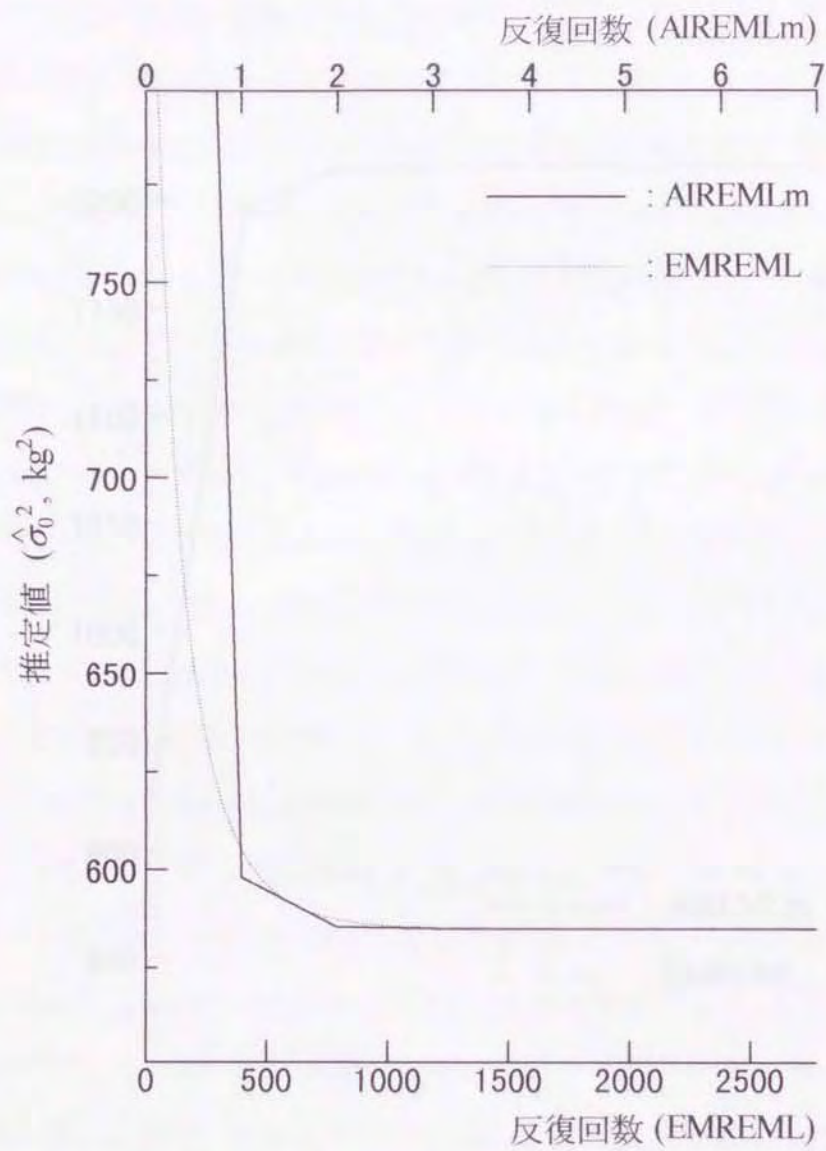


図 4.3 残差分散成分推定値の収束曲線の比較

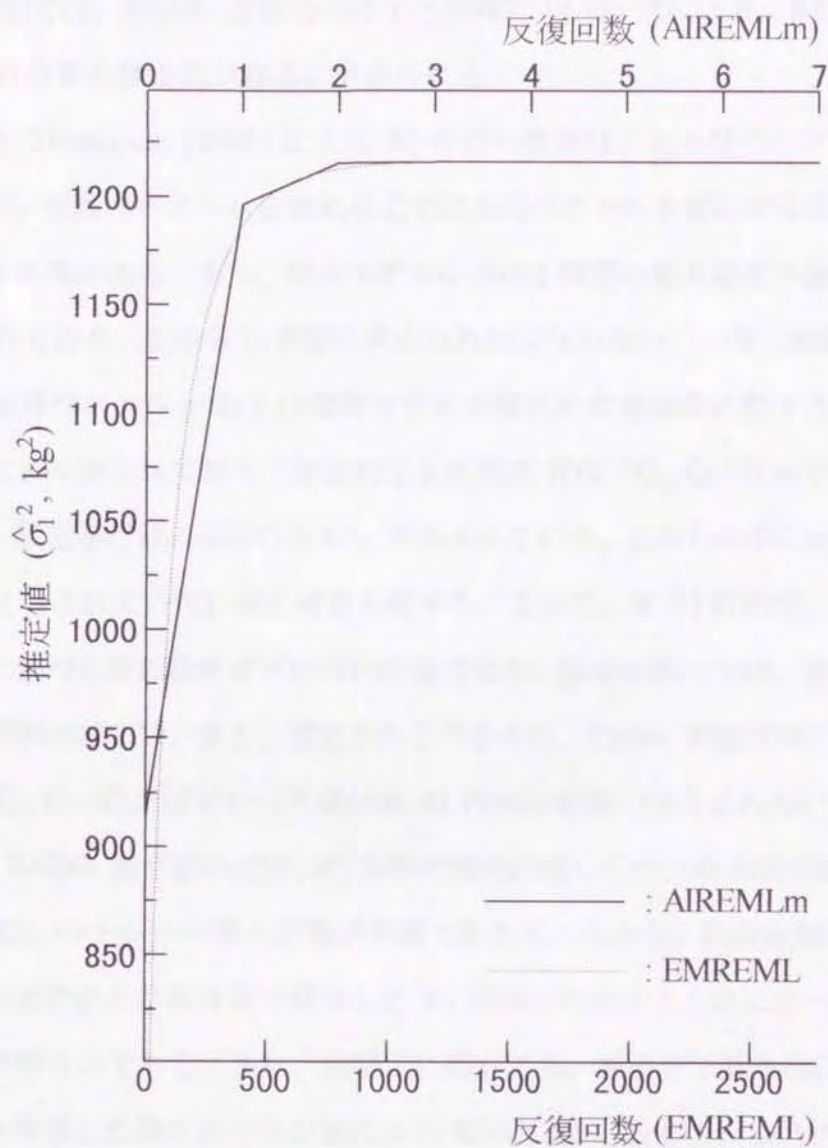


図 4.2 個体分散成分推定値の収束曲線の比較

関数)と期待情報(2階偏導関数の期待値)の平均を要素とするAI行列の新たな一形態を導出した。さらに、ヘシアン行列をこのAI行列で置換した準ニュートン法によるREML反復推定式を定義して、新たなREML推定手法であるAIREMLm法を開発した。このAIREMLm法では、REML点推定の終了と同時に(4.21)式により、REML推定値の大標本漸近(共)分散の推定値が容易に求められる。

JohnsonとThompson(1995)によるAI行列の要素は、ある種のベクトル積として定義されており、当該のベクトルを求める上では右辺ベクトルを異にする混合モデル方程式を複数回解く必要がある。また、混合モデルにおける残差の最良線形不偏予測量のベクトル \hat{e} が含まれており、この \hat{e} も事前に求められねばならない。一方、本章で導出したAI行列は、観測値ベクトル \mathbf{y} および混合モデル方程式の変量効果に関する解ベクトルの2次形式の項により表されており、特徴的な2次形式 $\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}$ の中には、混合モデル方程式の一般化逆行列の部分行列 \mathbf{C}_{11} が含まれている。これらの中には計画行列 \mathbf{W} および \hat{e} は全く含まれていない点に留意を要する。よって、本AI行列は、混合モデル方程式の直接解に基づく新たなタイプの行列形態であり、設定に当っては、通常の混合モデル方程式を1回解けばよい。また、留意されるべき点は、Fisher情報行列の要素に出現する行列積 $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}$ のトレース項が本AI行列の要素には含まれない点である。その結果、まず、REML推定値の抽出(共)分散の推定に関しては、本AIREMLm法によれば $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}$ のトレース項の演算が不要であるところから、Fisher情報行列の逆行列による従来の方法および第3章で開発した \mathbf{V}_2 行列を利用する方法に比べて計算量の軽減されることが明らかである。また、点推定に関しても、数値例で具体的に示したように、本AI行列を利用した準ニュートン法によるREML推定法すなわちAIREMLm法における演算時間の特性は、EMアルゴリズム-REML法よりも格段に優れており、JohnsonとThompson(1995)のAI行列に基づくREML法すなわちJohnson & Thompson法と比較しても、優るとも劣らない良好な特性が認められた。

点推定における演算時間の特性に関して、AIREMLm法の方がJohnson & Thompson法よりも僅かではあるが優れていた事実は、AIREMLm法では、FSPAKサブルーティンの機能のひとつであるFSPAK50や52を呼び出す回数がJohnson & Thompson法の

場合よりも少数回で済むことならびに Johnson & Thompson 法で要求される予測残差ベクトルの計算が不要である点を反映した結果と考えられる。また、FSPAK50 や 52 の実行に必要な演算時間は、分析対象個体数や混合モデル方程式の係数行列の非零要素数が増加するにつれて長くなることから、家畜や作物集団に関するそのような構造の大容量データを対象とする場合には、両方法間の演算時間の差はより大きくなると推察される。推定値の正確度および演算時間の観点から、本 AIREMLm 法は EM アルゴリズムに比べて明らかに優れていたが、そのような AIREMLm の好ましい性質は、EM の場合に利用されている $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}$ のトレースのような単純な項のみではなく、より情報量の多い $\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}$ なる形態の 2 次形式をも利用している点に起因していると考えられる。

演算特性のうちで演算時間とともに最重要な特性は、演算容量すなわち所与の方法での計算に際し要求されるメモリ量である。この点に関して、表 4.3 は、EMREML のためのプログラムと比較して、Johnson & Thompson 法および AIREMLm 法の両プログラムで余分に必要とされる演算要素およびそれらの格納に必要なメモリ容量を示している。表中の R8 という記述は、その要素のデータ型が倍精度実数型であることを示しており、1 要素につき 8B の演算メモリを消費する。ただし B はメモリ単位であるバイトを示す。同様に、I4 とあるのは整数型を表しており、4B が消費される。また、 N は観測値数を、 x は分析のための実用モデルに含まれる母数因子数である。すなわち、例えば R8 (N) という演算要素は要素数が N の倍精度実数型配列であり、 $8NB$ の記憶領域が占有されることを意味する。

まず、EMREML プログラム中で必要な演算要素については、Johnson & Thompson 法および AIREMLm 法の両 AIREML プログラムでもすべて必要である。次に、表 4.3 から明らかなように、Johnson & Thompson 法のプログラムにおいては、EMREML プログラムと比較して

$$\{12N(x+3) + 32\}B \quad (4.23)$$

分のメモリ領域が必要とされる。この量は、例えば本章での数値分析の場合 ($N = 4,412$;

表 4.3 両 AI プログラムで EM に追加して必要
とされる演算要素およびその容量¹⁾

演 算 要 素	プ ロ グ ラ ム	
	J & T ²⁾	AIREMLm
観測値ベクトル	R8(N)	—
計画行列の非零要素	I4 ($N(x+1)$)	—
〃	R8($N(x+1)$)	—
予測残差ベクトル	R8(N)	—
AI 行列	R8(2×2)	R8(2×2)
$\mathbf{Pf}(\sigma_j)$ ベクトル	R8(N)	—
$\hat{\mathbf{u}}'\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}^{-1}\hat{\mathbf{u}}$	—	R8(1)

¹⁾R8: 倍精度実数型; 1 単位あたり 8 バイトを消費

I4: 整数型; 1 単位あたり 4 バイトを消費

N : 観測値数

x : 母数因子数

²⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による
REML 法

$x=6$) であれば

$$\begin{aligned}12 \times 4,412 \times (6+3) + 32 &= 476,528\text{B} \\ &= 465.3\text{KB}\end{aligned}$$

ただし、 $1\text{KB} = 1,024\text{B}$ 、となる。(4.23) 式には N および x の変数が含まれているところから、Johnson & Thompson 法のプログラムで必要な追加の演算メモリ量は、データセットのサイズおよび分析の際の実用モデルに依存して変化することがわかる。例えば、家畜育種分野で扱われるような大容量データセットの場合で、 $N = 100,000$; $p = 10$ であれば、(4.23) 式の値は

$$15,234.4\text{KB} = 14.9\text{MB}$$

ただし、 $1\text{MB} = 1,024\text{KB}$ 、に達することになり、EMREML プログラムで取り扱い可能なデータセットと Johnson & Thompson 法のプログラムで取り扱うそれとの乖離が進む危険性が存在する。

一方、本 AIREMLm プログラムでは、表 4.3 に示したように、AI アルゴリズムの利用に伴う消費演算メモリ量は 40B に過ぎず、実質上 EMREML のそれに等しい。この 40B という数値は N および x 変数とは無関係であり、(4.1) 式で示される分析モデル下において常に一定である。よって、演算容量の観点からは、EMREML プログラムで分析が可能なデータセットの規模であれば、AIREMLm プログラムの適用には全く問題が無いと結論づけられる。

よって、演算時間および演算容量の総合的な観点から、本章で開発した AIREMLm 法は点推定に関して良好な特性を有する REML 推定手法であると推察される。また、推定値の抽出(共)分散の推定に際して、追加演算が一切不要な点も大きな利点と考えられる。さらに、手法のプログラミングという観点からも、本法のプログラミングでは、混合モデル方程式の一般化逆行列を計算し、直接解を求め、それらによって(4.17)、(4.18) および(4.19) 式から準ニュートン法による REML 反復推定式(4.20) 式を作成することのみが要求される。したがって、極めてストレートかつシンプルなプログラム構造が可能であり、この点も利点の一つとして挙げられる。

なお、家畜育種の分野で取り扱われるデータセットは一般に大容量であり、個体モデルによる REML 推定に際して解くべき混合モデル方程式のサイズが大きく、通常の直接解法の手法が適用できない場合も少なくない。しかし、そのような場合でも、本章で示されたように、疎行列演算のための強力なサブルーティン FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) の利用によって、本法の良好な特性が最大限に発揮され得るものと思われる。

4.5 要 約

本章では、残差および 1 変量効果を含む基本混合線形モデルを取り上げ、分散成分の REML 点推定ならびに抽出 (共) 分散推定のための効率的な演算手法の開発を図った。まず、REML 対数尤度関数の平均情報 (AI) に着目し、予測残差ベクトルを含む従来の AI 行列とは異なる形態の AI 行列を導出した。次いで、当該の AI 行列でヘシアン行列を置換して、REML 推定のための準ニュートン法による反復推定法 (AIREMLm 法と呼ぶ) を定義した。ここで導出した AI 行列の要素は、観測値ベクトルおよび混合モデル方程式の解ベクトルの部分ベクトルによる特徴的な 2 次形式により表され、計画行列および予測残差ベクトルは含まれなかった。当該 2 次形式の計算には、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列の部分行列が必要であったが、Fisher 情報行列の要素中に出現する複雑な行列積は不要であった。REML 推定値の抽出 (共) 分散の推定値は、当該の AI 行列の収束時点での逆行列から、大標本漸近 (共) 分散の推定値として定義された。数値例として、黒毛和種の枝肉重量に関する一データセットを分析したところ、本 AIREMLm 法の演算容量に関する特性は、従来の AI 行列に基づく REML 推定手法よりも優れており、演算時間特性は EM アルゴリズムに基づく REML 推定手法に比べて格段に優れていた。よって、本 AIREMLm 法は、基本混合線形モデルにおける分散成分の点推定ならびに抽出 (共) 分散推定のための、有効かつ実用的な演算手法であると考えられた。

第5章 一般混合線形多分散成分モデルに関する平均情報行列の一形態 ならびに制限最尤推定手法

5.1 緒言

混合線形モデルにおける分散成分の REML 推定のためのアルゴリズムとして、当初は、D アルゴリズムの一種である Fisher スコアリング法が利用された (Patterson と Thompson, 1971; Thompson, 1973)。このアルゴリズムは、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数ならびに 2 階偏導関数の期待値を用いるアプローチであり、適用対象は比較的シンプルなモデルに限られていた。その後、EM アルゴリズム (Dempster ら, 1977) に基づく 1 階偏導関数のみを利用したアルゴリズムが提案され (Harville, 1977)、反復推定過程のプログラミングの容易さも手伝って、広範に用いられるようになった (例えば, Mäntysaari と Van Vleck, 1989; Misztal, 1990; Misztal, 1994)。一方、これらの D アルゴリズムでは、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列の演算を要するところから、偏導関数に依存しないタイプのアルゴリズムである DF アルゴリズムも開発され (Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987; Meyer, 1989, 1991)、近年多用されてきた。しかし、この DF アルゴリズムは、推定対象の分散成分の数が多い場合には相対的に貧弱な数値的特性を示し、その際の演算効率は EM アルゴリズムよりも劣ることが示されている (例えば, Misztal, 1994; Hofer, 1998)。

これらのアルゴリズムに対して、最近、平均情報 (Average Information, AI) を利用したアルゴリズム (Johnson と Thompson, 1995) が提案された。この AI アルゴリズムでは、観測情報と期待情報の平均が利用される。その結果、このアルゴリズムを用いれば、Fisher スコアリング法における期待情報行列に出現する繁雑な行列積の演算を回避することができる。例えば、Johnson と Thompson (1995) の AI アルゴリズム - REML 法は、予測残差のベクトルを含む単純なベクトル積として定義された AI 行列要素に基づいている。

一方、前章では、予測残差ベクトルを含まず、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列の部分行列と同方程式の解ベクトルなどから構成される 2 次形式を要素とする AI 行

列を導出し、AI アルゴリズム - REML 法の新たな手法である AIREMLm 法を提案した。この AIREMLm 法は、疎行列演算ツール (例えば, Chu ら, 1984; Perez-Enciso ら, 1994) の利用を図ることにより、大容量データセットの分析に際しても実用的な手法であり得ると考えられた。しかしながら、前章では、残差効果以外に一変量効果のみを含むいわゆる基本混合線形モデルを仮定していた。

本章では、多分散成分を含む一般混合線形モデルを取り上げて、先に導出した AI 行列および AIREMLm 法の一般化を図る。

5.2 理 論

5.2.1 一般混合線形モデルおよび混合モデル方程式

まず、以下のような一般混合線形モデルを考える。すなわち、

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e} \quad (5.1)$$

ここで、

\mathbf{y} : 観測値の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{b} : 母数効果の $p \times 1$ ベクトル

\mathbf{u} : 各変量効果の $q \times 1$ ベクトル

\mathbf{e} : 残差効果 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{X} および \mathbf{Z} : それぞれ既知の $N \times p$ および $N \times q$ の計画行列, である。

\mathbf{u} および \mathbf{Z} については、

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_i \\ \vdots \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix} \quad \text{および} \quad \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 & \cdots & \mathbf{Z}_i & \cdots & \mathbf{Z}_s \end{bmatrix}$$

と仮定する。ただし、 $i = 1 \sim s$ で s は残差以外の変量因子数を示し、変量効果 \mathbf{u}_i の水準数を q_i とすれば、 $\sum_{i=1}^s q_i = q$ である。

また、各変量効果の分布に関して、以下の仮定を置く。すなわち

$$\mathbf{y} \sim N(\mathbf{X}\mathbf{b}, \mathbf{V}),$$

$$E \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_i \\ \vdots \\ \mathbf{u}_s \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{(q_1 \times 1)} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{(q_i \times 1)} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{(q_s \times 1)} \\ \mathbf{0}_{(N \times 1)} \end{bmatrix},$$

$$\text{Var} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_i \\ \vdots \\ \mathbf{u}_s \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1\sigma_1^2 & \cdots & \mathbf{0}_{(q_1 \times q_i)} & \cdots & \mathbf{0}_{(q_1 \times q_s)} & \mathbf{0}_{(q_1 \times N)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & \mathbf{G}_i\sigma_i^2 & \cdots & \mathbf{0}_{(q_i \times q_s)} & \mathbf{0}_{(q_i \times N)} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ \text{Sym.} & & & & \mathbf{G}_s\sigma_s^2 & \mathbf{0}_{(q_s \times N)} \\ & & & & & \mathbf{I}_{(N \times N)}\sigma_0^2 \end{bmatrix},$$

および

$$\mathbf{V} = \text{Var}[\mathbf{y}] = \sum_{i=1}^s (\mathbf{Z}_i \mathbf{G}_i \mathbf{Z}_i' \sigma_i^2) + \mathbf{I} \sigma_0^2$$

と仮定する。ただし、 σ_i^2 ; $i = 1 \sim s$ および σ_0^2 はそれぞれ i 番目の変量効果および残差効果の分散 (分散成分) を、 \mathbf{G}_i ; $i = 1 \sim s$ は \mathbf{u}_i についての既知の $q_i \times q_i$ の分散共分散行列を表すものとする。

このとき、Henderson の混合モデル方程式は、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z}_1 & \cdots & \mathbf{X}'\mathbf{Z}_i & \cdots & \mathbf{X}'\mathbf{Z}_s \\ & \mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1 + \mathbf{G}_1^{-1}r_1 & \cdots & \mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_i & \cdots & \mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_s \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & \mathbf{Z}_i'\mathbf{Z}_i + \mathbf{G}_i^{-1}r_i & \cdots & \mathbf{Z}_i'\mathbf{Z}_s \\ \text{Sym.} & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & \mathbf{Z}_s'\mathbf{Z}_s + \mathbf{G}_s^{-1}r_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}}_1 \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{u}}_i \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{u}}_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}_1'\mathbf{y} \\ \vdots \\ \mathbf{Z}_i'\mathbf{y} \\ \vdots \\ \mathbf{Z}_s'\mathbf{y} \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

と表される。ただし、 $r_i; i = 1 \sim s$ はいわゆる分散比のスカラーであり、 $r_i = \sigma_0^2 \sigma_i^{-2}$ として定義される。この (5.2) 式の解ベクトルは、係数行列の一般化逆行列を

$$C = \begin{bmatrix} C_{bb} & C_{b1} & \cdots & C_{bi} & \cdots & C_{bs} \\ & C_{11} & \cdots & C_{1i} & \cdots & C_{1s} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & C_{ii} & \cdots & C_{is} \\ & Sym. & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & C_{ss} \end{bmatrix}$$

と表記すれば、

$$\begin{bmatrix} \hat{b} \\ \hat{u}_1 \\ \vdots \\ \hat{u}_i \\ \vdots \\ \hat{u}_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{b} \\ \hat{u} \end{bmatrix} = CW'y \quad (5.3)$$

$$W = \begin{bmatrix} X & Z_1 & \cdots & Z_i & \cdots & Z_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X & Z \end{bmatrix}$$

として与えられる。

5.2.2 REML 対数尤度関数および偏導関数

モデル (5.1) に関する REML 対数尤度関数は

$$L = \text{const.} - \frac{1}{2} \log |V| - \frac{1}{2} \log |X'V^{-1}X| - \frac{1}{2} (y - X\hat{b})'V^{-1}(y - X\hat{b}) \quad (5.4)$$

と書ける。ここで、

$$(y - X\hat{b})'V^{-1}(y - X\hat{b}) = y'Py$$

であり、

$$P = V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}$$

である。

(5.4) 式の $\sigma_i^2; i=0 \sim s$ に関する 1 階偏微分は、 $\partial \mathbf{V} / \partial \sigma_i^2$ を \mathbf{V}_i と表記すれば、

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_i^2} = -\frac{1}{2} \{ \text{tr}(\mathbf{V}_i \mathbf{P}) - \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{y} \}$$

を与える。さらに、 L の 2 階偏微分は、 $\partial^2 L / \partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2$ を \mathbf{V}_{ij} と表記すれば、

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} = -\frac{1}{2} \{ \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{V}_{ij}) - \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{V}_j) - \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_{ij} \mathbf{P} \mathbf{y} \} - \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{V}_j \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (5.5)$$

を与える。よって、この (5.5) 式の期待値は次のように与えられる:

$$\mathbf{E} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2} \right] = -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{V}_j). \quad (5.6)$$

5.2.3 平均情報行列の Johnson と Thompson による表記

モデル (5.1) に関して、 \mathbf{V} はパラメータすなわち $\sigma_i^2; i=0 \sim s$ について線形であるので、

$$\mathbf{V}_{ij} = 0$$

が成立する。いま、(5.5) 式および (5.6) 式の平均を求めれば、

$$-\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{V}_j \mathbf{P} \mathbf{y}$$

が与えられ、その負値は平均情報 (AI) と呼ばれる。

ここで、 $\mathbf{V}_i = \mathbf{Z}_i \mathbf{G}_i \mathbf{Z}_i'; i=1 \sim s$ および $\mathbf{V}_0 = \mathbf{I}$ より、 $\mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{y}$ および $\mathbf{P} \mathbf{y}$ はベクトルとして

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i \sigma_i^{-2} \end{aligned} \quad (5.7)$$

および

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \mathbf{P} \mathbf{y} \\ &= \hat{\mathbf{e}} \sigma_0^{-2}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

として表される (Johnson と Thompson, 1995)。 $\hat{\mathbf{e}}$ は、モデル (5.1) に関して予測された残差のベクトルである。さらに、 \mathbf{P} は観測値を予測残差へと変換する行列であるので、 $\beta_j = \mathbf{P}\alpha_j$ は、モデル (5.1) 下の混合モデル方程式に関して、 \mathbf{y} を α_j で置換して形成される方程式を解くことによる残差として定義される。

よって、Johnson と Thompson による AI 行列 $\{a_{ij}\}$ は、次のように与えられる。

$$\{a_{ij}\} = \frac{1}{2} \alpha_i' \beta_j \quad (5.9)$$

5.2.4 予測残差ベクトルを含まない AI 行列の一形態

ここではまず、 $s = 2$ のモデルすなわち

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}_1\mathbf{u}_1 + \mathbf{Z}_2\mathbf{u}_2 + \mathbf{e} \quad (5.10)$$

を仮定して、AI 行列の別形態を導出し、次いでその一般形すなわちモデル (5.1) に関する形態を示す。

モデル (5.10) に関して、AI 行列の要素 a_{00} は次のように表される：

$$\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P}^3 \mathbf{y} = \frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{W}\mathbf{C}\mathbf{W}')^3 \mathbf{y} \sigma_0^{-6}. \quad (5.11)$$

いま、行列 \mathbf{B} を

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_1^{-1} r_1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{G}_2^{-1} r_2 \end{bmatrix}$$

と定義すれば、次式が得られる：

$$\begin{aligned} \mathbf{C}\mathbf{W}'\mathbf{W} &= \mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{B} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{C}_{01}\mathbf{G}_1^{-1}r_1 & -\mathbf{C}_{02}\mathbf{G}_2^{-1}r_2 \\ 0 & \mathbf{I} - \mathbf{C}_{11}\mathbf{G}_1^{-1}r_1 & -\mathbf{C}_{12}\mathbf{G}_2^{-1}r_2 \\ 0 & -\mathbf{C}_{12}'\mathbf{G}_1^{-1}r_1 & \mathbf{I} - \mathbf{C}_{22}\mathbf{G}_2^{-1}r_2 \end{bmatrix} \\ &\equiv \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{00} & \mathbf{H}_{10} & \mathbf{H}_{20} \\ \mathbf{H}_{01} & \mathbf{H}_{11} & \mathbf{H}_{21} \\ \mathbf{H}_{02} & \mathbf{H}_{12} & \mathbf{H}_{22} \end{bmatrix} \\ &\equiv [\mathbf{H}_0 : \mathbf{H}_1 : \mathbf{H}_2]. \end{aligned}$$

すなわち、(5.11) 式を

$$\frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}' - \mathbf{WCBCW}' - \mathbf{WCBCBCW}') \mathbf{y} \sigma_0^{-6}$$

と変形できる。ここで、(5.3) 式により、

$$\mathbf{y}' \mathbf{WCB} = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} r_1 & \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{G}_2^{-1} r_2 \end{bmatrix}$$

であることに着目してさらに整理すれば、最終的に

$$\begin{aligned} a_{00} = & \frac{1}{2} (\mathbf{y}' \mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}' \mathbf{X}' \mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{Z}_1' \mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{Z}_2' \mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} \hat{\mathbf{u}}_1 r_1 - \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_2 \\ & - \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{11} \mathbf{G}_1^{-1} \hat{\mathbf{u}}_1 r_1^2 - \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{C}_{22} \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_2^2 - 2 \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{12} \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2) \sigma_0^{-6} \end{aligned}$$

が得られる。

次に、(5.7) 式および (5.8) 式から、要素 $a_{0i}; i = 1 \sim 2$ は以下のように表記できる:

$$\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P}^2 \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{y} = \frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}')^2 \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i \sigma_i^{-2} \sigma_0^{-4}.$$

したがって、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}' - \mathbf{WCBCW}') \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i \sigma_i^{-2} \sigma_0^{-4} \\ & = \frac{1}{2} (\mathbf{y}' \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i - \mathbf{y}' \mathbf{W} \mathbf{H}_i \hat{\mathbf{u}}_i - \mathbf{y}' \mathbf{WCB} \mathbf{H}_i \hat{\mathbf{u}}_i) \sigma_i^{-2} \sigma_0^{-4} \end{aligned}$$

から、

$$a_{0i} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ii} \mathbf{G}_i^{-1} \hat{\mathbf{u}}_i r_i^2 + \hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{i2} \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2) \sigma_i^{-2} \sigma_0^{-4}$$

が得られる。

同様に、 $a_{ii}; i = 1 \sim 2$ については

$$\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{V}_i \mathbf{P} \mathbf{y} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{Z}_i' (\mathbf{I} - \mathbf{WCW}') \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i \sigma_i^{-4} \sigma_0^{-2}$$

として与えられ、この式はさらに次のように書き換えられ得る:

$$\frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{Z}_i' \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i - \hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{Z}_i' \mathbf{W} \mathbf{H}_i \hat{\mathbf{u}}_i) \sigma_i^{-4} \sigma_0^{-2} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}_i' \mathbf{Z}_i' \mathbf{W} \mathbf{C}_i' \mathbf{G}_i^{-1} \hat{\mathbf{u}}_i r_i \sigma_i^{-4} \sigma_0^{-2}.$$

よって、上式に対して、さらに $\mathbf{Z}'_i \mathbf{W} \mathbf{C}'_i = \mathbf{H}_{ii}$ を適用すれば、

$$a_{ii} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}_i^{-1} \hat{\mathbf{u}}_i r_i - \hat{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ii} \mathbf{G}_i^{-1} \hat{\mathbf{u}}_i r_i^2) \sigma_i^{-4} \sigma_0^{-2}$$

が導かれる。

最後に、

$$\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{V}_1 \mathbf{P} \mathbf{V}_2 \mathbf{P} \mathbf{y}$$

として与えられる要素 a_{12} は、先の場合と同様に、

$$\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}'_1 \mathbf{Z}'_1 (\mathbf{I} - \mathbf{W} \mathbf{C} \mathbf{W}') \mathbf{Z}_2 \hat{\mathbf{u}}_2 \sigma_2^{-2} \sigma_1^{-2} \sigma_0^{-2}$$

と表される。この双 1 次形式は、

$$\frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}'_1 \mathbf{Z}'_1 \mathbf{Z}_2 \hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}'_1 \mathbf{Z}_1 \mathbf{W} \mathbf{H}_2 \hat{\mathbf{u}}_2) \sigma_2^{-2} \sigma_1^{-2} \sigma_0^{-2}$$

と置き直され、

$$\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}'_1 \mathbf{Z}'_1 \mathbf{W} \mathbf{C}'_2 \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_2 \sigma_2^{-2} \sigma_1^{-2} \sigma_0^{-2}$$

へと整理されるので、さらに $\mathbf{Z}'_1 \mathbf{W} \mathbf{C}'_2 = -\mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{12} r_1$ を適用することにより、

$$a_{12} = -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}'_1 \mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{12} \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2 \sigma_2^{-2} \sigma_1^{-2} \sigma_0^{-2}$$

が得られる。

そこで、同様の手法を用いてモデル (5.1) に関する AI 行列を求めれば、

$$\boldsymbol{\theta}' = [\sigma_0^2 \quad \sigma_1^2 \quad \dots \quad \sigma_s^2]$$

として、以下のような形態が導出される。

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a_{00} & \left\{ \sum_{j=1}^s \hat{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ij} \mathbf{G}_j^{-1} \hat{\mathbf{u}}_j r_i r_j \right\} \sigma_i^{-2} \sigma_0^{-4} \Bigg\}_{i=1}^s \\ \text{Sym.} & \left\{ \hat{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}_i^{-1} \hat{\mathbf{u}}_j r_i^2 \delta_{ij} - \hat{\mathbf{u}}'_i \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ij} \mathbf{G}_j^{-1} \hat{\mathbf{u}}_j r_i r_j \right\} \sigma_i^{-2} \sigma_j^{-2} \sigma_0^{-2} \Bigg\}_{i,j=1}^s \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

ただし、

$$a_{00} = \left(\mathbf{y}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \sum_{i=1}^s \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{Z}_i'\mathbf{y} - \sum_{i=1}^s \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\hat{\mathbf{u}}_i r_i - \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{G}_j^{-1}\hat{\mathbf{u}}_j r_i r_j \right) \sigma_0^{-6}$$

であり、記号 $\{\mathbf{R}\cdot\}_{i=1}^s$ は、 $i=1$ から $i=s$ までの s 個の要素から成る行ベクトルを表し、 $\{\mathbf{M}\cdot\}_{i,j=1}^s$ は、 $i=1$ から $i=s$ まで、ならびに $j=1$ から $j=s$ までの $s \times s$ 個の要素をもつ行列を意味する。また、 δ_{ij} は $i=j$ のとき $\delta_{ii}=1$ をとり、 $i \neq j$ のとき $\delta_{ij}=0$ をとるクロネッカーのデルタを示す。

5.2.5 REML 推定のための準ニュートン型反復推定式

多分散成分の REML 推定のための (5.12) 式による反復推定式は、4.2 節の場合と同様に準ニュートン法を利用すれば、

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t+1]} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]} + \mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]})^{-1} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}}$$

と定義される。ここで、 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t+1]}$ および $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}$ は $t+1$ 番目および t 番目の反復ラウンドにおける $\boldsymbol{\theta}$ の推定値を、 $\mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]})$ は $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}$ 下で計算された AI 行列を、 $\partial L / \partial \boldsymbol{\theta} \Big|_{\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}}$ は $\boldsymbol{\theta}$ を $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{[t]}$ で置き換えた REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数すなわち勾配ベクトルを示す。

5.3 数値分析

5.2 節で開発した多分散成分の REML 推定のための拡張 AIREMLm 法が良好に機能することを実証するために、ここでは黒毛和種肥育牛に関する枝肉形質のデータセットを用いて、本法による数値分析を実施した。

5.3.1 データ

分析に供したデータは、(社)全国和牛登録協会を介して H 県より提供された、黒毛和種肥育牛の食肉市場出荷時に測定された枝肉重量記録である。表 5.1 にデータセットの概

表 5.1 数値分析に用いたデータセットの概要

因子	区分	水準数	備考
肥育農家	変量	80	出荷規模 10 頭以上の農家 および他グループ
出荷年次	母数	9	1988 年 ~ 1996 年
性	母数	2	去勢牛および雌牛
屠殺月齢	母数	2	平均: 29.6 (± 2.19) カ月
近交度	母数	1	平均: .03 ($\pm .04$)
肥育牛数			6,508 頭
血統上の個体数			9,141 頭
分析対象個体数			15,649 頭

要、すなわち、記録に關与する要因の情報ならびに肥育牛数および分析対象個体数などを示した。このデータセットには 6,508 頭の肥育牛に関する記録が備えられていたが、記録を有する肥育個体と血縁で結ばれた 9,141 頭の血縁個体をも含めて、計 15,649 個体を分析対象とした。

5.3.2 方 法

分析のための実用モデルには、残差 ($i = 0$) 以外の変量効果として、肥育農家の効果 ($i = 1$; 80 水準) および個体の効果 ($i = 2$; 15,649 水準) を取り上げた。母数効果としては、出荷年次 (9 水準) および性 (2 水準) の効果を主効果として取り上げ、さらに屠殺時月齢への 1 次および 2 次偏回帰係数ならびに近交係数への 1 次偏回帰係数を当てはめた。

分析に当っては、本 AIREMLm 法と比較対照する意味で、EM アルゴリズム - REML 法による分析も実施した。ただし、EM アルゴリズムによる検討では、収束を加速させるために、Aitken 加速法を導入した。このような Aitken 加速を図った EMREML 法を、ここでは EMREMLa 法と呼ぶ。

EM アルゴリズムによる反復推定式としては、

$$\hat{\sigma}_{0[t]}^2 = \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \sum_{i=1}^2 (\mathbf{y}'\mathbf{Z}_i\hat{\mathbf{u}}_i + \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\hat{\mathbf{u}}_i\hat{r}_{i[t-1]})}{N - r(\mathbf{X}) - \sum_{i=1}^2 (q_i - \text{tr}(\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ii})\hat{r}_{i[t-1]})}$$

$$\hat{\sigma}_{i[t]}^2 = \{ \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\hat{\mathbf{u}}_i + \text{tr}(\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ii})\hat{\sigma}_{0[t]}^2 \} / q_i$$

を用い、 $\mathbf{G}_1^{-1} = \mathbf{I}$ および $\mathbf{G}_2^{-1} = \mathbf{A}^{-1}$ と設定した。ここで \mathbf{A}^{-1} は、個体間の相対的血縁行列の逆行列である。Aitken 加速では、 $t-2$ 番目、 $t-1$ 番目および t 番目の反復ラウンドにおける各分散成分の推定値をそれぞれ $\hat{\sigma}_{i[t-2]}^2$ 、 $\hat{\sigma}_{i[t-1]}^2$ および $\hat{\sigma}_{i[t]}^2$ で示せば、変化率 λ_i を

$$\lambda_i = \frac{\hat{\sigma}_{i[t]}^2 - \hat{\sigma}_{i[t-1]}^2}{\hat{\sigma}_{i[t-1]}^2 - \hat{\sigma}_{i[t-2]}^2}$$

として

$$\tilde{\sigma}_{i[t+1]}^2 = (\hat{\sigma}_{i[t]}^2 - \lambda_i \hat{\sigma}_{i[t-1]}^2) / (1 - \lambda_i)$$

なる値 $\tilde{\sigma}_{i[t+1]}^2$ で推定値を置換することによって収束の加速が図られる。

演算には、Intel 社製 Pentium II CPU (333MHz) を搭載し、演算メモリを 256MB に拡張したパーソナルコンピュータ (EPSON 社: VL-633E) を用い、両推定法に関する演算プログラムについては、Microsoft 社 Windows NT 4.0 workstation オペレーティングシステム下で実行した。

分散成分の初期値としては、生の観測値の不偏分散を計算し、その値を単純に表型分散とみなして、表型分散に占める相加的遺伝分散の割合が .4、肥育農家の効果の分散が .2 となるように設定した値 ($\sigma_{0[0]}^2 = 410.62$ 、 $\sigma_{1[0]}^2 = 821.24$ および $\sigma_{2[0]}^2 = 821.24$) を用いた。

なお、収束に関しては、連続した 2 反復ラウンドにおける分散比 $r_1 (= \sigma_0^2 / \sigma_1^2)$ および $r_2 (= \sigma_0^2 / \sigma_2^2)$ の推定値の差が、いずれについても 10^{-6} 未満となった場合に収束に達したと判断した。

5.3.3 結 果

拡張 AIREMLm 法および EMREMLa 法による分析結果を表 5.2 に示した。AIREMLm 法は、理論的に期待されたとおり、良好に機能し、両法による各分散成分の推定値は、肥育農家分散: $226.7kg^2$ 、個体分散: $703.8kg^2$ ならびに残差分散: $844.9kg^2$ であり、極めて近い値に収束した。要した反復回数は、AIREMLm: 7 回および EMREMLa: 45 回であり、同一の初期値からスタートしたにもかかわらず、AIREMLm 法で必要とされた反復回数は EMREMLa 法のその 1/6 以下であった。

AIREMLm 法は、点推定の終了時点で REML 推定値の抽出 (共) 分散の推定値および標準誤差をも与える方法であり、肥育農家分散、個体分散および残差分散の推定値の標準誤差は、それぞれ約 $53.5kg^2$ 、 $118.3kg^2$ および $80.2kg^2$ であった。

表 5.2 数値分析の結果

推定手法	反復回数	分散成分推定値 (kg^2)		
		肥育農家 (σ_1^2)	個体 (相加的 遺伝, σ_2^2)	残差 (σ_0^2)
AIREMLm	7	226.7082 (± 53.4625)*	703.8631 (± 118.3376)*	844.9227 (± 80.1613)*
EMREMLa	45	226.7054	703.8431	844.9366

* AI 行列に基づく推定値の標準誤差

5.4 考 察

本章では、多数の変量効果を含む一般混合線形モデルを仮定して、REML の対数尤度関数に関する平均情報を要素とする AI 行列の一形態を導出し、前章で開発した AIREMLm 法について多分散成分の REML 推定法への一般化を図った。REML に関する平均情報は、(5.5) 式、(5.6) 式ならびに (5.7) 式間の相互関係から明らかなように、 \mathbf{y} の 2 次形式 $\mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}$ の分散パラメータに関する 2 階偏導関数に等しく、観測情報のデータパートに相当するものである。本研究で示されたように、多分散成分を含む一般混合線形モデルの場合にも、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列の部分行列と同方程式の解ベクトルの部分ベクトルによって AI 行列の各要素を表すことが可能であり、その結果、Johnson と Thompson (1995) のアプローチの場合とは異なり、予測残差効果のベクトル $\hat{\mathbf{e}}$ を含まない AI 行列表現が可能であった。多分散成分モデルに関するこのようなタイプの AI 行列が、前章で検討を加えた基本混合線形モデルに関する AI 行列と特徴的に異なる点は、新たに $\hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{G}_j^{-1}\hat{\mathbf{u}}_j$ のような双 1 次形式の項が含まれる点である。

残差以外に複数の変量効果を含む一般混合線形モデルのうちで、最も簡単なモデルは (5.10) 式のようなモデルである。このモデルは、家畜育種および動物遺伝の分野での例を挙げれば、第 4 章で仮定した基本混合線形モデルの一種すなわち個体の育種価 (相加的遺伝子型価) と残差のみを含む個体モデルに、それらと相関関係にない第 3 の変量効果が加えられたモデルに相当する。その場合の第 3 の変量効果としては、例えば、同一個体に関する乳量などの繰り返し記録の分析では、個体の永続的環境効果が取り上げられ、永続的環境分散も推定の対象となる。加えて、多胎動物の発育形質などの分析では、同腹子効果が取り上げられ、共通環境分散の推定も行われる。さらに、 \mathbf{G}_1 として相加的血縁行列を考慮しての個体の育種価の当てはめのみに留まらず、 \mathbf{G}_2 として優性血縁行列を考慮することによって優性偏差をも当てはめれば、その場合にも基本混合線形モデルは (5.10) 式のモデルへと拡張されることになる。また、本数値分析で取り扱ったように、農家や群の効果が状況に応じて変量効果とみなされる場合も少なくない。よって、モデル (5.10) は当該分野では極めて重要なモデルであり、AIREMLm 法が (5.10) 式をはじめとする一般

混合線形モデルにおける多分散成分推定法へと拡張された意義は大きいと考えられる。

REML 推定に当って広範に普及している REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数を利用したアルゴリズム、すなわち EM アルゴリズム (Dempster ら, 1977) タイプのアルゴリズムによる反復推定式には、 $\hat{\mathbf{e}}$ の 2 次形式すなわち $\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}$ の項を含む形態と含まない形態とが存在する (Harville, 1977)。後者の推定式には、 $\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}$ の代わりに観測値ベクトル \mathbf{y} に関する 2 次形式すなわち $\mathbf{y}'\mathbf{y}$, $\hat{\mathbf{b}}'\mathbf{X}'\mathbf{y}$ ならびに $\sum_{i=1}^s \hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{Z}_i'\mathbf{y}$ などが含まれる。5.2 節から明らかなように、AI 行列の一要素として $\hat{\mathbf{e}}'\mathbf{P}\hat{\mathbf{e}}$ が含まれるが、この 2 次形式は $\hat{\mathbf{e}}'\hat{\mathbf{e}}$ の関数であり、結果的に、本章で検討した AI 行列の当該要素には、前述の \mathbf{y} ベクトルの 2 次形式が全て含まれることが分かる。したがって、本章で導出した AI 行列は、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数についての $\hat{\mathbf{e}}$ を含まない表記を、 $\mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}$ の 2 階偏導関数のケースへと拡張した場合に相当すると解釈される。その結果、本 AI 行列では、特有な 2 次形式 $\hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ii}\mathbf{G}_i^{-1}\hat{\mathbf{u}}_i$ 項および双 1 次形式 $\hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{G}_j^{-1}\hat{\mathbf{u}}_j$ ($i \neq j$) 項が新たに定義され、後者の双 1 次形式は、先にも述べたように、とくに多分散成分モデルに関してのみ出現する項である。

このように、本 AI 行列の各要素を構成する上では、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列 (の部分行列) が必須であり、同方程式の一般化逆行列の利用による直接解法が前提となる。この点に関して、家畜育種の分野などで大容量のデータセットを対象として本 AI 行列を作成する場合には、必然的に、サイズの極めて大きな混合モデル方程式系への直接解法の適用が求められることになる。しかし、家畜育種分野の標本データに関する混合モデル方程式の係数行列は一般に疎行列であるので、疎行列のための優れた技法およびそのためのサブルーティン FSPAK (Perez-Enciso, 1994) などを利用して対応することができる。

AIREMLm 推定値と EMREMLa 推定値とは、理論的には全く同一の値に収束することが期待されるが、本数値分析では厳密には一致しなかった。このような現象は、EMREMLa 法の相対的な収束速度の遅さに起因するものである。AIREMLm 法で採用された準ニュートン法には、パラメータの初期値に影響されて分析を失敗させる確率が否定されないという難点がある反面、収束方向に向かいつつある推定値を一気に収束へと至らしめる、いわ

ゆる“反復推定値に磨きをかける”性質があり、この手法は、収束値近傍においてとくに優れた能力を発揮するといわれている (Press ら, 1992) 手法である。したがって、ここでの数値結果に関して、AIREMLm 法による推定値の方が最終的な推定値により近い値であると考えられる。換言すれば、さらなる反復演算の追加により、EMREMLa の推定値が AIREMLm の推定値へと漸近していくことが理論的に期待できる。

Aitken 加速を利用した EMREMLa 法は、本数値分析の場合のように、比較的シンプルな混合線形モデル下で適用された場合には有効であり、単純な EMREML 法に比べてはるかに有用であると推察される。しかしながら、Aitken 加速はグラフィカルな加速法であり、連続した三つのラウンドにおける推定値の増減に一貫性がみられないような場合には、加速を行うことができない。よって、多数の分散成分の推定を要する分析においてしばしば観察される現象すなわち反復初期における推定値の大幅な変動現象には対応できないという実用上の制約がある。一方、そのようなケースにおいても AIREMLm 法の適用は可能であり、しかも相対的に少数の反復回数で収束が達成され、この方法は演算時間に関して優れた特性を有するものと考えられる。

演算容量の点に関しても、本拡張 AIREMLm 法が前章で詳細に考察を加えたような良好な特性を保持していることは、ここで導出した一般化 AI 行列の形態から明らかである。すなわち、(5.12) 式には、第 4 章での AI 行列に含まれたタイプの複数の 2 次形式に加えて、複数の特徴的な双 1 次形式のみが追加されている。したがって、本 AIREMLm 法のプログラムで必要とされる演算容量は、EM アルゴリズムに基づく REML プログラムの場合と本質的に同一である一方、Johnson と Thompson の AI 行列に基づく REML 法のプログラムと比較した場合には、より少なくて済むことが期待される。

よって、以上の各種の観点から総合的に判断する限り、本章で開発した拡張 AIREMLm 法は、一般混合線形モデルにおける多分散成分の REML 点推定ならびにそれらの抽出 (共) 分散推定のための実用的な演算手法であると考えられる。

5.5 要 約

本章では、多種類の変量効果を含む一般混合線形モデルを仮定して、前章で導出した AI 行列の一般形を導いた。次に、この一般形でヘシアン行列を置き換え、準ニュートン法による REML 反復推定式を定義して、AIREMLm 法の機能の拡張を図った。ここで導出した一般化 AI 行列には、基本混合線形モデルを対象とした場合に含まれたタイプの複数の 2 次形式に加えて、混合モデル方程式の解ベクトルの部分ベクトルによる特徴的な複数の双 1 次形式が含まれるのみであった。したがって、本拡張 AIREMLm 法においても、前章で開発した AIREMLm 法の相対的な演算特性がそのまま保持されていることが理論的に明らかであった。実際に、黒毛和種の枝肉重量に関する一データセットを用いて、本 AIREMLm 法による数値分析を実施したところ、Aitken 加速を利用した EM アルゴリズム - REML 法と比べても、より優れた演算特性が認められた。よって、本拡張 AIREMLm 法は、一般混合線形多分散成分モデルを対象とする REML 点推定ならびに推定値の抽出 (共) 分散の推定に際して、有効かつ効率的な演算手法であると考えられた。

第6章 REML 推定のための AI および EM アルゴリズムを結合した演算手法

6.1 緒言

本研究ではこれまでに、第4章において、残差効果以外に一つの変量効果を含む混合線形モデルの基本形を仮定して、分散成分の REML 推定のための AI アルゴリズムに基づく新たな演算手法すなわち AIREMLm 法を定義した。さらに第5章では、当該法について、一般混合線形モデルにおける多分散成分の推定問題に対応し得る方法へと拡張を図った。その際、本 AIREMLm 法における反復推定のための数値的演算法としては、Johnson と Thompson (1995) に応じて準ニュートン法を採用した。Johnson と Thompson (1995) は、ロムニー羊の離乳時体重に関する約 2,300 記録を AI アルゴリズムに基づく別法で REML 分析し、彼らのアプローチの中で準ニュートン法が良好に機能したことを報告している。著者が先に、AIREMLm 法による数値分析例として実施した、黒毛和種肥育牛の枝肉形質に関する相加的遺伝分散ならびに残差分散の推定においても、準ニュートン法による反復推定に何ら問題点は認められなかった。

この点に関して、(準)ニュートン法は非線形関数の最大化のために用いられる典型的な手法の一つではあるが、この方法には大域的収束が必ずしも保障されないという理論的弱点が存在する。また、パラメータ推定値のパラメータ空間内での収束を完全に保障するアプローチとはいえない。よって、(準)ニュートン法が分散成分の推定問題に応用された場合には、分散成分は非負値として定義されるパラメータであるにもかかわらず、とくに小標本を対象とした場合などに負の反復推定値の与えられる可能性が否定されない。このようなパラメータ空間外の負の分散成分推定値の生起は、ANOVA 型の推定法である最小分散 2 次不偏推定 (MIVQUE; LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) アルゴリズムの利用に際しても認められる現象であり、常にパラメータ空間内の値への収束が保障されている EM アルゴリズムなどの応用ではみられない現象である。

そこで、もし(準)ニュートン法による反復推定過程のある段階で何らかの障害が生じたときの対応策としては、Marquardt (1963) の方法の利用が考えられる (例えば, Searle

ら, 1992)。この方法は、最終推定値の検索過程におけるステップサイズを部分的に決定する「実数パラメータ」を導入した、(準)ニュートン法と最速降下法との折衷的手法である。それ故、Marquardtの方法を採用すれば、当該の「実数パラメータ」値を適宜適切に設定することによって、分散成分の定義域内の反復推定値を保障することが可能と考えられる。しかしながら、「実数パラメータ」の適切な値は、対象とする標本ごとに、また反復推定のステップごとに異なると予想され、常に適当な値を設定するためには、(準)ニュートン法での演算過程のプログラミングの場合に比べてより複雑なコンピュータプログラミングが要求される。

そこで、本章では、(準)ニュートン法による AIREMLm 法の収束を速める利点と EM アルゴリズムのパラメータ空間内の反復推定値を保障する利点とを組み合わせた、REML 推定のための新たなアプローチを開発し、具体的な数値分析を通じてその有効性を実証する。

6.2 理 論

6.2.1 混合線形モデル

いま、一般性を失わせることなくここでの課題を簡単に取り扱うために、混合線形モデルとして

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}_1\mathbf{u}_1 + \mathbf{Z}_2\mathbf{u}_2 + \mathbf{e} \quad (6.1)$$

ただし、

\mathbf{y} : 観測値の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{b} : 母数効果の $p \times 1$ ベクトル

\mathbf{u}_1 および \mathbf{u}_2 : それぞれ変量効果の $(q_1 \times 1)$ および $(q_2 \times 1)$ ベクトル

\mathbf{e} : 残差効果 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

\mathbf{X} , \mathbf{Z}_1 および \mathbf{Z}_2 : それぞれ $N \times p$, $N \times q_1$ および $N \times q_2$ の計画行列,

を用いる。このモデルに関する変量効果の期待値および散布度パラメータは、

$$E \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Xb} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \text{Var} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1\sigma_1^2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G}_2\sigma_2^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{R}\sigma_0^2 \end{bmatrix}$$

$$\text{Var}[\mathbf{y}] = \mathbf{Z}_1\mathbf{G}_1\mathbf{Z}_1'\sigma_1^2 + \mathbf{Z}_2\mathbf{G}_2\mathbf{Z}_2'\sigma_2^2 + \mathbf{R}\sigma_0^2$$

と仮定する。ここで、 σ_1^2 , σ_2^2 および σ_0^2 は、それぞれ 1 番目, 2 番目の変量効果および残差に関する各分散成分パラメータを表す。

6.2.2 EM-REML 反復推定式

モデル (6.1) に関して、EM アルゴリズムによる REML 反復推定式の典型的な一形態は、 $[\hat{\mathbf{b}}' : \hat{\mathbf{u}}_1' : \hat{\mathbf{u}}_2']'$ を混合モデル方程式の解ベクトル、 $\mathbf{C} = \{\mathbf{C}_{ij}\}$ ($i, j = 0 \sim 2$) を混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列およびその部分行列として

$$\hat{\sigma}_{0[t+1]}^2 = \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_1\hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}_1\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1\hat{r}_{1[t]} - \hat{\mathbf{u}}_2\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2\hat{r}_{2[t]}}{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11})\hat{r}_{1[t]} + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22})\hat{r}_{2[t]}} \quad (6.2)$$

$$\hat{\sigma}_{1[t+1]}^2 = \{\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11})\sigma_{0[t+1]}^2\}/q_1 \quad (6.3)$$

$$\hat{\sigma}_{2[t+1]}^2 = \{\hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22})\sigma_{0[t+1]}^2\}/q_2 \quad (6.4)$$

ただし、 r_i は分散比: $r_i = \sigma_0^2\sigma_i^{-2}$; $i = 1, 2$

記号 $\hat{}$ ならびに添字 $[t]$ は、 t 番目の反復ラウンドにおける

推定値であることを表す、

により与えられる (例えば, Harville, 1977)。

6.2.3 AIREMLm 法における AI 行列

一方、AIREMLm 法における AI 行列は、第 4 章および第 5 章における導出結果から、

$$\mathcal{A}(\theta) = \begin{bmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

$$\begin{aligned}
\theta &= [\sigma_0^2 \quad \sigma_1^2 \quad \sigma_2^2]' \\
a_{00} &= \frac{1}{2} \{ \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_1\hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 r_1 - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_2 \\
&\quad - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 r_1^2 - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_2^2 \\
&\quad - 2\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{12}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2 \} \sigma_0^{-6} \quad (6.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{01} &= a_{10} \\
&= \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 r_1^2 + \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{12}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2) \sigma_0^{-4} \sigma_1^{-2} \quad (6.7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{02} &= a_{20} \\
&= \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_2^2 + \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{12}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2) \sigma_0^{-4} \sigma_2^{-2} \quad (6.8)
\end{aligned}$$

$$a_{11} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 r_1 - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11}\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 r_1^2) \sigma_0^{-2} \sigma_1^{-4} \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned}
a_{12} &= a_{21} \\
&= -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{12}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_1 r_2 \sigma_0^{-2} \sigma_1^{-2} \sigma_2^{-2} \quad (6.10)
\end{aligned}$$

$$a_{22} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_2 - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 r_2^2) \sigma_0^{-2} \sigma_2^{-4} \quad (6.11)$$

と表される。

6.2.4 EM アルゴリズムを併用した AIREMLm 法

(6.5) 式を用いた AIREMLm 法におけるニュートンタイプの演算公式は、

$$\hat{\theta}_{[t+1]} = \hat{\theta}_{[t]} + \mathcal{A}(\hat{\theta}_{[t]})^{-1} \mathbf{d}(\hat{\theta}_{[t]}) \quad (6.12)$$

ただし、

$\hat{\theta}_{[t+1]}$ および $\hat{\theta}_{[t]}$: それぞれ、 $t+1$ および t 番目の反復ラウンドにおける

分散成分推定値のベクトル

$\mathcal{A}(\hat{\theta}_{[t]})$: $\hat{\theta}_{[t]}$ に基づく AI 行列

$\mathbf{d}(\hat{\theta}_{[t]})$: $\hat{\theta}_{[t]}$ に基づく REML 対数尤度関数の 1 階導関数のベクトル、

として与えられる。この公式に関して、勾配ベクトルである $\mathbf{d}(\theta) = \partial L / \partial \theta$ の具体的な構造をみると、

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1}$$

として

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_0^2} &= -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{P}) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P}^2 \mathbf{y} \\ &= -\frac{1}{2} \{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{11}) \alpha_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{C}_{22}) \alpha_2\} \sigma_0^{-2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{e}}' \hat{\mathbf{e}} \sigma_0^{-4} \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_1^2} &= -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{G}_1 \mathbf{Z}' \mathbf{P} \mathbf{Z}_1) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{Z}_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{Z}_1' \mathbf{P} \mathbf{y} \\ &= -\frac{1}{2} \{q_1 - \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{11}) \alpha_1\} \sigma_1^{-2} + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} \hat{\mathbf{u}}_1 \sigma_1^{-4} \end{aligned} \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \sigma_2^2} &= -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{G}_2 \mathbf{Z}' \mathbf{P} \mathbf{Z}_2) + \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{Z}_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{Z}_2' \mathbf{P} \mathbf{y} \\ &= -\frac{1}{2} \{q_2 - \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{C}_{22}) \alpha_2\} \sigma_2^{-2} + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 \sigma_2^{-4} \end{aligned} \quad (6.15)$$

である。

そこで、いま、(6.13) 式の左辺を 0 と置けば

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{e}}' \hat{\mathbf{e}} \sigma_0^{-4} &= \{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{11}) r_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{C}_{22}) r_2\} \sigma_0^{-2} \\ \sigma_0^2 &= \tilde{\mathbf{e}}' \hat{\mathbf{e}} / \{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1} \mathbf{C}_{11}) r_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{C}_{22}) r_2\} \end{aligned}$$

が得られ、この式の右辺の分子項に関して、

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{e}}' \hat{\mathbf{e}} &= \tilde{\mathbf{e}}' (\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} - \mathbf{Z}_1 \hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{Z}_2 \hat{\mathbf{u}}_2) \\ &= \tilde{\mathbf{e}}' \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{e}}' \mathbf{W} \mathbf{C} \mathbf{W}' \mathbf{y} \\ &= \tilde{\mathbf{e}}' \mathbf{y} - \mathbf{y}' \mathbf{W} \mathbf{C} \mathbf{W}' \mathbf{y} + \mathbf{y}' \mathbf{W} (\mathbf{I} - \mathbf{C} \mathbf{B}) \mathbf{C} \mathbf{W}' \mathbf{y} \\ &= \tilde{\mathbf{e}}' \mathbf{y} - [\hat{\mathbf{b}}' : \hat{\mathbf{u}}_1' : \hat{\mathbf{u}}_2'] \mathbf{B} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{u}}_1 \\ \hat{\mathbf{u}}_2 \end{bmatrix} \\ &= \mathbf{y}' \mathbf{y} - \mathbf{y}' \mathbf{X}' \hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}' \mathbf{Z}_1' \hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{y}' \mathbf{Z}_2' \hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}_1' \mathbf{G}_1^{-1} \hat{\mathbf{u}}_1 r_1 - \hat{\mathbf{u}}_2' \mathbf{G}_2^{-1} \hat{\mathbf{u}}_2 r_2 \end{aligned}$$

ただし、 $\mathbf{W} = [\mathbf{X} : \mathbf{Z}_1 : \mathbf{Z}_2]$ および

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_1^{-1}r_1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{G}_2^{-1}r_2 \end{bmatrix},$$

であるので、結果的に

$$\sigma_0^2 = \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_1\hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{y}'\mathbf{Z}_2\hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1r_1 - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_2}{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11})r_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22})r_2} \quad (6.16)$$

を得る。

同様に、(6.14) 式および (6.15) 式の左辺を 0 と置くことにより、

$$\begin{aligned} q_1\sigma_1^{-2} &= \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11})(\sigma_0^2\sigma_1^{-2})\sigma_1^{-2} + \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1\sigma_1^{-4} \\ \sigma_1^2 &= \{\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1 + \text{tr}(\mathbf{G}_1^{-1}\mathbf{C}_{11})\sigma_0^2\}/q_1 \end{aligned} \quad (6.17)$$

および

$$\sigma_2^2 = \{\hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2 + \text{tr}(\mathbf{G}_2^{-1}\mathbf{C}_{22})\sigma_0^2\}/q_2 \quad (6.18)$$

が得られる。よって、(6.16) 式から (6.18) 式までの各式と (6.6) 式から (6.11) 式までの式として与えられた AI 行列の各要素とを比べれば、AI 行列の要素の中に、EM アルゴリズムによる一推定公式 (すなわち (6.16) 式から (6.18) 式) 中の全ての項が自動的に含まれていることが分かる。

以上の点に着目すれば、EM アルゴリズムによる演算手法の利点および AI アルゴリズムによる演算手法の利点の両者を取り込んだ演算手法が、第 4 章における AIREMLm 法の演算手順に応じて、以下のように定義される。

- 1) 分散成分の初期値の設定
- 2) 混合モデル方程式のオーダリングを検索し、逆行列演算の効率化を図る
- 3) 所与の初期値もしくは直前の反復ラウンドにおける推定値に基づき、混合モデル方程式を作成

- 4) 当該ラウンドにおける混合モデル方程式解、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数のベクトルならびに AI 行列およびその逆行列を演算 (これらの演算要素は EM 推定に必要な演算要素を内包する)
- 5) 4) で得られた演算項より、準ニュートン法を利用して当該ラウンドにおける AIREML_m 推定値を計算。この値がパラメータ空間内の場合には 7) に進む
- 6) 4) で得られた演算項より、EMREML 推定値を計算
- 7) 収束判定。所与の収束基準が満たされなかったときは 3) に戻る
- 8) 収束値 (REML 推定値) の抽出 (共) 分散および標準誤差を算出。その際、最終ラウンドの 4) において既に計算されている AI 行列の逆行列を再利用

なお、本 REML 推定手法を AIREML_m 法と呼ぶこととする。

6.3 数値分析

6.3.1 データ

本分析に供したデータセットは、7 県より (社) 全国和牛登録協会を介して提供された、黒毛和種肥育牛の枝肉 6 形質 (枝肉重量, ロース芯面積, バラ厚, 皮下脂肪厚, 歩留基準値および脂肪交雑評点) に関する 7 個のセットである。よって、分析対象とした総標本数は 42 ($= 6 \times 7$) 個であった。これらのデータは、各県における枝肉記録の公式収集システムを通じて得られたものである。各データセットにおける肥育牛数、それらの個体から血統を溯って出現する祖先個体数ならびに分析対象個体の総数については表 6.1 に示したとおりであり、データセットのサイズとしては、比較的小規模のものから適度の規模のものまでが含まれていた。

表 6.1 分析対象データセットのサイズ

データセット	所有県	肥育牛数	祖先個体数	総個体数
S	滋賀	1,300	3,088	4,388
I _B	茨城	1,323	2,541	3,864
F	福島	3,709	7,803	11,512
A	青森	3,727	6,331	10,058
O	大分	13,517	16,281	29,798
G	岐阜	14,087	23,853	37,939
I _W	岩手	22,631	33,341	55,972

6.3.2 方 法

分析のための数学モデルとしては、いずれのデータセットに関しても (6.1) 式を設定し、 \mathbf{u}_1 の変量効果として肥育農家の効果を、 \mathbf{u}_2 の変量効果として個体の相加的遺伝子型値すなわち育種価を取り上げた。(6.1) 式において \mathbf{b} ベクトルとして示した種々の母数効果の本分析における内容ならびにデータセットごとの水準数については、表 6.2 に示したとおりである。

本研究では、42 個の標本個々について、まず、分析 I として第 5 章で開発した拡張 AIREMLm 法を適用し、肥育農家分散、個体分散 (すなわち相加的遺伝分散) ならびに残差分散を推定して、標本によってはパラメータ空間外の異常値が得られる場合があり得ることを具体的に確認した。その際、比較の対象として、(社) 全国和牛登録協会と各県が連携して実施している「和牛産肉能力の遺伝的評価体制」の中で公式分析手法として採用されている Aitken 加速法を導入した EM アルゴリズム - REML 法 (ここでは、EMREMLa 法と呼ぶ) による推定も実施した。なお、Aitken 加速法は、一般に収束が遅い EM アルゴリズムでの収束を速めるために、連続した反復推定値の変化率の情報から将来の到達地点を近似計算し、その値を次回の EMREML の推定ラウンドにおける事前情報として利用する手法である。すなわち、 $t-2$, $t-1$ および t 番目の反復ラウンドでの分散成分の EMREML 推定値をそれぞれ $\hat{\sigma}_{i[t-2]}^2$, $\hat{\sigma}_{i[t-1]}^2$ および $\hat{\sigma}_{i[t]}^2$ で表せば、変化率 λ を

$$\lambda = \frac{\hat{\sigma}_{i[t]}^2 - \hat{\sigma}_{i[t-1]}^2}{\hat{\sigma}_{i[t-1]}^2 - \hat{\sigma}_{i[t-2]}^2}$$

として

$$\tilde{\sigma}_{i[t+1]}^2 = (\hat{\sigma}_{i[t]}^2 - \lambda \hat{\sigma}_{i[t-1]}^2) / (1 - \lambda)$$

なる Aitken 加速値 $\tilde{\sigma}_{i[t+1]}^2$ を次回の反復ラウンドにおける事前情報とする。EMREML 反復においては、数ラウンドに 1 回程度の割合で Aitken 加速をかけることにより、収束を大幅に速めることが可能である。

次いで、AIREMLm 法が順当な収束に失敗したケースに関して、分析 II として本章で開発した AIREMLme 法を適用し、反復回数および推定値などの結果がどのように改善

表 6.2 取り上げた母数因子ならびに水準数

データ セット	母数因子	区 分	水準数	備 考
S	出荷年次	主効果	4	1992~1997 年 (一部グループ化)
	肥育農家	(変量効果)	36	5 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 31.4ヵ月
	近交係数	共変量	1	平均: 3.32%
.....				
I _B	出荷年次	主効果	8	1988~1998 年 (一部グループ化)
	食肉市場	主効果	3	5 市場をグループ化
	肥育農家	(変量効果)	79	5 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 31.7ヵ月
F	近交係数	共変量	1	平均: 1.18%
.....				
F	出荷年次	主効果	7	1988~1997 年 (一部グループ化)
	食肉市場	主効果	4	8 市場をグループ化
	肥育農家	(変量効果)	199	5 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 30.7ヵ月
A	近交係数	共変量	1	平均: 1.50%
.....				
A	出荷年次	主効果	5	1989~1998 年 (一部グループ化)
	食肉市場	主効果	3	13 市場をグループ化
	肥育農家	(変量効果)	132	5 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 31.8ヵ月
	近交係数	共変量	1	平均: 1.30%
			

データ

セット	母数因子	区分	水準数	備考
O	出荷年次	主効果	9	1989~1997 年
	食肉市場	主効果	4	4 市場
	肥育農家	(変量効果)	182	5 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 28.8ヵ月
	近交係数	共変量	1	平均: 1.43%
	<hr/>			
G	出荷年次	主効果	9	1988~1997 年 (一部グループ化)
	食肉市場	主効果	2	8 市場をグループ化
	肥育農家	(変量効果)	156	10 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 27.1ヵ月
	近交係数	共変量	1	平均: 3.16%
	<hr/>			
I _w	出荷年次	主効果	7	1988~1997 年 (一部グループ化)
	食肉市場	主効果	6	21 市場をグループ化
	肥育農家	(変量効果)	487	10 頭以上出荷の農家とその他グループ
	性	主効果	2	去勢牛・雌牛
	屠殺月齢	共変量	2	平均: 30.2ヵ月
	近交係数	共変量	1	平均: 1.18%

されうるかという点について検討を加えた。

計算に必要なコンピュータプログラムの作成は、すべて WATCOM FORTRAN 77/32 により、米国ジョージア大学で近年開発された疎行列演算用の強力なサブルーティンである FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) を用いて実施した。

計算は、(社) 全国和牛登録協会のワークステーション (NEC 社: EWS4800/360AD, CPU: 149MIPS R4400SC (75MHz); メモリ: 96MB) および当研究室のパーソナルコンピュータ (EPSON 社: VL-633E, CPU: Pentium II (333MHz); メモリ: 256MB) で行った。その際の分散成分の初期値としては、各分析形質の観測値の標本分散を計算してその値を母集団における表型分散とみなし、それらに占める農家分散および相加的遺伝分散の割合がそれぞれ .2 および .4 となるように設定した値を用いた。収束判定に関しては、隣接した反復ラウンドにおける分散比 r の推定値の変化量が 10^{-6} 未満となった場合に収束とみなした。

6.3.3 結 果

分析 I に関する結果は、表 6.3 に示したとおりである。42 個の標本のすべてに関して、農家分散、個体分散および残差分散成分の EMREMLa 法による推定値はいずれも正常に収束に達し、パラメータ空間内の REML 推定値が得られた。その際、収束に要した反復回数は、31 回から 299 回の範囲内の値であった。一方、AIREMLm 法も、サイズが相対的に小規模であった S および I_B 以外のデータセットに関する標本をはじめとして、90% 以上の標本についてパラメータ空間内の REML 推定値を与え、それらの推定値は EMREMLa 法による推定値と一致した。しかも、AIREMLa 推定値が正常収束した場合に要した反復回数は、EMREMLa 法の場合の概ね 5 分の 1 ないし 6 分の 1 の値であり、優れた収束特性が認められた。

しかるに、AIREMLm 法は、データセット S に関する 2 標本およびデータセット I_B に関する 1 標本の計 3 標本で正常な収束に失敗した。すなわち、データセット S に属する歩留基準値および I_B での皮下脂肪厚の標本データにおいては、農家分散成分がそれぞ

表 6.3 枝肉形質の標本データに関する推定結果

データ セット	分析形質	演算手法	反 復 回 数	分散成分推定値		
				農 家	相加的遺伝	残 差
S	枝肉重量	AIREMLm	10	162.8325	1370.5543	409.3440
		EMREMLa	71	162.8289	1370.4726	409.4034
	コース芯面積	AIREMLm	—	—	—	—
		EMREMLa	72	1.1336	22.9800	20.5733
	バラ厚	AIREMLm	7	.0815	.2121	.3554
		EMREMLa	45	.0815	.2121	.3555
	皮下脂肪厚	AIREMLm	8	.0175	.0636	.1864
		EMREMLa	52	.0175	.0636	.1864
	歩留基準値	AIREMLm	147	-.0127	.3909	.5045
		EMREMLa	43	.0202	.5034	.5477
	脂肪交雑評点	AIREMLm	15	.0170	.1805	.0830
		EMREMLa	61	.0170	.1804	.0831
I _B	枝肉重量	AIREMLm	16	129.5679	934.1917	714.5600
		EMREMLa	49	129.5673	934.0643	714.5600
	コース芯面積	AIREMLm	45	3.4309	36.3219	14.9897
		EMREMLa	49	3.4309	36.3166	14.9935
	バラ厚	AIREMLm	22	.0428	.4158	.2578
		EMREMLa	58	.0428	.4158	.2578
	皮下脂肪厚	AIREMLm	3	-.0700	.3488	.2556
		EMREMLa	299	.0082	.2562	.3241
	歩留基準値	AIREMLm	15	.1164	.7953	.9138
		EMREMLa	47	.1164	.7954	.9137
	脂肪交雑評点	AIREMLm	8	.1975	.5901	.2785
		EMREMLa	55	.1975	.5901	.2786
F	枝肉重量	AIREMLm	9	318.8338	1004.9466	706.9019
		EMREMLa	52	318.8322	1004.9502	706.9033
	コース芯面積	AIREMLm	16	2.7375	20.0219	26.6536
		EMREMLa	65	2.7374	20.0220	26.6536
	バラ厚	AIREMLm	12	.0547	.2405	.3383
		EMREMLa	52	.0547	.2406	.3383
	皮下脂肪厚	AIREMLm	19	.0253	.2231	.2244
		EMREMLa	42	.0253	.2231	.2244
	歩留基準値	AIREMLm	12	.0720	.5344	.8615
		EMREMLa	63	.0720	.5344	.8615
	脂肪交雑評点	AIREMLm	13	.0713	.3654	.2891
		EMREMLa	49	.0713	.3654	.2891

データ セット	分析形質	演算手法	反復 回数	分散成分推定値		
				農家	相加的遺伝	残差
A	枝肉重量	AIREMLm	7	344.0071	819.7246	883.1500
		EMREMLa	41	344.0039	819.7232	883.1517
	コース芯面積	AIREMLm	6	3.0491	14.8610	28.4300
		EMREMLa	41	3.0492	14.8600	28.4300
	バラ厚	AIREMLm	6	.0744	.1862	.4210
		EMREMLa	46	.0744	.1861	.4211
	皮下脂肪厚	AIREMLm	8	.0306	.1194	.3615
		EMREMLa	55	.0306	.0094	.3616
	歩留基準値	AIREMLm	9	.0649	.6389	.8408
		EMREMLa	45	.0649	.6389	.8408
O	枝肉重量	AIREMLm	6	346.0889	1036.9544	663.1600
		EMREMLa	52	346.0876	1036.9540	663.1601
	コース芯面積	AIREMLm	8	2.3251	22.0235	23.2524
		EMREMLa	43	2.3251	22.0235	23.2524
	バラ厚	AIREMLm	6	.0603	.2781	.3157
		EMREMLa	74	.0603	.2781	.3157
	皮下脂肪厚	AIREMLm	8	.0456	.4548	.3493
		EMREMLa	44	.0456	.4547	.3492
	歩留基準値	AIREMLm	8	.0779	.9490	.8609
		EMREMLa	43	.0779	.9490	.8609
G	枝肉重量	AIREMLm	6	215.6387	979.5485	681.7658
		EMREMLa	49	215.6385	979.5484	681.7659
	コース芯面積	AIREMLm	8	2.0000	28.6276	18.7303
		EMREMLa	55	2.0000	28.6275	18.7303
	バラ厚	AIREMLm	5	.0649	.2914	.3754
		EMREMLa	40	.0649	.2913	.3754
	皮下脂肪厚	AIREMLm	7	.0362	.3311	.2455
		EMREMLa	46	.0362	.3311	.2455
	歩留基準値	AIREMLm	9	.0566	.9388	.6266
		EMREMLa	58	.0566	.9388	.6266
	脂肪交雑評点	AIREMLm	5	.0568	.0396	.2834
		EMREMLa	52	.0568	.0396	.2834

データ セット	分析形質	演算手法	反復 回数	分散成分推定値		
				農家	相加的遺伝	残差
I _w	枝肉重量	AIREMLm	6	267.3645	1046.7375	631.6388
		EMREMLa	49	267.3634	1046.7321	631.6436
	コース芯面積	AIREMLm	8	2.1146	20.1524	23.7700
		EMREMLa	37	2.1146	20.1505	23.7708
	バラ厚	AIREMLm	6	.0550	.2386	.3880
		EMREMLa	58	.0550	.2386	.3880
	皮下脂肪厚	AIREMLm	9	.0273	.2659	.2867
		EMREMLa	40	.0273	.2659	.2867
	歩留基準値	AIREMLm	8	.0641	.8138	.6747
		EMREMLa	40	.0641	.8138	.6747
	脂肪交雑評点	AIREMLm	7	.0824	.5403	.2649
		EMREMLa	55	.0824	.5402	.2649

れ-0.0127 および -0.0700 と推定され、パラメータ空間外の負値として与えられた。また、それに応じて、個体分散成分および残差分散成分の両推定値についても、パラメータ空間内の値ではあったものの、EMREMLa 法による正常な REML 推定値からは偏った値として与えられた。さらに、データセット S に属するローズ芯面積の標本については、プログラムの実行時に異常終了が生じ、AIREMLm 法によって各分散成分の推定値を得ること自体が不可能であった。

そこで、AIREMLm 法が REML 推定に失敗したこれら 3 標本を用いて分析 II を実施し、本章で開発した AIREMLme 法の適用を図ったところ、いずれのケースに関しても良好に機能し、各分散成分の REML 推定値が得られた (表 6.4)。AIREMLme 法による農家分散成分推定値の収束パターンは図 6.1 a~c に示した通りであり、本法では反復推定に伴う推定値の大きな振動の動きがみられず、AIREMLm 法の欠点が明らかに改善されていることが分かる。また、AIREMLme 法で収束までに要した反復回数は 9 回から 11 回の範囲内であり、AIREMLm 法による推定が正常終了した場合とレベル的に同等な結果が得られ、本 AIREMLme 法では、所要反復回数に関する AIREMLm 法の極めて望ましい性質がそのまま保持されていることが示された。

6.4 考 察

第 4 章で基本的手法を開発し、第 5 章でその一般化を図った AIREMLm 法は、AI アルゴリズムおよび準ニュートン法の反復公式を利用した、分散成分の REML 推定のための新たな演算手法であり、本研究における前章までの数値的検討では、AIREMLm 推定値の収束特性に関して問題点は見当たらなかった。しかし、擬ニュートン法は対数尤度関数を含む非線形関数の最大化に用いられる最も一般的な反復手法の一つではあるが、分散成分の反復推定問題に適用された際には、パラメータの定義域外の推定値を与える可能性を秘めた手法である。そこで、様々なサイズおよび構造の多数の標本データに AIREMLm 法を適用してみたところ、小標本を対象とした場合には、生起の頻度は極めて低かったものの、パラメータ空間外の推定値あるいは空間内ではあっても偏った推定値を与える場合

表 6.4 分析 II による推定結果

データ セット	分析形質	演算手法	反 復 回 数	分散成分推定値		
				農 家	相加的遺伝	残 差
S	ロース芯面積	AIREMLme	9	1.1335	22.9780	20.5745
		EMREMLa	72	1.1336	22.9800	20.5733
S	歩留基準値	AIREMLme	10	.0202	.5033	.5476
		EMREMLa	43	.0202	.5034	.5477
I _B	皮下脂肪厚	AIREMLme	11	.0082	.2564	.3240
		EMREMLa	299	.0082	.2562	.3241

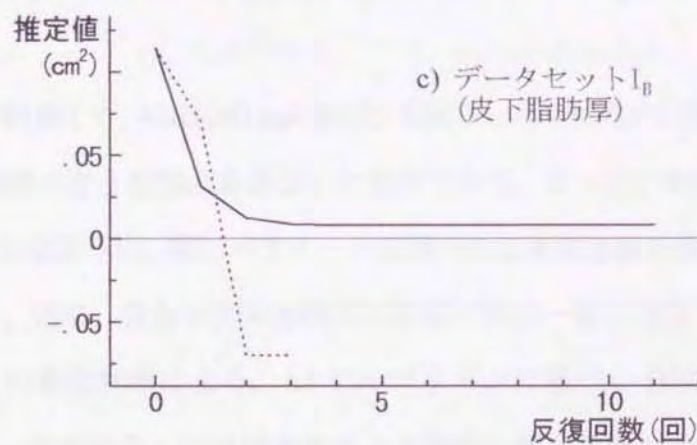
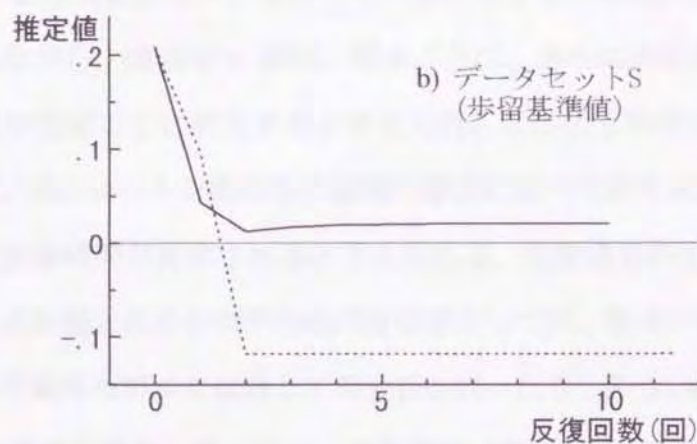
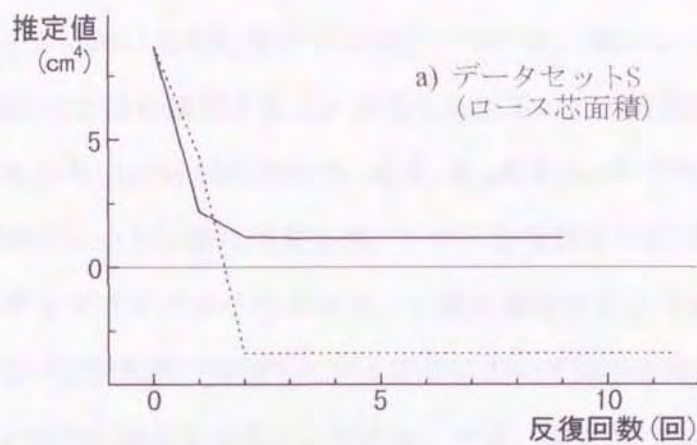


図 6.1 AIREMLme 法および AIREMLm 法における肥育農家分散推定値の収束曲線の比較 (—: AIREMLme 法;: AIREMLm 法)

や、データ構造によっては推定不能の状況が生じることが明らかとなった。

このようなケースにおける対応策としては、一つには、準ニュートン法の代わりに Marquardt (1963) の方法を適用することが考えられる。この方法は、準ニュートン法による反復公式すなわち (6.12) 式における $\mathbf{A}(\hat{\theta})$ を $\mathbf{A}(\hat{\theta}) + \tau \mathbf{I}$ で置き換えたものであり、 τ が 0 をとれば準ニュートン法に帰着され、 τ が大きな値をとれば最速降下法となっており、検索におけるステップサイズが小さくなる。 τ 値を選定する上で通常推奨されている点は、最大化されるべき関数値が増加していく限りにおいては小さな値を選定することであり、準ニュートン法的に機能させることである。一方、関数値の増加が導かれない状況下では、大きな τ 値を選定してステップサイズを小さくし、最速降下法的に働かせることである。しかしながら、適当な τ 値は、標本ごとに、さらに特定の標本を対象とした場合でも反復推定の段階ごとに変化すると考えられ、このような状況を適宜適切にカバーしようとするれば、準ニュートン法のための適用の場合に比べてより大きな演算負荷が要求され、また余分な演算時間が要求されることが考えられる。分散成分の (反復) 推定値が当該パラメータの境界点を越えたときのその他の対応策としては、標本データの記述に当てよりシンプルな実用線形モデルを仮定して再分析を行ったり、あるいはコレスキー分解などの媒介変数化の手段を導入してパラメータ空間内の推定値を強いるなどの方策も存在するが、これらのアプローチもまた、演算時間およびコストの増加や計算の複雑化を伴うと判断される。

一方、本章で開発した AIREMLme 法は、EM アルゴリズムの利点を取り込んで、AI-REMLm 法の前述のような弱点を是正した手法である。よって、本法によれば、分析 II の結果からも明らかなように、常にパラメータ空間内の収束推定値が保障される。AIREMLm のアプローチは、元来、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列ならびに解ベクトルの算出とそれらの有効利用により、AI アルゴリズムに基づく REML 推定を実現するための手法である。すなわち、一旦混合モデル方程式の解を直接解法で求めた後は、一般化逆行列の部分行列、解の部分ベクトルならびに各変量効果の共分散行列の逆行列などの項からなる適切な 2 次形式値の算出を通じて AI 行列を形成する、極めてストレートな算法である。本章の 6.2 節で理論的に展開・証明したように、幸運なことに AIREMLm

法で使用する AI 行列の中には、EM アルゴリズムの反復推定公式の形成に必要なすべての項が自動的に含まれている。なぜならば、EM アルゴリズムもまた、混合モデル方程式の係数行列の一般化逆行列および解ベクトルの情報を基礎とするアルゴリズムであるからである。よって、理論的にも、AIREMLm 法は、EM アルゴリズムの利点の導入に最も適した演算手法であると考えられる。しかも、6.2 節に記述した AIREMLme 法の実行手順からも明らかなように、本 AIREMLme 法においては、準ニュートン法を利用した AIREMLm 法の場合を実質的に上回る余分な演算プロセスは不要である。

しかし、AI アルゴリズムと EM アルゴリズムを有機的に結合したことにより、パラメータ空間内の収束推定値が保障されたとしても、その結果として収束に要する反復回数が AIREMLm アプローチの場合に比べて有意に増加するのであれば、本 AIREMLme アプローチの利点は半減してしまうことになる。この点に関しては、分析 II の結果が示しているように、AIREMLme 法では明らかに AIREMLm 法の利点そのまま保持されている。とりわけ、データセット I_B の皮下脂肪厚に関する標本は、EMREMLa 法による分析では約 300 反復を要しているところから、かなり特殊なデータ構造をとっていたと推察されるが、このような標本を対象とした場合でも、本 AIREMLme 法では 9 回の反復で REML 推定値が得られた。このような事実は、本 AIREMLme 法の極めて望ましい特性を示す劇的な結果として特筆されるべき点である。

したがって、以上のような理論的観点ならびに数値分析結果から、本章で開発した AIREMLme 法は、パラメータ空間内収束の特性と AI アルゴリズムに由来する効率的演算能力の両者を兼備した、実用的な REML 推定手法の一つであると結論づけられる。

6.5 要 約

第 4 章で開発し、第 5 章において一般化を図った AIREMLm 法は、平均情報行列の準ニュートン法への適用により定義されている。この準ニュートン法は、非線形関数の最大化問題を取り扱う際に広範に利用されている手法であり、推定値の更新が良好に機能している場合には非常に有効かつ収束性の高い手法である。しかしながら、準ニュートン法

は、パラメータ空間内への収束を常に保障するアプローチとはいえず、AIREMLm 法による反復推定に当たっても、標本の如何によっては分散成分の負の推定値を生じさせる危険性が否定されない。そこで本章では、正の初期値を用いた場合には常にパラメータ空間内への収束が保障される EM アルゴリズムに再着目し、両者を有機的に結合することによって、新たな演算アルゴリズム AIREMLme 法を定義した。この AIREMLme 法によれば、常にパラメータ空間内への収束が期待でき、しかも AIREMLm 法の反復推定式中の勾配ベクトルを有効に利用しているため、その演算負荷は AIREMLm 法のそれと変わらない。数値的検討として、黒毛和種の枝肉 6 形質に関する 7 データセットを取り上げ、計 42 標本を対象として AIREMLm 法によるスクリーニング分析を実施したところ、最も小規模なデータセットに関する複数の標本において異常推定が生じた。そこで、当該の標本に対して本 AIREMLme 法を適用したところ、いずれのケースについても適正な収束によって REML 推定値が得られた。その場合の反復回数は、Aitken 加速を用いた EM アルゴリズム - REML 法よりもはるかに少なく、AIREMLm 法と比べても何ら遜色の無い結果であった。以上より、本章で確立した AIREMLme 法は、一般混合線形モデルにおける多分散成分の REML 推定手法として、極めて有望な手法であると考えられた。

第7章 種々の REML 推定手法に関する演算特性の比較

7.1 緒言

一般混合線形モデルにおける分散成分の推定に際して、最も優れた方法の一つとして現時点で広範に利用されている推定法は、Patterson と Thompson (1971) によって開発された REML 法である。しかしながら、REML 法は反復推定法の一つであり、演算過程における負荷が相対的に大きいところから、これまでに演算特性面で種々の特徴を有する各種のアルゴリズムが提案されている (Patterson と Thompson, 1971; Harville, 1977; Laird, 1982; Dempster ら, 1984; Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987; Harville と Callanan, 1990; Johnson と Thompson, 1995)。

代表的なアルゴリズムの一つは、EM アルゴリズム (Dempster ら, 1977) タイプのアルゴリズム (Harville, 1977) であり、このアルゴリズムは、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数のみを利用する D アルゴリズムの一種として、世界各国で多用されている。他の代表的なアルゴリズムは、偏導関数の利用に依らず、REML 対数尤度関数そのものの数値的最大化を実施することによって推定を行うアルゴリズム (Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987) すなわち DF アルゴリズムである。DF アルゴリズムによる REML 推定のためのアプリケーションプログラムとしては、近年、米国農務省の Animal Research Service によって MTDFREML (Boldman ら, 1995) が作成され、このプログラムは Internet を介して世界的規模で急速に普及しつつある。

一方、本研究では、第 4 章において基本混合線形モデルを仮定して、REML 対数尤度関数の観測情報と期待情報の平均すなわち平均情報の利用に基づく一推定手法 (AIREMLm 法) を開発し、さらに第 5 章および第 6 章では、その多分散成分推定法への一般化を図るとともに、当該推定値を常にパラメータ空間内に収束させるための一方途について検討を加え、AIREMLme 法を開発した。この AIREMLme 法 (および AIREMLm 法) は、混合モデル方程式の一般化逆行列および直接解に全面的に依存する新たなタイプの AI アルゴリズム - REML 推定法であり、本法の一つの特徴は、点推定の終了と同時に AI 行列の逆行列から推定値の推定抽出 (共) 分散も容易に求められる点である。しかも、本

AIREMLme 法については、前章までに実施した具体的な数値分析例での結果から、演算効率の面でも優れた性質を有している可能性が示唆された。しかしながら、AIREMLme 法の相対的な演算効率を実証する上では、前述の代表的なアルゴリズムによる REML 手法との間での総合的な比較検討が不可欠である。

本章では、最後に、従来の AI アルゴリズム - REML 法、EM アルゴリズム - REML 法、加速 EM アルゴリズム - REML 法、Aitken 近似を利用した EM アルゴリズム - REML 法ならびに DF アルゴリズム - REML 法を取り上げ、これら代表的な手法と本 AIREMLme 法との間での演算特性の総合比較を実施する。

7.2 比較手法

各種の演算特性を比較するためのアプローチとしては、理論的検討、数値シミュレーションによる検討ならびに実際の標本データ分析による検討が考えられるが、ここでは、複数の標本データの分析を通じて、主な演算特性の比較を行った。

7.2.1 データ

数値分析には、I 県および N 県より提供された黒毛和種肥育牛の枝肉記録に関するデータセット (データセット I およびデータセット N) を用い、分析対象形質として枝肉重量を取り上げた。両データセットのうち、データセット I は第 4 章での数値分析例に利用したセットであり、その概要は既に表 4.1 に示したとおりである。ただし、本分析では、肥育農家の効果を変量効果とみなした。このデータセット I における観測値を有する肥育牛数、それらの血統上の血縁個体数ならびに分析対象の総体数は、それぞれ 4,412 頭、7,792 頭および 12,204 頭であった。

一方、データセット N に係わる要因情報および分析対象個体数の概要は表 7.1 に示したとおりであり、観測値を有する肥育牛数 (18,550 頭) および観測値を持たない祖先個体数 (24,445 頭) を合わせた分析対象個体の総数は 42,995 頭であった。

表 7.1 データセット N の概要

因子	区分	水準数	備考
肥育農家	変 量	206	出荷規模 10 頭以上の農家 および他グループ
出荷年次	母 数	8	1988 年 ~ 1997 年 (一部グループ化)
性	母 数	2	去勢牛および雌牛
屠殺月齢	母 数	2	平均: 28.9 (± 1.91) か月
近交係数	母 数	1	平均: .01 ($\pm .02$)
肥育牛数			18,550 頭
血統上の個体数			24,445 頭
分析対象個体数			42,995 頭

7.2.2 方 法

分析のための混合線形モデルすなわち実用モデルとしては、(社)全国和牛登録協会と各道府県が連携して実施している「和牛の育種価評価事業」における実用モデルを用いた。すなわち、変量効果として、個体の相加的遺伝子型価(育種価)、肥育農家の効果ならびに残差効果を取り上げた。この場合のモデルを行列表示すれば、以下のとおりである。

$$y = Xb + Z_1u_1 + Z_2u_2 + e$$

ここで、

y : 枝肉重量の観測値の $N \times 1$ ベクトル

b : 各母数効果の $p \times 1$ ベクトル;

主効果 — 出荷年次, (食肉市場), 性

共変量 — 屠殺月齢 (1 次および 2 次偏回帰),

近交度 (1 次偏回帰)

u_1 : 肥育農家 (変量効果) の $q_1 \times 1$ ベクトル

u_2 : 個体の育種価 (変量効果) の $q_2 \times 1$ ベクトル

e : 残差 (変量効果) の $N \times 1$ ベクトル

X, Z_1, Z_2 : それぞれ既知の $N \times p, N \times q_1, N \times q_2$ 計画行列, である。

なお、データセット N には、単一の食肉市場で収集された記録のみが含まれていたため、食肉市場の効果は取り上げなかった。各変量効果の期待値および分散については、次のように仮定し、

$$E \begin{bmatrix} y \\ u_1 \\ u_2 \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Xb \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{Var} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_1 & 0 & 0 \\ 0 & G_2 & 0 \\ 0 & 0 & R \end{bmatrix}$$

$$\text{Var}[y] = V_y = Z_1 G_1 Z_1' + Z_2 G_2 Z_2' + R$$

本数値分析の場合には、 $G_1 = I\sigma_1^2$, $G_2 = A\sigma_2^2$ および $R = I\sigma_0^2$ と仮定した。ここで、 A は分析対象個体間の相加的血縁行列を表し、 σ_1^2, σ_2^2 および σ_0^2 は、それぞれ肥育農家分散、個体分散 (育種価分散) および残差分散を示す。

演算特性の比較に供した REML 法は、本研究で開発した AIREMLme 法ならびに現時点における代表的な方法、計 6 法である。以下に、その概要を示す:

AIREMLme 法および Johnson & Thompson 法 AIREMLme 法における反復推定式は、ニュートン法におけるヘシアン行列を次式のように AI 行列で置換して得られた推定式:

$$\hat{\theta}_{[t+1]} = \hat{\theta}_{[t]} + \mathcal{A}(\hat{\theta}_{[t]})^{-1} \mathbf{d}(\hat{\theta}_{[t]}) \quad (7.1)$$

として表され、ここで、添字の $[t]$ は t 番目のラウンドにおける推定値であることを示す。

AI 行列 $\mathcal{A}(\hat{\theta}_{[t]}) = \{a_{ij[t]}\}; i, j = 0 \sim 2$ の各要素は、本分析では、

$$\begin{aligned} a_{00[t]} &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{Z}'_1\mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{Z}'_2\mathbf{y} - \hat{\mathbf{u}}_1'\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]} - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2[t]} \\ &\quad - \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{11}\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]}^2 - 2\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{12}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{1[t]}r_{2[t]} - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2[t]}^2)\hat{\sigma}_{0[t]}^{-6} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{01[t]} &= a_{10[t]} \\ &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{11}\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]}^2 + \hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{12}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{1[t]}r_{2[t]})\hat{\sigma}_{2[t]}^{-2}\hat{\sigma}_{0[t]}^{-4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{02[t]} &= a_{20[t]} \\ &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{11}\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]}^2 + \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2[t]}^2)\hat{\sigma}_{2[t]}^{-2}\hat{\sigma}_{0[t]}^{-4} \end{aligned}$$

$$a_{11[t]} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}_1'\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]} - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{C}_{11}\hat{\mathbf{u}}_1r_{1[t]}^2)\hat{\sigma}_{1[t]}^{-4}\hat{\sigma}_{0[t]}^{-2}$$

$$\begin{aligned} a_{12[t]} &= a_{21[t]} \\ &= -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}_1'\mathbf{C}_{12}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{1[t]}r_{2[t]}\hat{\sigma}_{1[t]}^{-2}\hat{\sigma}_{0[t]}^{-2} \end{aligned}$$

$$a_{22[t]} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2[t]} - \hat{\mathbf{u}}_2'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}_{22}\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2[t]}^2)\hat{\sigma}_{2[t]}^{-4}\hat{\sigma}_{0[t]}^{-2}$$

と表され、 \mathbf{C}_{ij} は混合モデル方程式の一般化逆行列の適切な部分行列、 $r_{i[\cdot]}$ は分散比のスカラで $r_{i[\cdot]} = \hat{\sigma}_0^2\hat{\sigma}_i^{-2}; i = 1, 2$ である。REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数から成る勾配ベクトル $\mathbf{d}(\hat{\theta}_{[t]}) = \{d_{i[t]}\}; i = 0 \sim 2$ の各要素は、

$$\begin{aligned}
d_{0|t} &= -\frac{1}{2}\{N - r(\mathbf{X}) - q_1 - q_2 + \text{tr}(\mathbf{C}_{11})r_{1|t} + \text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}_{22})r_{2|t}\}\sigma_{0|t}^{-2} \\
&\quad + \frac{1}{2}\{\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}'\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{X}'\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{y}'\mathbf{Z}'_1\hat{\mathbf{u}}_1 - \mathbf{y}'\mathbf{Z}'_2\hat{\mathbf{u}}_2 - \hat{\mathbf{u}}'_1\mathbf{G}_1^{-1}\hat{\mathbf{u}}_1r_{1|t} \\
&\quad - \hat{\mathbf{u}}'_2\mathbf{G}_2^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2r_{2|t}\}\sigma_{0|t}^{-4} \\
d_{1|t} &= -\frac{1}{2}\{q_1 - \text{tr}(\mathbf{C}_{11})r_{1|t}\}\sigma_{1|t}^{-2} + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'_1\hat{\mathbf{u}}_1\sigma_{1|t}^{-4} \\
d_{2|t} &= -\frac{1}{2}\{q_2 - \text{tr}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}_{22})r_{2|t}\}\sigma_{2|t}^{-2} + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}'_2\mathbf{A}^{-1}\hat{\mathbf{u}}_2\sigma_{2|t}^{-4}
\end{aligned}$$

である。

また、AIREMLme 法は、(7.1) 式に示された準ニュートン反復公式による更新に失敗した場合、すなわちパラメータ空間外の負値を生じた場合には、適宜 EMREML 推定値を用いて反復推定値を更新する。

一方、Johnson と Thompson (1995) によって示されたオリジナルな形態の AI 行列を利用した REML 推定法 (ここでは、Johnson & Thompson 法と呼ぶ) においても、AIREMLme 法と同じく、準ニュートン法を利用して反復推定値を更新する。しかしながら、Johnson & Thompson 法は、AI 行列の原形:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}(\theta) &= \frac{1}{2} \left[- \left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial \theta \partial \theta'} + E \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \theta \partial \theta'} \right) \right\} \right] \\
&= \frac{1}{2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \theta} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \theta'} \mathbf{P}
\end{aligned}$$

$$\text{ただし, } \mathbf{P} = \mathbf{V}_y^{-1} - \mathbf{V}_y^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}_y^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}_y^{-1}$$

において、 $\alpha_i = (\partial \mathbf{V}_y / \partial \sigma_i^2) \mathbf{P} \mathbf{y}$ および $\beta_j = \mathbf{P} (\partial \mathbf{V}_y / \partial \sigma_j^2) \mathbf{P} \mathbf{y}$ と置いたとき、 α_i は

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= \hat{\mathbf{e}} \sigma_0^{-2} \\
\alpha_i &= \mathbf{Z}_i \hat{\mathbf{u}}_i \sigma_i^{-2}; \quad i \neq 0
\end{aligned}$$

として与えられ、 β_j は、混合モデル方程式の右辺ベクトルを α_j で置換して解いた場合の残差ベクトルとして得られるところから、 $\mathcal{A}(\theta)$ が結局、単純なベクトル積:

$$\alpha'_i \beta_j$$

として計算されることに着目した方法であり、この方法での AI 行列の作成に際しては、予測残差ベクトル $\hat{\mathbf{e}}$ の演算が含まれる。

EMREML 法および EMREML+ 法 EM アルゴリズムによる REML 法 (Harville, 1977; ここでは、EMREML 法と呼ぶ) は、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数のみの情報に基づく手法であり、反復ラウンド当たりの演算負荷および演算時間は比較的小さいものの、比較的多数の反復回数を要する手法である。そこで、EMREML 法の好ましい性質は保つ一方、収束を速めるための数々の工夫がなされてきている。中でも、優れた方法は、Misztal ら (1992) が示したアプローチであり、EMREML 法の推定式の一形態に加速因子と呼ばれる修正項を付与することにより加速を図る手法 (ここでは、EMREML+ 法と呼ぶ) である。EMREML+ 法の反復推定式は、

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{0|t}^2 &= (\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} - \sum_{i=1}^s \mathbf{y}'\mathbf{Z}_i\hat{\mathbf{u}}_i) / \{N - r(\mathbf{X})\} \\ \hat{\sigma}_{i|t}^2 &= \frac{\hat{\mathbf{u}}_i'\mathbf{G}_i^{-1}\hat{\mathbf{u}}_i - \beta\{q_i - \text{tr}(\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ii})r_{i|t-1}\}\hat{\sigma}_{i|t-1}^2}{(1 - \beta)\{q_i - \text{tr}(\mathbf{G}_i^{-1}\mathbf{C}_{ii})r_{i|t-1}\}}\end{aligned}$$

と表され、 $i = 1 \sim s$ であり、本分析では $s = 2$ となる。ここで、定数 β は加速因子であり、 $-\infty < \beta < 1$ の値を取り得るが、 β が負値のときは収束を遅延させる減速因子として働く。 $\beta = 0$ のときの上式は、(非加速の) 通常の EMREML 推定式に一致する。一方、 β が正值のときには加速因子として作用し、 $\beta \simeq 1$ では推定値が発散し (Misztal ら, 1992)、分析が異常終了する。したがって、Misztal ら (1992) は、本分析で仮定したようないわゆる個体モデルの場合には $.4 < \beta < .8$ の範囲を奨励しており、Cantet ら (1993) は $\beta = .6$ を用いている。また、(社)全国和牛登録協会は、黒毛和種肥育牛のデータに対しては $.4 < \beta < .6$ が望ましいとしている (内部資料)。

本分析では、非加速の通常の EMREML 法 ($\beta = 0$) とともに、あわせて、異常終了の危険性が少なく、かつ十分な加速効果が見込まれると期待された $\beta = .5$ の EMREML+ 法をも取り上げた。

EMREMLa 法 第 5 章および第 6 章で既に取り上げた、Aitken 加速法を組み込んだ EMREML 法である。Aitken 加速法とは、先に詳述したように、連続した 3 回の反復ラウンドにおける推定値を幾何学的に解析して推定値の到達点を予測し、その予測値を次のラウンドにおける EMREML 法の初期値とする加速法である。

DFREML 法 DF (Derivative-Free) アルゴリズムに基づく REML 法 (Smith と Graser, 1986; Graser ら, 1987; ここでは、DFREML 法と呼ぶ) は、前述の各 D (Derivative) アルゴリズムに基づく推定法とは異なり、偏微分を利用することなく REML 対数尤度関数の最大化を図るためのアルゴリズムである。いま、混合線形モデルを、

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}$$

ただし、 \mathbf{y} , \mathbf{b} , \mathbf{u} および \mathbf{e} は、それぞれ観測値、母数効果、変量効果および残差 (変量効果) のベクトルを、 \mathbf{X} および \mathbf{Z} は計画行列を示し、 $\mathbf{u} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{G})$,

$\mathbf{e} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{R})$ および $\mathbf{y} \sim N(\mathbf{X}\mathbf{b}, \mathbf{V}_y)$; $\mathbf{V}_y = \mathbf{Z}\mathbf{G}\mathbf{Z}' + \mathbf{R}$ と仮定する、

と表せば、REML 対数尤度関数は

$$L = \text{const.} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{V}_y| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{X}'\mathbf{V}_y^{-1}\mathbf{X}| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})' \mathbf{V}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \quad (7.2)$$

と表される。この (7.2) 式は Harville (1977) および Searle (1979) に従えば、

$$L = \text{const.} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{G}| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{C}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{P} \mathbf{y}$$

ただし、

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \end{bmatrix}^{-1}$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}_y^{-1} - \mathbf{V}_y^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}_y^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}_y^{-1},$$

なる DFREML 法に好都合の形態に変形され得る。ここで、 L の最大化問題は $-2L$ の最小化問題に帰着される。この L の計算については、疎行列演算ツールを利用すれば、偏微分の計算などと比較してより小さな演算負荷で行うことができる。DF アルゴリズムでは、こうして評価された対数行列式が、Simplex 法 (Nelder と Mead, 1965) のような幾何学的方法により最小化される。

よって、DF アルゴリズムにおいては、D アルゴリズムの場合のような反復演算の概念は存在しない。しかし、対数行列式が繰り返し演算されるため、ここでは常法 (例えば, Misztal, 1994) に従い、その回数を「REML 対数尤度関数の評価回数」と呼び、D アルゴリズムにおける反復回数と比較した。

本研究では、以上の REML 推定手法について、推定値、収束に至るまでの反復ラウンド数 (D アルゴリズムの場合) もしくは対数尤度関数の評価回数 (DF アルゴリズムの場合)、ならびに演算時間の観点から演算特性の比較を行った。演算プログラムの作成は、WATCOM FORTRAN 77/32 (LIFEBOAT Inc., 1993) により行った。ただし、DFREML 法の適用は、既存のアプリケーションプログラム MTDFREML によった。このプログラムは、米国農務省 ARS (Animal Research Service) の Boldman ら (1995) により開発され、Internet を通じて世界に配布され、最も多用されているプログラムである。なお、MTDFREML プログラムに関しては、疎行列演算ツールとして SPARSPAK (Chu ら, 1984) を用いるバージョンと FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) を用いるバージョンとが公開されているが、ここでは、本研究で一貫して用いている FSPAK によるバージョンを利用した。

反復推定の開始に当たっての各分散成分の初期値としては、生の観測値の単純な不偏分散を計算した後、それに占める肥育農家分散および個体分散の初期値の割合をそれぞれ 40% および 20% と仮定して算出した値を用いた。推定値の収束判定については、DFREML 法以外の D アルゴリズムに属する手法の場合には、表型分散に占める肥育農家分散および個体分散 (相加的遺伝分散) の割合のいずれの推定値に関しても、2 つの連続した反復ラウンド間における差が設定値 (δ) 未満となったときに収束と判定した。一方、DFREML 法については、MTDFREML プログラムにおいては REML 対数尤度関数の評価時の simplex 分散が設定値未満となった場合に収束とみなしており、ここではそれに従った。収束判定のための設定値としては、 $\delta = 10^{-6}$ および $\delta = 10^{-9}$ の場合を取り上げた。

演算時間の計測は、D アルゴリズムに基づく手法の場合には、演算プログラム中に WATCOM FORTRAN 77/32 付属ライブラリに含まれる GETTIM サブルーティン (LIFE-

BOAT Inc., 1993) を利用した計時ルーティンを作成して行った。一方、DFREML 法の場合については、MTDFREML プログラムに予め備えられている計時機能を利用して計測した。なお、ここでは収束判定条件を変えての再分析を実施したが、このように同一データセットを用いて同一の方法により複数回の分析を行うような場合には、事前の分析で出力された中間ファイルを利用することによって、以降の分析での演算を効率的に行うこと (ホットリスタートと呼ばれる) が可能であるが、本分析では研究目的に鑑み、そのようなアプローチは一切実施しなかった。

7.3 結 果

表 7.2 は、データセット I に関する肥育農家分散、個体分散および残差分散の推定値を示したものである。二種類の AIREML 法すなわち本 AIREMLme 法および Johnson & Thompson 法による推定値は完全に一致し、収束条件が $\delta = 10^{-9}$ のときの推定値は、肥育農家分散: $200.3448kg^2$ 、個体分散: $1205.7516kg^2$ および残差分散: $593.6294kg^2$ であった。また、D アルゴリズムに属するその他の手法すなわち EMREML 法、EMREML+ 法および EMREMLa 法の 3 法による推定値は、 $\delta = 10^{-9}$ のときには両 AIREML 法による推定値と小数点以下 3 桁の精度で一致しており、最も偏りが大きかった EMREML 法による個体分散の推定値の場合でも $.0004kg^2$ の過小評価に留まっていた。しかるに、 $\delta = 10^{-6}$ のときには、両 AIREML 法の推定値については $\delta = 10^{-9}$ の場合の推定値と実質的に一致していたのに対して、各 EMREML 法の場合には、肥育農家分散以外の分散成分の推定値が小数点以下 1 桁目から異なった。一方、DFREML 法の場合には、 $\delta = 10^{-6}$ での個体分散推定値が $\delta = 10^{-9}$ での AIREML 推定値に比べて $7.2kg^2$ 過小評価されたのをはじめとして、相対的に貧弱な数値的特性を示し、たとえ $\delta = 10^{-9}$ の場合でさえも、三つの分散成分すべてについての AIREML 推定値との一致は認められなかった。

表 7.3 に示したデータセット N に関する結果についても、同様の傾向が認められた。すなわち、肥育農家分散、個体分散および残差分散の推定値がそれぞれ $247.2868kg^2$ 、 $617.9652kg^2$ および $813.8013kg^2$ であった $\delta = 10^{-9}$ 下での両 AIREML 推定値に対し

表 7.2 データセット I に関する分散成分推定値

推定 手法	収束 条件	分散成分推定値		
		肥育農家	個体	残差
AIREMLme	10^{-6}	200.3447	1205.7514	593.6296
J & T ¹⁾		200.3447	1205.7514	593.6296
EMREML		200.3439	1205.3083	593.9369
EMREML+		200.3440	1205.3999	593.8742
EMREMLa		200.3435	1205.4910	593.8103
DFREML		200.5811	1198.5855	597.8330
AIREMLme	10^{-9}	200.3448	1205.7516	593.6294
J & T ¹⁾		200.3448	1205.7516	593.6294
EMREML		200.3448	1205.7512	593.6297
EMREML+		200.3448	1205.7513	593.6296
EMREMLa		200.3448	1205.7517	593.6294
DFREML		200.3629	1205.3158	594.0428

¹⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による
REML 法

表 7.3 データセット N に関する分散成分推定値

推定 手法	収束 条件	分散成分推定値		
		肥育農家	個体	残差
AIREMLme	10^{-6}	247.2865	617.9667	813.8002
J & T ¹⁾		247.2865	617.9667	813.8002
EMREML		247.2863	618.0921	813.7141
EMREML+		247.2865	618.0500	813.7427
EMREMLa		247.2867	617.8414	813.8865
DFREML		246.7641	618.1269	813.5163
AIREMLme	10^{-9}	247.2868	617.9652	813.8013
J & T ¹⁾		247.2868	617.9652	813.8013
EMREML		247.2868	617.9653	813.8012
EMREML+		247.2868	617.9653	813.8013
EMREMLa		247.2868	617.9652	813.8013
DFREML		247.0148	617.9495	813.7934

¹⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による
REML 法

て、各 EMREML 推定値は $\delta = 10^{-9}$ では高い精度で一致した一方、いずれの収束条件下でも、AIREML 推定値と総じて異なる推定値を与えたのは DFREML 法であった。

データセット I を用いた場合の各推定手法の演算特性を表 7.4 に示した。まず、収束条件が 10^{-6} の場合と 10^{-9} の場合とを比べれば、当然のことながら収束条件の厳しい 10^{-9} の場合の方が多くの反復ラウンドおよび演算時間を必要とした。ただし、両収束条件間で比較した場合、各推定手法の相対的演算特性は極めて類似していた。すなわち、収束に要した反復回数については、AIREMLme 法と Johnson & Thompson 法との間に全く差異は認められず、これら両方法が最少の回数を示した。次に少ない回数の反復ラウンドで収束したのは EMREMLa 法であり、それらの方法からはるかに遅れて EMREML+ 法、最後に EMREML 法の順で収束に至った。DFREML 法における REML 対数尤度関数の評価回数は、EMREMLa 法での反復回数よりも大きな値を示した。一方、反復ラウンド (DFREML 法においては尤度関数の評価) 当りの演算時間が最も短かったのは DFREML 法であり、各 EMREML 法ではそれより若干時間を要した。AIREML 法での時間は DFREML 法のその約 2 倍の値を示し、中でも Johnson & Thompson 法が最長の演算時間を必要とした。ところが、収束に至るまでの総演算時間に関しては、最少の反復回数を示した両 AIREML 法で最も少なく、次いで EMREMLa 法、DFREML 法、EMREML+ 法、EMREML 法の順で長かった。AIREMLme 法での総演算時間を 1 とした場合の相対値は、Johnson & Thompson 法で 1.0 ないし 1.1、EMREMLa 法で 2.6 ないし 2.8、DFREML 法で 2.9 から 3.1、EMREML+ 法で 40.7 ないし 64.7 であり、EMREML 法では 49.4 から 80.0 の値であった。

データセット N における演算効率は、表 7.5 に示したとおりである。データセット N では、データセット I の場合に比べて評価対象個体数ならびに混合モデル方程式の非零要素数のいずれについても多数であったため、反復ラウンド当りの演算時間としてはデータセット I の場合の数倍の値が認められたが、その反面、データセット I の場合よりも全体的に少ない反復回数で収束した。その結果、総演算時間に関しては、いずれの推定法についてもデータセット I の場合の所要時間の約 2 倍から 5 倍の値であった。しかし、同一収束条件下での各演算手法の相対的演算特性は、表 7.4 の結果と概して一致していた。よ

表 7.4 データセット I における反復回数および演算時間

推定 手法	収束 条件	反復 回数	反復当りの絶対 演算時間 (秒)	総演算時間	
				絶対 (秒)	相対値 ¹⁾
AIREMLme	10^{-6}	9	2.7	38	1
J & T ²⁾		9	2.9	40	1.1
EMREML		1,098	1.7	1,876	49.4
EMREML+		904	1.7	1,547	40.7
EMREMLa		54	1.7	106	2.8
DFREML		(69) ³⁾	1.5	116	3.1
AIREMLme	10^{-9}	13	2.7	50	1
J & T ²⁾		13	2.9	52	1.0
EMREML		2,350	1.7	3,999	80.0
EMREML+		1,899	1.7	3,235	64.7
EMREMLa		68	1.7	129	2.6
DFREML		(90) ³⁾	1.5	147	2.9

¹⁾ 所与の収束条件下での AIREMLme 法に対する相対値

²⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による REML 法

³⁾ REML 対数尤度関数の評価回数

表 7.5 データセット N における反復回数および演算時間

推定 手法	収束 条件	反復 回数	反復当りの絶対 演算時間 (秒)	総演算時間	
				絶対 (秒)	相対値 ¹⁾
AIREMLme	10^{-6}	5	14.0	228	1
J & T ²⁾		5	14.1	228	1.0
EMREML		469	8.0	3,932	17.2
EMREML+		338	8.0	2,878	12.6
EMREMLa		39	8.0	472	2.1
DFREML		(65) ³⁾	4.8	484	2.1
AIREMLme	10^{-9}	8	14.0	270	1
J & T ²⁾		8	14.1	271	1.0
EMREML		931	8.0	7,650	28.3
EMREML+		648	8.0	5,373	19.9
EMREMLa		48	8.0	545	2.0
DFREML		(79) ³⁾	4.8	549	2.0

¹⁾ 所与の収束条件下での AIREMLme 法に対する相対値

²⁾ Johnson と Thompson (1995) の AI 行列による REML 法

³⁾ REML 対数尤度関数の評価回数

り詳しくみると、反復当りの演算時間では、EMREML 法群が DFREML 法に比べて約 2 倍の値を示し、AIREML 法は約 3 倍の値を示した。しかし、総演算時間については、AIREML 法の場合が最少であり、これらの AI 行列を利用した方法群では、EMREMLa 法および DFREML 法に比べて 2 倍の演算効率を示した。

7.4 考 察

本章では、本研究で最終的に開発した REML 推定手法、すなわち REML 点推定から抽出 (共) 分散推定までを総合的にカバーする AIREMLme 法の相対的演算特性を総合的に判定する目的で、現時点における他の代表的な REML 推定手法との比較を実施した。

2 階偏導関数もしくはその期待値を個別に算出するには、データセットのサイズ如何では非常に大きな演算負荷が要求され、この点が REML 法の普及をその黎明期において妨げた大きな一因であった。しかし、それら観測情報と期待情報の平均をとれば、両情報に負号を異にして共通に含まれる $\text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_i^2} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}_y}{\partial \sigma_j^2} \mathbf{P} \right)$ 項、すなわち第 2 章および第 3 章で言及した $\text{tr}(\mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ii} \mathbf{G}_i^{-1} \mathbf{C}_{ii})$ を生起させる項をキャンセルアウトさせることが可能であり、理論的に演算負荷を大きく軽減させることが可能と期待される。そのような AI アルゴリズムに基づく二法すなわち AIREMLme 法および Johnson & Thompson 法については、AI 行列の形成方法は全く異なるものの、収束推定値については理論的に一致することが期待される。所与の標本に関して、準ニュートン法を利用した推定値の更新が功を奏している限り、両者の収束推定値は同一値となる。本章での数値分析の場合、準ニュートン法のみを用いた Johnson & Thompson 法の反復過程においても負の推定値を生じる現象は生起せず、AIREMLme 法との間で反復回数および収束推定値は完全に一致した。その理由は、対象としたデータセットがともに安定した AI-REML 推定値を与えるのに十分なサイズおよびデータ構造を有していたからである。これらの両 AIREML 法による推定値は、第 5 章で考察したように、最も正確な REML 推定値と考えられ、AIREML 法では収束条件設定値 δ が 10^{-6} の場合に既に十分な収束に達していたことが明らかである。

一方、EMREML 法およびその改良型である EMREML+ 法と EMREMLa 法による推

定値は、比較的早い時点で収束に達した肥育農家分散の推定値を除いて、いずれのデータセットの場合でも $\delta = 10^{-6}$ のときは小数点以下 1 桁目以降が異なる値として推定された。しかし、 $\delta = 10^{-9}$ と収束条件を厳しくした場合には、応じて推定値は小数点以下 3 桁目まで一致し、とくに EMREMLa 法での推定値の改善が顕著であった。このように、収束条件を厳しくして反復を重ねれば、演算時間は消費するものの徐々に最終推定値へ収斂していく事実は、これらの手法が D アルゴリズムすなわち REML 対数尤度関数の偏導関数に由来した手法である点に依っており、D アルゴリズムによる推定値の良好な数値的特性を示す結果と解釈される。

それに対して、DFREML 推定値は、収束条件をより厳しく設定した場合でも AIREML-me 推定値に一致しなかった。この点に関して、REML 対数尤度関数が検索的手法によって最大化される DFREML 法による推定値の場合には、D アルゴリズムに基づく推定値に比較して精度が低いと考えられている。例えば、Misztal (1994) は、Mäntysaari からの私信として、約 800 個体に関する 5 形質の DFREML 分析から得られた推定値は、生物学的に期待される様相とは大きく異なった点を強調している。また、Campos ら (1994) は、同一データを単一形質および 2 形質 DFREML 分析した結果について、両分析による推定値は異常にかけ離れていたと報告している。よって、DFREML に関する本章での結果についても、Misztal (1994) が結論づけているように、この方法の相対的に貧弱な数値的特性によるものである可能性が高い。

各演算手法が所与の収束条件を満たした場合の反復回数もしくは評価回数は、同一データセット・同一収束条件下で比較すれば、全てのケースにおいて両 AIREML 法、EMREMLa 法、DFREML 法、EMREML+ 法、EMREML 法の順であり、AIREML 法の格段に優れた収束特性が実証された。Aitken 加速を適用した EMREMLa 法と加速因子により加速を実現する EMREML+ 法との比較では、前者の方が少ないラウンドで収束に至ることが示された。この点に関して、本分析での EMREML+ 法には一般に高加速が期待できる $\beta = .5$ なる加速因子が適用されており、非加速の EMREML 法に比べて 150 ~ 450 ラウンド程度の加速が実現された一方、演算効率の面では両 AIREML 法はおろか EMREMLa 法にも明らかに及ばなかった点は、留意すべき興味深い結果である。なお、DFREML 法

における尤度関数の評価回数については、D アルゴリズムに属する諸手法での反復回数の多寡に連動して増減する傾向がみられたが、常に EMREMLa 法での反復回数よりも多かった。

一方、1 反復 (もしくは尤度評価) 当りの演算時間に関しては、それぞれの方法に特有の演算アルゴリズムのみならず、プログラム作成に利用されている演算ツールの機能・能力にも少なからず依存している特性である。本章で比較した各法の演算プログラムについては、疎行列演算ツール FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) が利用されているので、データセット間での演算時間の違いは、ただ単に標本のサイズに依存しているというよりもむしろ、混合モデル方程式の係数行列における非零要素 (NZE) 数に大きく依存している。この点に関して、ここで取り上げたデータセット I における NZE 数は 73,771 であり、データセット N においては 305,833 であった。FSPAK の利用では、その第 1 引数にオプション (機能番号) を指定してサブルーティンを呼び出すようになっている。例えば、オーダリング検索を実行する場合には、CALL FSPAK (10, arg2, arg3, ...) とコードするが、これをここでは簡単に FSPAK10 と記述すれば、各手法の各反復ラウンドにおいて呼び出される FSPAK サブルーティンは、主として、FSPAK50 (混合モデル方程式の求解のほか、AI 行列の作成にも利用)、FSPAK55 (所与の疎行列の対数行列式を計算) ならびに FSPAK60 または FSPAK61 (所与の疎行列の疎逆行列を計算、勾配ベクトルの作成に利用; 60 は高速ルーティン、61 は省メモリルーティンであり、本研究においては一貫して FSPAK61 を使用) である。これらを所要演算時間の順に並べれば、

$$\text{FSPAK61} > \text{FSPAK60} \gg \text{FSPAK50} > \text{FSPAK55}$$

となっている。

すべての演算手法の中で、1 反復 (尤度評価) 当りの演算時間が最も短かったのは DF REML 法であったが、この点は、すべての手法で共通してコールされる必要のある機能を除外して考えれば、FSPAK55 の 1 回のコールのみが実施されるためと考えられる。次に当該時間の短かった各 EMREML 法においては、FSPAK55 は必要ないが、最も演算の遅い FSPAK60(61) を 1 回コールする必要がある、期待されたとおり、とくにデータ

数および NZE 数の多いデータセット N の場合において DFREML 法との差が顕著となっている (表 7.5)。一方、両 AIREML 法においては、各 EMREML 法の場合と同様に FSPAK60(61) の 1 回のコールが必要である点に加え、FSPAK50 を AIREMLme 法で $s+1$ 回、Johnson & Thompson 法で $s+2$ 回 (ただし、 s は残差を除く変量因子数で、ここでは $s=2$) 実行しなければならない。したがって、1 反復 (尤度評価) 当りの演算時間に関する各方法の序列は、概してコールされる FSAPK サブルーティンの種類と回数によってよく説明され得るように思われる。ただし、この単位当りの演算時間の方法間の差は大きくはなく、最も差が開いた場合でも 3 倍足らずであった。

それに対して、総演算時間に関しては、結果的に、反復ラウンド数の違いが大きく反映されて顕著な差異が認められ、この特性に関する順位は反復回数でのそれに等しかった。このような事実は、表 7.4 および 7.5 に示した結果から明らかであるが、さらに次の諸点にも留意しておく必要がある。一つには、先にも述べたように、AI アルゴリズムに基づく二法では収束条件 10^{-6} で既に十分な収束に達しており、EM アルゴリズムに基づく諸法が同様の収束度に達するには収束条件 10^{-9} が必要であった点である。よって、収束値の様相から判断すれば、AI アルゴリズムを用いた REML 法での 10^{-6} での結果と他の方法における 10^{-9} での結果とを比較した方がより適切であるかもしれない。実際に、そのような基準に基づいて総演算時間の相対値を算出してみると、EMREML 法、EMREML+ 法、EMREMLa 法および DFREML 法の順に、データセット I についてはそれぞれ、105.2、85.1、3.4 および 3.9 となり、データセット N についてはそれぞれ、33.6、23.6、2.4 および 2.4 となる。この場合、さらに、二つ目の留意点として、DFREML 法による収束値は収束条件 10^{-9} でも厳密には他の収束値に一致しておらず、他の方法と同等の収束度を実現するためには 10^{-9} よりもより厳しい収束条件の設定が必要であり、応じてより長い演算時間が必要とされる点が挙げられる。いずれの基準に依るにせよ、結論としては、EMREML 法 > EMREML+ 法 \gg DFREML 法 \simeq EMREMLa 法 > Johnson & Thompson 法 \simeq AIREMLme 法の順で長い演算時間を要した。

最後に、演算メモリの消費量に関しては、第 4 章、第 5 章および第 6 章で理論的にも考察したように、Johnson & Thompson 法のプログラムでは AIREMLme 法のプログラム

の場合に比べて追加の演算メモリが必要であった。具体的には、データセット I で .45MB 程度、データセット N で 1.91MB 程度の追加メモリが必要であり、すべての EMREML タイプのプログラムにおける演算メモリ量は、実質的に AIREMLme 法のそれと同等であった。DFREML 法のための MTDFREML プログラムにおけるメモリ要求量を把握するには、同プログラムの詳細な解析が必要であり、ここでは不可能であった。しかしながら、利用している FSPAK の機能の違いから考察すれば、比較的大きなサイズのワークベクトルを必要とする FSPAK60(61) を実行する必要が無いところから、EMREML 法よりも有意に少ないメモリ要求量で稼動するものと推察された。

以上、まとめると、与えられる REML 推定値の数値的精度という点で最も優れていたのは収束条件 10^{-6} でも十分な収束に達した AI 行列の利用に基づく二つの方法 (AIREMLme 法および Johnson & Thompson 法) であり、最も劣ったのが DFREML 法であった。総演算時間の点で最も優れていたのは AIREMLme 法 (および Johnson & Thompson 法) であり、最も劣ったのは EMREML 法であった。一方、演算メモリ要求量の面で最も難があると考えられた方法は Johnson & Thompson 法であり、AIREMLme 法での要求量は EM アルゴリズムに基づく諸法のそれと同等であった。また、REML 推定値の抽出 (共) 分散推定の面に関しては、ここで比較された手法群の中では、両 AIREML 法のみが点推定の終了時点ですでに抽出 (共) 分散推定値を与え得る方法である。換言すれば、他の方法の場合に抽出 (共) 分散を推定する上では、さらにかなり複雑な追加演算が必要とされる。したがって、総合的に判断すると、Johnson & Thompson 法と比較して、総演算時間の特性面で優るとも劣らず、しかも AI 行列の形態の違いからプログラミングの容易さという点で大きな利点をもつ AIREMLme 法が、最も有望かつ効率的な REML 推定手法であると結論づけられる。なお、本数値分析では、準ニュートン法に基づく Johnson & Thompson プログラムが推定に失敗するケースは認められなかったが、AIREMLme 法は、準ニュートン法に EM アルゴリズムの利点をも取り込んだ演算手法であり、準ニュートン法に基づく手法が正常に機能しない場合でも常にパラメータ空間内への正常な収束を保障するタイプの推定手法である点も強調しておきたい。

7.5 要 約

本章では、家畜育種分野における複数のデータセットを用いて、本研究で最終的に開発した AIREMLme 法と従来の代表的な REML 推定手法 (従来の AI 行列を用いた REML 法 (Johnson & Thompson 法)、通常の EM アルゴリズム - REML 法 (EMREML)、加速因子を導入した EM アルゴリズム - REML 法 (EMREML+)、Aitken 加速を利用した EM アルゴリズム - REML 法 (EMREMLa) ならびに DF アルゴリズム - REML 法 (DFREML)) との間で演算特性の総合比較を実施した。各演算プログラムは疎行列演算ツール FSPAK を利用して作成したが、DFREML 法に関しては、米国農務省 Animal Research Service で開発された MTDFREML プログラムを使用した。演算特性に関する各推定手法間の相対的な関係は、データセットを越えて概ね一貫していた。収束条件を厳しく設定したときには、DFREML 法を除く各法の点推定値は一致していたが、両 AI 手法すなわち本 AIREMLme 法および Johnson & Thompson 法の場合には、収束条件が緩い場合でも十分な精度での収束が認められた。収束に至るまでの反復回数 (DFREML 法においては REML 対数尤度関数の評価回数) は、両 AI 手法で最も少なく、EMREMLa 法がその数倍から 10 倍、DFREML 法が 10 倍から 10 数倍、EMREML+ 法および EMREML 法が 100 倍以上の値を要した。反復 (もしくは尤度評価) 1 回当たりの演算時間については、方法間に大きな差異は認められなかった。その結果、総演算時間による序列は反復 (もしくは尤度評価) 回数での序列と一致し、両 AI 手法の相対的な優位性が示された。これらの方法群の中で、両 AI 手法のみが点推定の終了と同時に推定値の大標本抽出 (共) 分散の推定値を与え得る方法であるが、Johnson & Thompson 法ではより多量の演算容量が必要とされ、また、準ニュートン法のみ利用に起因して、Johnson & Thompson 法ではパラメータ空間内への収束が常に保障されない。したがって、それらの本質的特性ならびに推定精度、総演算時間および演算メモリ要求量から総合的に判断して、本 AIREMLme 法の演算効率は最良であると結論づけられた。

第8章 総 括

分散成分推定法は、様々な分野で利用されている重要な統計的方法の一つである。遺伝・育種の分野でも、量的形質の変異の大きさの推定に際して不可欠な方法であり、分散成分の的確な推定値は、遺伝的能力の評価、遺伝的パラメータの推定ならびに育種計画の立案に当って必須の情報である。現在までに開発されている多数の分散成分推定法の中で、最良な方法の代表格とされているのは REML 法 (Patterson と Thompson, 1971) であり、この方法は、各国における家畜の遺伝的評価システムにも公式分析法として採用されている。しかしながら、REML 法は反復推定法の一つであり、REML 推定量の抽出 (共) 分散の特性に関する更なる研究が必要とされている。また、REML 法による推定では一般に非線形連立方程式系を解く必要があり、これまでに EM や DF などの代表的な演算アルゴリズムが開発されているが、未だ演算負荷が大きく、混合モデル・不釣り合い型構造の大容量データセットにも適用可能なより効率的なアルゴリズム・演算手法の開発が緊要な課題となっている。そこで、MIVQUE 理論 (LaMotte, 1970, 1971, 1973; Rao, 1971) を取り上げ、REML 推定量の抽出 (共) 分散の一形態について検討を加えるとともに、点推定のみならず大標本漸近抽出 (共) 分散推定のプロセスをもカバーする新たな効率的 REML 推定手法の開発を行った。

本研究の第 2 章で導出した REML 推定量の一共分散行列 V_1 は、従来の共分散行列すなわち Fisher 情報行列の逆行列とは異なるタイプの新たな行列である。 V_1 行列は、REML 推定値の比を母分散比の事前情報とする MIVQUE 推定値が REML 推定値に一致するという理論的特性に着目し、当該 MIVQUE における観測値ベクトルの 2 次形式のセットに対して、キュミュラント理論に基づく分散・共分散のオペレーションを施して導出されている。したがって、 V_1 行列には母分散の項に加えて REML 推定量自体の項が取り込まれており、母分散のみの関数として定義されている Fisher 情報行列の逆行列とは異なる構造をとっている。このような事実に応じて、情報行列の逆行列では $G^{-1}C$ および $(G^{-1}C)^2$ のトレース項のみが含まれるが、 V_1 行列には、さらに $(G^{-1}C)^3$ および

$(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4$ のトレース項も含まれる。 \mathbf{V}_1 行列の有する特徴の中でも情報行列の逆行列と比較してとくに重要と考えられる点は、REML 推定量そのものの情報ならびにデータ分布の様相およびデータの連結度に関するより高次の情報を説明している点である。 \mathbf{V}_1 行列の妥当性を数値的に検証するために実施したコンピュータシミュレーションでは、 \mathbf{V}_1 による抽出 (共) 分散値は実現値によく一致した。また、所与の一定の標本サイズの下で、REML 推定値自体は当然のことながら標本ごとに異なったが、 \mathbf{V}_1 行列による抽出 (共) 分散の推定値には実質的な標本間変動が認められず、 \mathbf{V}_1 行列は抽出 (共) 分散の極めて安定した推定値を与えた。よって、 \mathbf{V}_1 行列は、REML 推定量の抽出 (共) 分散を表す共分散行列として、Fisher 情報行列の逆行列よりもより望ましい行列構造をとっていると考えられる。また、その意味で、この \mathbf{V}_1 行列は、REML 推定量の抽出 (共) 分散の特性をさらに詳細に解明していく上で、Fisher 情報行列の逆行列よりも有効な理論式であると推察される。

一方、 \mathbf{V}_1 行列の前述したような特徴すなわち $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}$ から $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^4$ までのトレース項を含む点は、データの分布構造に関するより高次の情報をも説明するという面では利点であるが、標本サイズの増加に伴って計算負荷が飛躍的に増大するという点では逆に欠点でもある。さらに、 \mathbf{V}_1 行列には、情報行列の場合と同様に母分散の項が含まれている。この点は、分散成分の真値そのものの情報を説明して抽出 (共) 分散を与えるという点では合理的かつ望ましい性質であるが、現実の集団を考えた場合、母分散値が既知であるケースはほぼ皆無と考えられる。よって、 \mathbf{V}_1 行列は、REML 推定量の共分散行列として理論的には優れた形態であり、REML 推定量の抽出 (共) 分散の特性に関する基礎研究の推進には有用と考えられるが、実用には不向きな形態を呈しているといわざるを得ない。

それに対して、第 3 章で導出した \mathbf{V}_2 行列の場合には、母分散の項と $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C}$ および $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2$ のトレース項のみを含む。 \mathbf{V}_2 行列は、 \mathbf{V}_1 行列の各要素に対して大標本理論に基づく PVA のオペレーションを加え、REML 推定量の項を母分散に置換しながら行列積を変容させることによって導出されている。したがって、REML 推定量の項を含まず、最大の演算要素も $(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{C})^2$ に抑えられている。 \mathbf{V}_2 行列は、 \mathbf{V}_1 行列から由来された行列であり、MIVQUE の推定理論に基礎を置いて導出された行列である。それ故、情報行列

の逆行列の場合のように、多変量正規分布下での REML 対数尤度関数に明白に依存した行列ではない。にもかかわらず、この V_2 行列は、Fisher 情報行列の逆行列と同等の行列構造を呈していた。故に、この事実から、 V_2 行列は与える情報の質という点では V_1 行列よりも劣る行列であり、母分散、 $G^{-1}C$ および $(G^{-1}C)^2$ の情報のみによる一種の大標本漸近値を表す。なお、 V_1 行列から PVA 手法により導出された V_2 行列が、情報行列の逆行列と前述のような構造的関係にあったという事実は、本研究で採用された V_1 行列の導出手法ならびに V_1 行列そのものの妥当性を実証する一理論的根拠として極めて重要な点である。

演算負荷の大きさという観点からすれば、 V_2 行列では V_1 行列における $G^{-1}C$ の高次のベキ乗項が不要であり、 V_1 行列に比べてその演算負荷が小さく、所与の計算機資源の下ではより大容量のデータセットを対象とし得ることになる。しかしながら、 V_2 行列が Fisher 情報行列とは由来を異にする行列ではあるものの、情報行列の逆行列とは同等であったという事実は、この行列における演算負荷が未だ大きいことを意味している。すなわち、 V_2 行列や Fisher 情報行列の逆行列の要素において共通して出現する $(G^{-1}C)^2$ という演算要素は、現今の一般に入手可能な高性能コンピュータを利用するにしてもなお、サイズの大きな標本の分析には不向きな項であると考えられる。 V_1 行列にせよ、 V_2 もしくは情報行列の逆行列にせよ、その理論的意義は小さくないと考えられるが、演算能力の限界からこれらの行列を大容量のデータセットに対して必ずしも適用し得ないという種類のジレンマは、REML 法の発展の歴史において常につきまとわれてきたある種のジレンマと同種のものである。例えば、Fisher 情報行列については、その逆行列が REML 推定量の大標本漸近抽出(共)分散を与えるという点のみならず、ニュートン法に適用し、REML 推定のための Fisher スコアリング法として用いれば、推定における反復ラウンド数を減少させるという特性は以前から良く知られていた。にもかかわらず、分散成分の REML 推定のためのアルゴリズムの主流が、より単純な演算の可能な EM アルゴリズムや DF アルゴリズムへと移行していったのは、ひとえにその演算負荷の大きさに所以していたと考えられる。しかしながら、一方、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数のみに基づく EM アルゴリズムには収束に至るまでの反復ラウンド数が多いという弱点があり、

REML 対数尤度関数の偏導関数に依存しない DF アルゴリズムについては、その推定値が相対的に貧弱な数値的特性を示すという指摘がなされている (Misztal, 1994)。さらに、これらのアルゴリズムでは、推定値の抽出 (共) 分散を得るためには、点推定後のより大きな追加演算を要する。

そこで、第 4 章では、観測情報とその期待値の平均すなわち平均情報 (AI) の行列に着目した。この AI は、Johnson と Thompson (1995) によって取り上げられており、ニュートン型の反復推定式において Fisher 情報行列の代わりに AI 行列を適用する REML アプローチが示唆されている。ところが、Johnson と Thompson の AI 行列表現およびそれを用いた REML 推定法 (Johnson & Thompson 法) の推定式には、混合線形モデルにおける残差の予測量のベクトル \hat{e} が含まれている。この \hat{e} ベクトルのサイズは観測値数に等しい。したがって、このような \hat{e} の計算は、標本サイズに応じて演算容量面での負荷を生む危険性をはらんでいる。そこで第 4 章では、残差以外に一種類の変量効果が含まれる混合線形モデルの基本形を仮定し、予測残差が全く含まれない AI 行列の新たな形態を導出した。さらに、当該 AI 行列でヘシアン行列を置換した準ニュートン法による REML 反復推定式を定義し、新たな REML 推定法である AIREMLm 法の開発を行った。ここで導出した AI 行列には、 \hat{e} の代わりに、混合モデル方程式の一般化逆行列の部分行列および解ベクトルの部分ベクトルから成る一種の特徴的な 2 次形式すなわち $\hat{u}'G^{-1}C_{11}G^{-1}\hat{u}$ 項が含まれた。このように、本 AI 行列は、係数行列の逆行列による混合モデル方程式の直接解に基づく新たな形態であり、当該の 2 次形式の形態は、Fisher スコアリング法で利用される期待情報行列の要素に出現する行列積 $G^{-1}C_{11}G^{-1}C_{11}$ とは明らかに異なり、演算負荷がより小さいと期待できるものであった。

本 AIREMLm 法および Johnson & Thompson 法は、ともに AI を利用した推定法であり、準ニュートン型のような同一の反復推定式を設定した場合には同一の収束曲線を示し、特定の収束判定条件の下では同一の収束値を与える。しかしながら、両法で利用している AI 行列形態の相違から、AIREMLm 法では通常の混合モデル方程式を反復推定のラウンド当り 1 回解けばよいのに対して、Johnson と Thompson (1995) のアプローチでは、右辺ベクトルを異にする混合モデル方程式を複数回解く必要がある。このよう

な AIREMLm 法での反復推定式に \hat{e} が含まれないことのメリットは、演算時間および演算容量の双方に反映された。すなわち、近年開発された強力な疎行列演算ツール FSPAK (Perez-Enciso ら, 1994) を効果的に利用すれば、AIREMLm 法の $\hat{u}'G^{-1}C_{11}G^{-1}\hat{u}$ なる一見複雑な 2 次形式の計算に際して当該のサブルーティンをコールする回数は、Johnson & Thompson 法での AI 行列形成に必要なコール回数よりも少なく済む。そのことが、Johnson & Thompson 法と AIREMLm 法との間での演算時間のわずかな違い (表 4.2) に反映されていると解釈できる。さらに、両方法における演算容量の要求量に関してはより明瞭な差違が認められた。すなわち、Johnson & Thompson 法に必要な演算要素を蓄えるためには、EM アルゴリズムでの必要分に上乗せする形でかなりの量の演算容量資質が要求される (表 4.3)。この追加容量は、標本のサイズに依存し、疎行列演算ツールを用いた場合でも無視できない負荷になり得ると推察される。それに対して、AIREMLm 法のプログラムで EM アルゴリズム - REML 法のプログラムの場合に比べて追加として要求される演算容量資質は、データ標本のサイズには依存せず、常に 40B (倍精度実数 5 単位分) のみであり、實際上皆無といって差し支えない量である。よって、本 AIREMLm 法は、少なくとも演算容量の面で Johnson & Thompson 法よりも優位な方法であり、演算時間の面では EM アルゴリズムよりもはるかに優れた方法と考えられる。

第 5 章では、残差以外に多種類の変量効果を含む一般混合多分散成分モデルを仮定して、第 4 章で導出した AI 行列の一般形を導くとともに、当該の一般化 AI 行列でヘシアン行列を置き換えることによって、準ニュートン法に基づく REML 反復推定式を定義し、先の AIREMLm 法を多分散成分の REML 推定法へと拡張した。ここで取り上げた多分散成分を含むより複雑なモデルは、例えば家畜育種・量的遺伝の分野では極めて重要なモデルであり、同一個体に関する繰返し記録の分析のための反復率モデル、多胎動物に関する同腹子効果モデル、相加的遺伝および優性遺伝効果モデルならびに群をも変量効果とみなすモデルなどはすべてこの多分散成分モデルの範疇に分類される。

第 5 章で得た AI 行列の一般形には、第 4 章で導出した AI 行列にも含まれたタイプの特有の 2 次形式に加えて、新たに $\hat{u}'_i G_{ii}^{-1} C_{ij} G_{jj}^{-1} \hat{u}_j$ のタイプの特徴的な双 1 次形式のみが含まれた。このような事実から、一般混合線形モデルのための AIREMLm 法に関し

ても、混合モデル方程式の直接解を利用する手法であり、プログラミングに際し疎行列演算技法の有効利用が可能であった。また、導出された AI 行列の形態から、一般化された AIREMLm 法においても、基本混合線形モデル下での AIREMLm 法の Johnson & Thompson 法に対する相対的な利点のすべてが保持されていることが明らかであった。さらに、一般混合線形モデルを扱ったこの章では、導出された一般化 AI 行列の形態と EM アルゴリズム - REML 法で利用されている REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数の \hat{e} を含まない形態との間の関係について理論的考察を加えた。その結果、今回一般化 AI 行列の導出に用いたアプローチは、EM アルゴリズム - REML 法でのアプローチの 2 階偏導関数のデータパートへの拡張的適用に相当すると解釈された。また、この章では、EM アルゴリズム - REML 法の改良手法の一つである Aitken 加速法との数値的比較を通じて、AIREMLm 法のより優れた演算特性が示唆された。

Johnson と Thompson (1995) の AI アルゴリズム - REML 法および第 4 章で提案され第 5 章で一般化が図られた AIREMLm 法には、非線形関数の最大化のための常法の一つである準ニュートン法が利用されている。しかし、(準)ニュートン法では大域的収束が常に保障されず、また、推定値のパラメータ空間内への収束が完全には保障されないという理論的弱点が存在する。そこで、AIREMLm 法を正の正常な初期値が設定された場合には常にパラメータ空間内の REML 推定値を与える手法として確立しておくことが、極めて重要な課題と考えられた。その場合、Marquardt (1963) の方法の利用が有効な方途の一つと思われたが、この方法では、ある種の実数パラメータが適切に設定されねばならない。しかし、そのような実数値は、対象標本および反復推定のステップに応じて異なると推察され、Marquardt (1963) 法の適用では計算過程およびそのプログラミングがより繁雑になることが懸念された。そこで、第 6 章では、常にパラメータ空間内への収束を保障する EM アルゴリズムに再着目し、AIREMLm 法での準ニュートン法の利点と EM アルゴリズムの利点とを有機的に結合した新たな演算アプローチ、すなわち AIREMLme 法を確立した。幸運にも、AIREMLm 法で使用する AI 行列および勾配ベクトルには、EM アルゴリズムの適用に必要なすべての項が含まれており、この最終的に確立した AIREMLme 法での演算負荷は、AIREMLm 法での負荷と全く同等であった。この章では実際に、和牛

の枝肉形質に関する多数の標本データを用いてスクリーニング分析を実施し、AIREMLm法が推定に失敗するケースの存在することを確認したが、AIREMLm法が良好に機能しない標本では、Johnson と Thompson (1995) の準ニュートン法による REML 法も常に推定に失敗する点にはとくに留意を要する。しかるに、AIREMLme 法は、当該のケースに関しても、Aitken 加速を用いた EM アルゴリズム - REML 法をはるかに上回る良好な演算特性を示すことが数値的に確認された。したがって、AIREMLme 法は、AIREMLm 法が Johnson と Thompson (1995) の AI アルゴリズム - REML 法に対して有している演算特性面での相対的利点のすべてを具備している上に、これら AI アルゴリズムに基づく二法が推定に失敗する標本に関しても、パラメータ空間内の REML 推定値を与える方法である。

最後に第 7 章では、第 6 章で最終的に確立した AIREMLme 法および他の代表的な REML 推定手法 (すなわち、AI アルゴリズムによる Johnson & Thompson 法、D アルゴリズムの代表である EM アルゴリズム - REML 法ならびに DF アルゴリズムに基づく REML 法) 間での演算特性、とくに演算時間面での総合比較が行われた。その際、EM アルゴリズム - REML 法に関しては、その改良型である Aitken 加速による REML 法および加速因子の利用による REML 法をも取り上げたが、MIVQUE アルゴリズムによる方法や Fisher スコアリング法による方法は取り上げなかった。その理由は、MIVQUE アルゴリズムの反復推定式中には、変量効果ベクトルの分散行列およびその逆行列の両者から成る行列積が含まれ、その演算負荷が極めて大きいところから、明らかに第 7 章で取り上げた方法群の競争相手とはなり得ないからである。また、Fisher スコアリング法アルゴリズムについては、REML 対数尤度関数の期待情報を用いるアルゴリズムであり、収束特性は優れているものの、その演算負荷の甚大さが正に Johnson と Thompson (1995) による AI 行列提案の契機となった方法であるからである。比較に際し、各演算プログラムの作成は疎行列演算技法を導入して行ったが、DF アルゴリズム - REML 法に関しては、米国農務省 Animal Research Service で 1993 年に作成され、1995 年に改訂された 'MTDFREML' プログラムを利用した。

まず、REML 対数尤度関数の 1 階偏導関数に基づく通常の EM アルゴリズム - REML

法は、プログラミングの比較的容易な方法であり、1 反復当りの演算時間でも中位の順位を占めたが、最大の難点は収束速度が極めて遅い点であった。それ故、最多の反復回数を要し、結果的に総演算時間の特性が最も劣る方法と判断された。次に、加速因子を導入した EM アルゴリズム - REML 法は、通常の EM アルゴリズム - REML 法に比べればより速く収束を達成する方法と考えられたが、すべての演算特性に関して劇的な改善を実現する方法とは考えられなかった。一方、Aitken 加速に基づく EM アルゴリズムでは、非常に有意な加速が達成され、要した反復回数は DF アルゴリズムに比べても少なく、通常の EM アルゴリズムと比較した場合には総演算時間を大幅に短縮させ得る手法であった。また、その結果、総演算時間の面で DF アルゴリズムに匹敵するアプローチであることが明らかとなった。他方、REML 対数尤度の数値的最大化に基づく DF アルゴリズム - REML 法では、D アルゴリズムに属する他の方法群とは異なり、尤度評価当りに要する時間が短く、収束に至るまでの総尤度評価回数は Aitken 加速による EM-REML 法よりもやや多い程度であった。しかし、この手法の最大の難点は、推定値の数値的精度が劣る点と考えられる。この DF アルゴリズムもプログラミングの相対的に容易なアルゴリズムではあるが、最近 Misztal (1994) により指摘されているように、推定対象の分散パラメータ数がより多い場合には、応じてより貧弱な数値的特性を示すことが懸念される。これらの方法に対して、AI アルゴリズムに基づく二法すなわち Johnson & Thompson 法および AIREMLme 法は、1 反復当りの演算時間の面では最下位であったが、最少の反復回数を示し、総演算時間の特性面では最も優れた方法であった。これら二つの方法を厳密に比べれば、AIREMLme 法の総演算時間に対する Johnson & Thompson 法のそれは 1.0 ~ 1.1 倍であり、AIREMLme 法は総演算時間の点では Johnson & Thompson 法に優るとも劣らない方法と位置づけておくべきと思われる。なお、これらの方法群の比較に当たって最も重要な点の一つは、AI アルゴリズムに基づく二つの方法では点推定の終了と同時に REML 推定値の抽出 (共) 分散の推定値が与えられるのに対して、その他の方法群では、かなり繁雑な追加演算を継続実施しなければ抽出 (共) 分散の推定値が得られない点である。

よって、演算容量の面で AIREMLme 法と対等である EM アルゴリズム方法群が、実

は相対的に劣る手法であることは明らかである。一方、DF アルゴリズム - REML 法は、利用している FSPAK サブルーティンの種類およびコール回数の観点からみて演算容量の点では優位な手法と考えられるが、前述したような他の特性面での問題点を勘案すれば、AIREMLme 法よりも劣る手法であると判定される。AI アルゴリズムに基づく AIREMLme 法と Johnson & Thompson 法を比較した場合には、仮に演算時間に関する特性については対等と仮定しても、演算容量の面では AIREMLme 法の方が優れている。さらに、準ニュートン法による Johnson & Thompson 法では、場合によっては負の推定値を与えたり、あるいは EM アルゴリズムでは REML 推定値が与えられるケースでも推定に失敗するケースを否定できない一方、AIREMLme 法は、正の初期値から反復推定が開始される限り、常にパラメータ空間内への収束を保障する推定法である。また、利用している AI 行列の形態の相違から明らかなように、疎行列演算ツールの利用に基づく AIREMLme 法のプログラミングは、Johnson & Thompson 法の場合よりもはるかにシンプルであり、この点も AIREMLme 法の重要な利点の一つと考えられる。したがって、以上の諸点から総合的に判断すれば、AIREMLme 法は、一般混合線形モデルにおける多分散成分の REML 点推定ならびに抽出(共)分散推定のための効率的かつ実用的な演算手法であると考えられる。

結論として、本研究では、一般混合線形モデルにおける多分散成分の REML 推定問題について検討を加え、まず、MIVQUE のアルゴリズムに着目して、REML 推定量の抽出(共)分散の一形態である V_1 行列を導出した。この V_1 行列は母分散のみならず REML 推定量の情報をも取り込んだ新たな形態であり、抽出(共)分散を表す理論式として、母分散のみの関数である従来の Fisher 情報行列の逆行列よりもより適切かつより有効と考えられた。しかし、その演算負荷が極めて大きかったところから、大標本理論に基づく PVA 手法を提案し、 V_1 行列から V_2 行列を導出した。この V_2 行列では、形態の簡略化と演算負荷のかなりの軽減が実現されたが、 V_2 行列と大標本漸近抽出(共)分散を表す従来の Fisher 情報行列の逆行列との間には同等性が認められ、 V_2 行列は明らかに未だ演算負荷の大きい行列であった。そこで、抽出(共)分散の観点のみならず、点推定の段階をも含めたすべての推定プロセスに関してより効率的な REML 演算手法の可能性につ

いて総合的な検討を加え、最終的に、新たな AI 行列形態に基づく AIREMLme 法を開発した。演算機能および演算効率に関する各種の観点から総合的に検討を加えた結果、本 AIREMLme 法は、従来の種々の代表的な REML 推定手法に比べても、相対的に優れた機能・演算特性を有する一 REML 推定手法であることが確認された。

本 AIREMLme 法は、分散成分の REML 推定とともに、母数効果の経験的最良線形不偏推定ならびに変量効果の経験的最良線形不偏予測をも実現する総合的かつ効率的な分析手法であり、今後、家畜育種・量的遺伝の分野のみならず各分野での利用に供され、標本データのより適切な統計処理に貢献することを期待したい。ただし、本 AIREMLme 法は単一変数分析法であるところから、多変数分析法への拡張に関するさらなる研究の必要性が示唆される。

なお、本 AIREMLme 法は、既に我が国における和牛の育種現場で実用に供されている。和牛の遺伝的能力の全国的な評価事業（「和牛育種価評価事業」）は、(社)全国和牛登録協会と各道府県の連携によって実施されているが、1998 年 6 月以降、AIREMLme 法が当該事業における公式分析法として採用されており、本法により、北海道から沖縄県までの計 38 道府県における和牛の遺伝的能力の評価（現時点での年間評価頭数：約百万頭）が実施されている。

本法の活用によって、和牛育種価評価事業ならびに質量両面での和牛改良が促進され、牛肉輸入の自由化の局面を乗り越えて、国際競争力を具備した和牛生産基盤の確立されることを願ってやまない。

謝 辞

本論文のとりまとめに当り御指導を賜った、新潟大学農学部名誉教授 広田 秀憲博士、同教授 新美 芳二博士、同助教授 祝前 博明博士および同助教授 福山 利範博士に深厚なる謝意を表す。とくに、本研究の遂行に当り終始懇到なる御指導と御助言を頂戴した祝前助教授に付して深謝する。

また、数値分析に際し、和牛の育種現場における貴重なデータの使用を快諾して頂いた社団法人全国和牛登録協会の吉村 豊信業務部長、穴田 勝人開発推進課長をはじめとする関係各位ならびに同協会各支部および各県の関係各位に篤く御礼申し上げる。

さらに、本論文の審査の労をとられ、貴重な御助言を賜った新潟大学大学院自然科学研究科教授 児島 清秀博士および新潟大学農学部教授 楠原 征治博士に謝意を表す。

最後に、本研究の進展を暖かく見守って頂いた新潟大学農学部講師 樋浦 善敬博士に御礼申し上げるとともに、本研究の遂行に当って有益な討論と的確な指摘を頂いた家畜育種繁殖学研究室の学友に心より感謝する。

引用文献

- Airy, G. B. (1861). On the algebraical and numerical theory of errors of observations and the combination of observations. MacMillan, Cambridge.
- Anderson, R. L. and Bancroft, T. A. (1952). Statistical theory in research. McGraw-Hill, New York, NY.
- Boldman, K. G., Kriese, L. A., Van Vleck, L. D., Van Tassell, C. P. and Kachman, S. D. (1995). A manual for use of MTDFREML: A set of programs to obtain estimates of variances and covariances (draft). USDA, ARS, USMARC, Clay Center, NE.
- Campos, M. S., Wilcox, C. J., Becerril, C. M. and Diz, A. (1994). Genetic parameters for yield and reproductive traits of Holstein and Jersey cattle in Florida. *Journal of Dairy Science* 77, 867-873.
- Cantet, R. J. C., Gianola, D., Misztal, I. and Fernando, R. L. (1993). Estimates of dispersion parameters and of genetic and environmental trends for weaning weight in Angus cattle using a maternal animal model with genetic grouping. *Livestock Production Science* 34, 203-212.
- Casella, G. and Berger, R. L. (1990). Statistical Inference. Wadsworth & Brooks/Cole, Pacific Grove, CA.
- Chauvenet, W. (1863). A manual of spherical and practical astronomy, Vol. II: Theory and use of astronomical instruments. J. B. Lippincott, Philadelphia, PE.
- Chu, E., George, A., Liu, J. and Ng, E. (1984). SPARSPAK: Waterloo sparse matrix package user's guide for SPARSPAK-A. Technical Report CS-84-36, Department of Computer Science, University of Waterloo, Waterloo, Ont.
- Corbeil, R. R. and Searle, S. R. (1976). Restricted maximum likelihood (REML) estimation of variance components in the mixed model. *Technometrics* 18, 31-38.
- Crump, S. L. (1946). The estimation of variance components in analysis of variance. *Biometrics* 2, 7-11.

- Crump, S. L. (1947). The estimation of components of variance in multiple classifications. Ph. D. Thesis, Iowa State University, Ames, IO.
- Crump, S. L. (1951). The present status of variance component analysis. *Biometrics* 7, 1-16.
- Dempster, A. P., Laird, N. M. and Rubin, D. B. (1977). Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B* 39, 1-38.
- Dempster, A. P., Selwyn, M. R., Patel, C. M. and Roth, A. J. (1984). Statistical and computational aspects of mixed model analysis. *Applied Statistics* 33, 203-214.
- Dickerson, G. E. (1942). Experimental design for testing inbred lines of swine. *Journal of Animal Science* 1, 326-341.
- Fisher, R. A. (1918). The correlation between relatives on the supposition of Mendelian inheritance. *Transactions of the Royal Society of Edinburgh* 52, 339-433.
- Fisher, R. A. (1922). On the mathematical foundations of theoretical statistics. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A* 222, 309-368.
- Fisher, R. A. (1925a). *Statistical methods for research workers*. Oliver and Boyd, Edinburgh.
- Fisher, R. A. (1925b). Theory of statistical estimation. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 22, 700-725.
- Ganguli, M. (1941). A note on nested sampling. *Sankhyā* 5, 449-452.
- Graser, H.-U., Smith, S. P. and Tier, B. (1987). A derivative-free approach for estimating variance components in animal models by restricted maximum likelihood. *Journal of Animal Science* 64, 1362-1370.
- Hammersley, J. M. (1949). The unbiased estimate and standard error of the interclass variance. *Metron* 15, 189-205.
- Hartley, H. O. and Rao, J. N. K. (1967). Maximum likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. *Biometrika* 54, 93-108.

- Harville, D. A. (1977). Maximum likelihood approaches to variance component estimation and to related problems. *Journal of the American Statistical Association* 72, 320-340.
- Harville, D. A. and Callanan, T. P. (1990). Computational aspects of likelihood-based inference for variance components. In: *Advances in statistical methods for genetic improvement of livestock*. Gianola D. and Hammond K. (Eds.), pp. 136-176. Springer-Verlag, Berlin.
- Hazel, L. N. (1943). The genetic basis for constructing selection indexes. *Genetics* 28, 476-490.
- Hazel, L. N., Baker, M. L. and Reinmiller, C. F. (1943). Genetic and environmental correlations between the growth rate of pigs at different ages. *Journal of Animal Science* 2, 118-128.
- Henderson, C. R. (1953). Estimation of variance and covariance components. *Biometrics* 9, 226-252.
- Henderson, C. R. (1973). Sire evaluation and genetic trends. *Proceedings of the animal breeding and genetics symposium in honor of Dr. J. L. Lush*. American Society of Animal Science and American Dairy Science Association, pp. 10-41. Champaign, IL.
- Henderson, C. R. (1976). A simple method for computing the inverse of a numerator relationship matrix used in prediction of breeding values. *Biometrics* 32, 69-83.
- Henderson, C. R. (1984). *Applications of linear models in animal breeding*. University of Guelph Press, Guelph, Ont.
- Henderson, C. R. (1986). Estimation of variances in animal model and reduced animal model for single traits and single records. *Journal of Dairy Science* 69, 1394-1402.
- Hocking, R. R. and Kutner, M. H. (1975). Some analytical and numerical comparisons of estimators for the mixed A.O.V. model. *Biometrics* 31, 19-28.
- Hofer, A. (1998). Variance component estimation in animal breeding: a review. *Journal*

- of Animal Breeding and Genetics 115, 247-265.
- Iwaisaki, H. (1992). A modified pseudoexpectation method for variance component estimation. *Journal of Animal Breeding and Genetics* 109, 90-97.
- Johnson, D. L. and Thompson, R. (1995). Restricted maximum likelihood estimation of variance components for univariate animal models using sparse matrix techniques and average information. *Journal of Dairy Science* 78, 449-456.
- Kendall, M. G. and Stuart, A. (1973). *The advanced theory of statistics*. Vol. 2, Charles Griffin, London.
- Khuri, A. I. and Sahai, H. (1985). Variance components analysis: A selective literature survey. *International Statistical Review* 53, 279-300.
- Laird, N. M. (1982). Computation of variance components using the EM algorithm. *Journal of Statistical Computation and Simulation* 14, 295-303.
- LaMotte, L. R. (1970). A class of estimators of variance components. Technical Report No. 10, Department of Statistics, University of Kentucky, Lexington, KE.
- LaMotte, L. R. (1971). Locally best quadratic estimators of variance components. Technical Report No. 22, Department of Statistics, University of Kentucky, Lexington, KE.
- LaMotte, L. R. (1973). Quadratic estimation of variance components. *Biometrics* 29, 311-330.
- Lush, J. L. (1931). The number of daughters necessary to prove a sire. *Journal of Dairy Science* 14, 209-220.
- Lush, J. L. (1933). The bull index problem in the light of modern genetics. *Journal of Dairy Science* 16, 501-522.
- Lush, J. L. (1937). *Animal breeding plans*. Iowa State University Press, Ames, IO.
- Lush, J. L. and Jones, J. M. (1923). The influence of individuality, age and season upon weights of fleeces produced by range sheep. *Texas Agricultural Experiment Station Bulletin* 311.

- Mäntysaari, E. and Van Vleck, L. D. (1989). Restricted maximum likelihood estimates of variance components from multitrait sire models with large number of fixed effects. *Journal of Animal Breeding and Genetics* 106, 409-422.
- Marquardt, D. (1963). An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. *Society for Industrial and Applied Mathematics Journal on Applied Mathematics* 11, 431-441.
- Meyer, K. (1989). Restricted maximum likelihood to estimate variance components for animal models with several random effects using a derivative-free algorithm. *Genetics Selection Evolution* 21, 317-340.
- Meyer, K. (1991). Estimating variances and covariances for multivariate animal models by restricted maximum likelihood. *Genetics Selection Evolution* 23, 67-83.
- Meyer, K. and Thompson, R. (1984). Bias in variance and covariance component estimators due to selection on a correlated trait. *Journal of Animal Breeding and Genetics* 101, 33-50.
- Miller, J. J. (1973). Asymptotic properties and computation of maximum likelihood estimates in the mixed model of the analysis of variance. Technical Report No. 12, Department of Statistics, Stanford University, Stanford, CA.
- Misztal I. (1990). Restricted maximum likelihood estimation of variance components in animal model using sparse matrix inversion and a supercomputer. *Journal of Dairy Science* 73, 163-172.
- Misztal, I. (1994). Comparison of computing properties of derivative and derivative-free algorithms in variance-component estimation by REML. *Journal of Animal Breeding and Genetics* 111, 346-355.
- Misztal, I., Lawlor, T. J., Short, T. H. and Van Raden, P. M. (1992). Multiple-trait estimation of variance components of yield and type traits using an animal model. *Journal of Dairy Science* 75, 544-551.
- Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *Com-*

- puter Journal 7, 308-313.
- Ouweltjes, W., Schaeffer, L. R. and Kennedy, B. W. (1988). Sensitivity of methods of variance component estimation to culling type of selection. *Journal of Dairy Science* 71, 773-779.
- Patterson, H. D. and Thompson, R. (1971). Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. *Biometrika* 58, 545-554.
- Perez-Enciso, M., Misztal, I. and Elzo, M. L. (1994). FSPAK — An interface for public domain sparse matrix subroutines (Manuscript). Department of Animal Science, University of Illinois, Urbana, IL.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. and Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*. 2nd eds. Cambridge University Press, Cambridge.
- Quaas, R. L. (1976). Computing the diagonal elements and inverse of a large numerator relationship matrix. *Biometrics* 32, 949-953.
- Rao, C. R. (1971). Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. *Journal of Multivariate Analysis* 1, 445-456.
- Rao, C. R. (1972). Estimation of variance and covariance components in linear models. *Journal of the American Statistical Association* 67, 112-115.
- Rao, C. R. (1979). MINQUE theory and its relation to ML and MML estimation of variance components. *Sankhyā, Series B* 41, 138-153.
- Rao, C. R. and Kleffe, J. (1988). *Estimation of variance components and applications*. North-Holland, Amsterdam.
- Reverter, A., Golden, B. L., Bourdon, R. M. and Brinks, J. S. (1994). Method R variance components procedure: Application on the simple breeding value model. *Journal of Animal Science* 72, 2247-2253.
- Sahai, H. (1979). A bibliography on variance components. *International Statistical Review* 47, 177-222.

- Sahai, H., Khuri, A. I. and Kapadia, C. H. (1985). A second bibliography on variance components. *Communications in statistics. A: Theory and Methods* 14, 63-115.
- Schaeffer, L. R. (1986). Pseudo expectation approach to variance component estimation. *Journal of Dairy Science* 69, 2884-2889.
- Searle, S. R. (1970). Large sample variances of maximum likelihood estimators of variance components using unbalanced data. *Biometrics* 26, 505-524.
- Searle, S. R. (1979). Notes on variance components estimation - A detailed account of maximum likelihood and kindred methodology. Technical Report BU-673-M, Biometrics Unit, Cornell University, Ithaca, NY.
- Searle, S. R. (1989). Variance components - Some history and a summary account of estimation methods. *Journal of Animal Breeding and Genetics* 106, 1-29.
- Searle, S. R., Casella, G. and McCulloch, C. E. (1992). Variance components. John Wiley & Sons, New York, NY.
- Smith, S. P. and Graser, H. -U. (1986). Estimating variance components in a class of mixed models by restricted maximum likelihood. *Journal of Dairy Science* 69, 1156-1165.
- Thompson, R. (1973). The estimation of variance and covariance components with an application when records are subject to culling. *Biometrics* 29, 527-550.
- Thompson, W. A. (1962). The problem of negative estimates of variance components. *Annals of Mathematical Statistics* 33, 273-289.
- Tippett, L. H. C. (1931). The methods of Statistics. Williams and Norgate, London.
- Van Raden, P. M. and Jung, Y. C. (1988). A general purpose approximation to restricted maximum likelihood: The Tilde-Hat approach. *Journal of Dairy Science* 71, 187-194.
- Van Tassell, C. P., Cassella, G. and Pollak, E. J. (1995). Effects of selection on estimates of variance components using Gibbs sampling and restricted maximum likelihood. *Journal of Dairy Science* 78, 678-692.
- Wang, C. S., Rutledge, J. J. and Gianola, D. (1993). Marginal inferences about variance

components in a mixed linear model using Gibbs sampling. *Genetics Selection Evolution* 25, 41-62.

WATCOM Int. Corp. (1993). WATCOM FORTRAN 77 Language Reference. 1st ed.

LIFEBOAT Inc. Tokyo.

Winsor, C. P. and Clarke, G. L. (1940). A statistical study of variation in the catch of Plankton nets. *Sears Foundation Journal of Marine Research* 3, 1-27.

Studies on the Restricted Maximum Likelihood Estimation
of Variance Components in Mixed Linear Models
Using an Average Information Algorithm

Ichiro Ashida

Summary and Conclusion

The method for estimating variance components in linear models is one of the most important statistical methods and is used in various fields of researches and applications. Especially in the field of animal breeding and genetics where economically important quantitative traits are treated, accurate estimates of the variance components are required in estimating genetic parameters, making inferences about the genetic merit of an animal or population of animals, and constructing a breeding plan.

Of various methods for variance component estimation developed until now, the representative of the certain best methods is the restricted maximum likelihood (REML) procedure. The REML procedure has been used as the official method in genetic evaluation systems in the world.

On REML, however, further investigation is required to reveal the detailed properties of the sampling (co)variances of the estimates, since REML is an iterative method. Moreover, it is necessary to develop a more efficient computing algorithm for REML estimation of variance components in the general mixed linear model from unbalanced and large data sets.

The present study was undertaken to find an effective expression for the sampling covariance matrix of the REML estimators, noticing the minimum variance quadratic unbiased estimation (MIVQUE) of variance components, and to develop a new efficient numerical technique that can handle the whole process of the point estimation and the sampling (co)variance estimation.

I. The MIVQUE based-sampling covariance matrix of the REML estimators

Previously, the sampling (co)variances of the REML estimators defined as the elements of the inverse matrix of the Fisher information matrix, which is represent the large sample asymptotic sampling (co)variances. Herein, noticing the structure of the sampling (co)variances of the MIVQUE estimators whose prior information is the REML estimators and assuming the basic mixed linear model, an expression for the sampling covariance matrix of the REML estimators was derived.

The resulting elements of the derived covariance matrix (denoted as the \mathbf{V}_1 matrix) included the traces of huge products of the inverse of the variance matrix of the random vector and a partitioned matrix of a g-inverse of the mixed model coefficient matrix, the true components of variances and their REML estimators. A Monte Carlo simulation conducted indicated that for a limited size of the sample, use of the derived \mathbf{V}_1 matrix is more valid than that of the inverse of the Fisher information matrix, when true variances are known.

However, the large computational requirement with the \mathbf{V}_1 matrix

suggested the necessity of finding its more simplified form.

- II. A sampling covariance matrix of the REML estimators derived by the newly proposed pseudo-variance approach

To reduce the computational load in the calculation of the V_1 matrix, an approach which will be called the pseudo-variance approach (PVA) was proposed, introducing the large sample theory. The term 'pseudo-variance' means deriving variances of quadratic forms as if the estimators of variance components are equal to the true values in the population.

The PVA was applied to the V_1 matrix and consequently a more simplified matrix (referred to as the V_2 matrix) was obtained. The elements of the V_2 matrix contained only the true components of variances, and the computational requirement with this matrix was considerably reduced, relative to the V_1 matrix. A further theoretical consideration revealed that the V_2 matrix is equivalent to the inverse of the Fisher information matrix, and therefore this V_2 matrix stands for the large sample asymptotic covariance matrix of the REML estimators.

The PVA appeared to be also useful in deriving the large sample (co)variances of the estimators by the REML-like methods such as the pseudoexpectation methods that are not a likelihood-based procedure. For the computation of estimated sampling (co)variances of the REML estimates, however, need to take further theoretical consideration was suggested, since the equivalence found between the derived V_2 matrix and the inverse of the Fisher information matrix implies that the load in the practical calculation of these matrices in which the true values of variances are replaced by the

actual REML estimates is still so heavy, particularly in the analysis of a large data set.

III. An expression for the average information matrix for the basic mixed linear model and a numerical technique for REML

Assuming the basic mixed linear model containing one random effect except for the residual term, an efficient procedure for REML estimation that covers the whole process of the point estimation and the estimation of the large sample sampling (co)variances was developed herein.

First, an expression for the average information (AI) matrix was derived. Then, replacing the Hessian matrix by the derived AI matrix, a quasi-Newton type procedure for REML estimation (which will be called the AIREMLm procedure) was defined. The AI matrix derived does not include the vector of the predicted residuals and any incidence matrices, and rather contains a specific type of quadratic form for the subvector of the vector of solutions to the mixed model equations. The quadratic form involved the inverted variance of the random vector and a partitioned matrix of a g -inverse of the mixed model coefficient matrix. With the current AI matrix, however, the calculation of the trace of the matrix products as required in the V_2 matrix or the inverse of the Fisher information matrix was able to be avoided. Thus, an estimate of the large sample (co)variance can be obtained as the inverse of the present AI matrix with true variances replaced by their final estimates, namely the REML estimates.

An illustrative numerical analysis using a data-sample of carcass weight in the Japanese Black cattle suggested that the present AIREMLm

procedure is superior to the REML procedure using the EM algorithm in terms of the computing time and to the previous procedure using a quasi-Newton method with a different expression for the AI matrix in terms of the computer memory.

IV. An expression for the average information matrix for the general mixed linear model and a numerical technique for REML

Assuming the general mixed linear model containing more than two random effects except for the residual effect, the general form of the AI matrix found in the previous chapter was derived. The expanded version of the AIREMLm procedure for estimating multiple components of variances was defined, similarly utilizing the quasi-Newton type equation in which the Hessian matrix was replaced by the derived AI matrix.

The current elements of the AI matrix involved a specific type of bilinear form for the vectors of solutions to two different random effects in addition to the quadratic form for each random effect predicted.

An illustrative numerical analysis indicated that the current AIREMLm procedure is advantageous over the REML procedure using the EM algorithm and also utilizing the Aitken extrapolation technique in terms of the number of iterations required to attain convergence.

V. An integrated numerical technique for REML estimation using the AI and EM algorithms

The (quasi-)Newton type method is a procedure commonly used for

maximizing nonlinear functions, and is an efficient procedure, as long as successful updating of estimates in the rounds of iteration is achieved. However, with this approach, global convergence is not always guaranteed, and parameter estimates may exceed the boundary. Hence, AIREMLm using a quasi-Newton type method may give negative estimates of variances in some cases.

Accordingly, herein, an unified procedure (which will be called AIREMLme) was proposed, which uses the AI algorithm as its main algorithm, but utilizes the EM estimate to modify the step direction and size, if the procedure fails to increase the function to be maximized. The current procedure, that is AIREMLme, guarantees the converged value within the parameter space. Furthermore, this procedure requires no additional computing time and memory, compared to the AIREMLm procedure, since the first partial derivative of the REML log-likelihood function is already used as the gradient vector in the quasi-Newton iterative equation for the AIREMLm procedure.

Results of numerical analyses demonstrated that the present AIREMLme procedure performs very well, even if the AIREMLm procedure fails to give REML estimates, and that convergence with AIREMLme is obviously fast, relative to the EM algorithm using the Aitken extrapolation.

VI. Comparison of computing properties among numerical techniques using the AI, D and DF algorithms for REML estimation

To clarify the relative computing property of the AIREMLme procedure, it was compared to certain typical procedures using the AI, D and DF

algorithms: the Johnson & Thompson procedure using an AI algorithm, the conventional procedure using the EM algorithm, an accelerated EM procedure, an EM procedure using the Aitken extrapolation and a procedure using the DF algorithm. Two data sets concerning carcass weight of the Japanese Black cattle were analyzed using the two criteria for convergence evaluation. Computing properties compared were the number of iterations, the computing time per round (computing time per likelihood evaluation in the case of the DF algorithm) and the total computing time. All of the computer programs for the AI and D algorithms were written using the FSPAK subroutines, and the 'MTDFREML' program developed by the Animal Research Service, United States Department of Agriculture was utilized for the DF analyses.

All procedures gave similar estimates. In details, however, the two AI procedures, or the AIREMLme and the Johnson & Thompson procedures, showed the best numerical property of estimates, while the DF procedure did the poorest one. Also, the AI procedures required the least number of iterations to attain convergence, and the conventional EM procedure necessitated the highest number of iterations. The computing time per round was shortest with the DF approach, while it was longest with the Johnson & Thompson procedure. For the property of the total computing time, AIREMLme was best, and the Johnson & Thompson procedure was a good second, followed by the EM procedure using the Aitken extrapolation, the DF procedure, the accelerated EM procedure and the conventional EM procedure in order of time required. Therefore, further noting that the Johnson & Thompson procedure requires more computer memory than AIREMLme and does not always guarantee convergence within

the parameter space, AIREMLme developed herein was considered to be a method superior to the other procedures for REML estimation.

Conclusion

The REML method is one of the best procedures for estimating variance components in the general mixed linear model. However, there still exist some important topics to be further addressed on the point and the sampling (co)variance estimation.

In this study, noticing the MIVQUE algorithm, a new valid expression for the sampling covariance matrix of the REML estimators was derived, which included the REML estimators in addition to the true values of variances. Because of the heavy computational load with the derived matrix, another simpler matrix for the sampling (co)variances was constructed by proposing an approach based on the large sample theory. The simpler matrix was found to be equivalent to the inverse of the Fisher information matrix which represents the large sample asymptotic sampling (co)variances of the REML estimators, indicating that the computational requirement with the simpler matrix derived is still considerable.

Accordingly, to develop an efficient numerical technique for REML estimation that can handle the whole process from the point estimation to the sampling (co)variance estimation, the average information of the REML log-likelihood was noticed, and a new expression for the average information matrix was found. Moreover, a new numerical technique for REML estimation was developed using a quasi-Newton type procedure with the derived AI matrix and incorporating the advantage of the EM

algorithm.

Being based on a numerical comparison of computing properties among the proposed numerical technique and other typical procedures for REML estimation and considering the functional advantages of the proposed technique, it was concluded that the numerical method developed herein is an efficient, practical and promising procedure for REML estimation of variance components in the general mixed linear model.