No. 1071

林分成長分析のための一般化非線形混合効果モデル

by
柳原宏和・吉本敦・能本美穂

December 2003

林分成長分析のための一般化非線形混合効果モデル

A Generalized Non-linear Mixed-effects Model for Forest Growth Analysis

柳原 宏和　筑波大学 社会工学系
吉本 敦　東北大学大学院 環境科学研究科
能本 美穂　九州大学大学院 生物資源環境科学府

Yanagihara, H.[1], Yoshimoto, A.[2] & Nomoto, M.[3]

[1] Institute of Policy and Planning Sciences, University of Tsukuba

[2] Graduate School of Environmental Studies, Tohoku University

[3] Graduate School of Bioresource and Bioenvironmental Sciences, Kyushu University

キーワード: 森林測樹学, 成長分析, 多変量解析, 非線形回帰モデル, ランダム効果係数.

要約: 個別に経時測定データが得られた複数の個体が一つのグループを成しているような成長データにランダム効果を伴った多変量非線形回帰モデルを成長曲線モデルとして用いれば, グループの平均成長曲線とそれぞれの個体における成長曲線を同時に推定することができる. 林分の成長データに関して言えば, そのようなモデルの適用により, 林分平均成長曲線と林分内の林木別成長曲線を同時に記述することが可能となることになる. 本論文では, ランダム効果を伴った多変量非線形回帰モデルの一つである, 一般化非線形混合効果モデルを成長曲線モデルとして用いた林分成長解析法とその推定手法を紹介する.

Abstract: For the grouped growth data sampled individually with repeated measures, two types of growth curves can be simultaneously estimated by using a multivariate non-linear regression model with random effects. One is the

average growth curve for the group, and the other is each individual growth curve within group. With the use of forest stand growth data we elaborate methodological steps for estimating the average growth curve as well as an individual growth curve. A confidence interval of the average growth curve for the group is also determined. We apply a generalized non-linear mixed-effects model to the analysis, which is one of multivariate non-linear regression models with random effects.

1. はじめに

林分の成長データは分析の対象になっている林分内の各林木について経時的，または繰り返し測定により得られる，いわゆる経時測定データである．このようなデータに対し分析を行なう場合，林分全体の経時的成長を記述し，かつ林分内の各林木の成長を総合的に記述する必要がある．林分内の平均成長に関しては，Potthoff & Roy (1964) により提案された一般化多変量分散分析モデル (GMANOVA モデル) を適用すれば，観測時点に対する多項式により平均成長を記述することができる (柳原・吉本 2003)．ただし，GMANOVA モデルの適用に際して，以下の 3 点に留意する必要がある．

1) 観測値がすべて同時点で観測されたバランスデータのみ適用可能．

2) 林分全体の平均成長に対する曲線のみ推定することができ，林分内の各林木に対する成長を記述することができない．

3) 成長曲線としては時点に対する多項式のみ適用可能．

Vonesh & Carter (1987) は個体間の変動を考慮したランダム効果係数を導入することにより上記留意事項 1) と 2) を解決した．彼らのモデルは観測値がすべて同時点に観測されていないアンバランスデータにも対応でき，またランダム効果係数を事後に推定できるため，林分全体の平均成長に対する曲線と林分内の各林木の成

長曲線を同時に推定することができる. しかしながら, 成長曲線については時点に対する多項式しか用いることができず, 留意事項 3) は未解決のままであった. そこで, Lindstrom & Bates (1990) や Vonesh & Carter (1992) は, Vonesh & Carter (1987) のモデルをより複雑な非線形関数でも適用できるように拡張し, 留意事項 3) を解決した. 彼らが提案したモデルは一般に, ランダム効果を持つ多変量非線形回帰モデルといわれるものである.

本論文の目的は, ランダム効果を伴う多変量非線形回帰モデルを用いた林分成長分析法を提示することにある. ここで用いるモデルは, ランダム効果を伴う多変量非線形回帰モデルの範疇に含まれる, 一般化混合効果非線形モデル (Generalized Non-linear Mixed-effects Model, Vonesh & Carter 1992) と言われるものである. 従来の手法との違いは, 以下のような分析結果を同時に得ることができることである.

1. 林分全体の平均成長曲線.
2. 林分内の各林分の成長曲線.
3. 林分全体の平均成長曲線の信頼区間.
4. 個別林分の成長曲線のパラメータの相関係数.

成長曲線の推定と同じように, 信頼区間の推定は重要な分析項目の一つである. 成長データが変われば, 結果として得られる林分の平均成長曲線が変化する. そのため, n 本の成長データが無限回に抽出されそのたびに推定曲線が計算された場合, それによって推定される林分全体の平均成長曲線は, 実際には知ることができない真の林分平均成長を中心にばらついたものとなる. そして平均成長曲線の信頼区間を知ることにより, どのような範囲でばらついているのかを認識することができる.

本論文の構成は以下の通りである. 第 2 章では林分成長分析におけるランダム効果を伴う多変量非線形回帰モデルの必要性を述べる. 第 3 章では成長曲線モデルとして用いた一般化非線形混合効果モデルと未知パラメータの推定法, またそれらをもとにした成長曲線の推定の一般論を明記し, 第 4 章ではこのモデルを用い

た林分成長解析の適用例を示す.

2. ランダム効果を伴った多変量非線形回帰モデルへ

今, 林分内の第 i 番目の林木の成長が, 林齢 $t_1, \ldots, t_p$ に対し経時測定データ $y_{i1}, \ldots, y_{ip}$ として観測されたとする. この林木の平均的な成長過程を調べる場合, t_j 年での成長は林分全体の平均的な成長 μ_j を中心にばらつきを持ったモデルを考える. つまり $\boldsymbol{y}_i = (y_{i1}, \ldots, y_{ip})'$ を $p \times 1$ 観測値ベクトル, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \ldots, \mu_p)'$ を $p \times 1$ 平均ベクトルとすると,

$$(1) \qquad \boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad (i = 1, \ldots, n),$$

である. なお, ここでの $\boldsymbol{\varepsilon}_i = (\varepsilon_{i1}, \ldots, \varepsilon_{ip})'$ は $p \times 1$ ベクトルで, ランダムな変動を表す $p \times 1$ 誤差ベクトルである.

従来の単変量回帰モデルの手法では, この誤差ベクトルの成分 ε_{ij} はそれぞれの個体と時点において独立で同一な平均 $\mathrm{E}(\varepsilon_{ij}) = 0$, 分散 $\mathrm{Var}(\varepsilon_{ij}) = \sigma^2$ を持つ分布に従うと仮定される. すなわち, “ランダム変動は各個体, 各時点において独立で分散が等しい” ということである. このことは, 林木の成長データは各時点においてその平均から “ランダムにかつ均一の幅をもって散らばっている” ということになる. ランダムに散らばるということは, 平均値から大きい値も小さい値も周期性を持つことなく観測値として出現しているということであり, 均一の幅をもって散らばるということは, すべての時点における観測値の散らばりは等しいということである.

一般的に観測される林木の成長データについては, 林分全体の平均成長に対し各林木の成長のずれ (変動) は各時点において独立ではなく, 比較的大きい林木の成長は常に平均よりも大きく, 小さい林木の成長は平均成長よりも常に小さい傾向にある. このことはそれぞれの時点におけるランダム変動は独立ではなく何らかの相関を持っていること, すなわち系列相関があることを示している. 更に平均成長からのばらつきの度合いは, 林齢が高くなればなるほど大きくなり, それぞれの時

点における誤差項の分散は同一ではないということがわかる. 従って, 仮定したモデルと対象となる成長の真のモデルに隔たりがあれば分析結果にバイアスが生じるため, 林分成長データにおいて系列相関と異分散性を仮定する必要が出てくる. つまり, (1) 式の ε_i はそれぞれの個体において独立に平均 $\mathrm{E}(\varepsilon_i) = \mathbf{0}$, 共分散行列 $\mathrm{Cov}(\varepsilon_i) = \Sigma$ を持つような分布に従うとする $p \times 1$ ランダム変数ベクトルにする必要がある. このようなモデルを用いれば, 個々の林木の成長は林分の平均成長 $\boldsymbol{\mu}$ を中心とし, 互いに独立に, しかしながら各林木に対し系列相関と時点に関して異分散であるランダム変数を伴って変動する状況を表現することができる. このように一つの個体から得た観測値を一つのデータセットとしてそのデータセットに相関や異分散性等の関係を仮定して解析を行なうことができるモデルが多変量モデルである.

林木成長は林齢に依存するものであるため, 成長を時間の関数として記述することにより成長の推定, 予測が可能となってくる. GMANOVA モデル (Potthoff & Roy 1964) は, モデル (1) での $\boldsymbol{\mu}$ の時点に対する成長の変化が多以下の項式によって記述されるものである. つまり,

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \theta_0 + \theta_1 t_1 + \cdots + \theta_q t_1^q \\ \vdots \\ \theta_0 + \theta_1 t_p + \cdots + \theta_q t_p^q \end{pmatrix}.$$

その結果, 一般に林木の成長はシグモイド型であるため, 林木成長データに GMANOVA モデルをあてはめることは好ましくないことがわかる. そこで, $\boldsymbol{\mu}$ の構造にはシグモイド型の非線形関数であるリチャーズの成長関数 (Richards 1958)

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \theta_1(1 - e^{-\theta_2 t_1})^{\theta_3} \\ \vdots \\ \theta_1(1 - e^{-\theta_2 t_p})^{\theta_3} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

を用いて分析を行うことにした. これにより, 林分内の林木の成長はシグモイド型の成長曲線を中心に系列相関と異分散性を持ったばらつきで散らばっているという構造を記述することができることになる.

ここで注意しなくてはならないことは, 上記のモデルでは, すべての個体に対し

て観測時点が共通であるバランスデータのみ解析可能であるということである. しかしながら林木成長データについては常に観測時点がすべて同じとは限らない. そのため, (1) 式の誤差項の仮定をさらに修正する必要がある. ε_i の共分散行列 Σ は観測時点に依存するものであるので, 仮に観測時点が林木によって異なれば Σ もそれぞれの林木によって異なり, 誤差の共分散行列を Σ_i と変える必要がある. しかしながら, それぞれの林木に対し誤差共分散を Σ_i とすれば, 未知パラメータ数が標本数 n をはるかに超え, 推定が不可能になる.

上記の問題に対し, 成長曲線を表す関数のパラメータに確率変数を導入して解決したものが, ランダム効果を伴う多変量非線形回帰モデルである. このモデルはランダム効果係数と呼ばれる確率変数をモデルに導入することにより, 誤差項の共分散行列に構造 $\Sigma_i(\boldsymbol{\theta})$ を仮定したモデルである. 共分散行列の構造を表すパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ は個々の林木に対して共通であるので, $\boldsymbol{\theta}$ を推定できれば, 個々の林木における誤差ベクトルの共分散行列の推定量を得ることが可能となる. これにより, アンバランスデータの問題が解決され, さらに未知パラメータ数も削減することが可能となる. また, 事後にこの係数を推定することにより, 平均成長と個体成長の曲線を同時に推定することができる.

3. 成長曲線モデル

この章では, ランダム効果をもつ多変量非線形回帰モデル, 特に成長曲線モデルとして用いている一般化非線形混合効果モデルとその推定法を紹介する.

3.1. 一般化非線形混合効果モデル

今, 同一グループ内の n 個の個体から観測値が得られ, i 番目の個体の観測値が p_i 個の時点で観測されたとする. y_{ij} を第 i 番目の個体の t_{ij} 時点における観測値 $(i = 1, \ldots, n,\ j = 1, \ldots, p_i)$ とし, $\boldsymbol{y}_i = (y_{i1}, \ldots, y_{ip_i})'$ を i 番目の個体の $p_i \times 1$ 繰り返し観測により得られた観測値ベクトルとする. この観測値ベクトル $\boldsymbol{y}_i$ に以下

のような観測時点に関する非線形な成長曲線モデルをあてはめる.

$$(3) \qquad y_i = \eta(t_i, \xi_i) + \varepsilon_i, \quad (i = 1, 2, \ldots, n).$$

ただし, $\eta(t_i, \xi_i)$ は q 個のパラメータを持つ t_i の関数で定義される $p_i \times 1$ 平均ベクトル, $\xi_i = (\xi_{i1}, \ldots, \xi_{iq})'$ は $q \times 1$ 未知パラメータベクトル, $t_i = (t_{i1}, \ldots, t_{ip_i})'$ は $p_i \times 1$ 時点ベクトル, $\varepsilon_i = (\varepsilon_{i1}, \ldots, \varepsilon_{ip_i})'$ は $p_i \times 1$ 誤差ベクトルでそれぞれ独立に平均 $\mathrm{E}(\varepsilon_i) = 0$, 共分散行列 $\mathrm{Cov}(\varepsilon_i) = \sigma^2 I_{p_i}$ を持つ分布に従うとする. なお, $\eta(t_i, \xi_i)$ は既知関数 $f(t_{ij}, \xi_i)$ により以下のように表されるものとする.

$$\eta(t_i, \xi_i) = \begin{pmatrix} f(t_{i1}, \xi_i) \\ \vdots \\ f(t_{ip_i}, \xi_i) \end{pmatrix}.$$

ここで, 未知パラメータベクトル ξ_i に対して, それぞれの個体間の変動を考慮するため,

$$\xi_i = \theta + \beta_i, \quad (i = 1, 2, \ldots, n),$$

を仮定する. ただし, $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_q)'$ は $q \times 1$ 未知パラメータベクトルであり, β_i は (3) 式の ε_i と独立で, かつそれぞれ独立に平均 $\mathrm{E}(\beta_i)$, 共分散行列 $\mathrm{Cov}(\beta_i) = \Psi\ (\geq 0)$ を持つ分布に従うランダム変数ベクトルとする. このモデルでは, 各個体の未知パラメータベクトル ξ_i は θ を中心にランダム変数 β_i を伴って散らばっていることを表している. この β_i はそれぞれの個体特有の変動を表す変数で, ランダム効果係数ベクトルと呼ばれるものである. このような, 多変量非線形回帰モデルの個体別の未知パラメータに確率変動を導入して各個体特有の変動を表したモデルが, ランダム効果を伴った多変量非線形回帰モデルである.

さて, 実際の推定に関しては, モデル (3) の未知パラメータを直接推定することが困難であるために, 近似モデルを構築する. 今 $Z(t_i, \theta)$ を以下のような $f(t_{ij}, \xi_i)$ の偏微分で表された $p_i \times q$ 行列とする.

$$Z(t_i, \theta) = \left.\frac{\partial \eta(t_i, \xi_i)}{\partial \xi_i'}\right|_{\xi_i = \theta} = \left.\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi_{i1}} f(t_{i1}, \xi_i) & \cdots & \frac{\partial}{\partial \xi_{iq}} f(t_{i1}, \xi_i) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \xi_{i1}} f(t_{ip_i}, \xi_i) & \cdots & \frac{\partial}{\partial \xi_{iq}} f(t_{ip_i}, \xi_i) \end{pmatrix}\right|_{\xi_i = \theta}.$$

この行列を用いれば, モデル (3) を β_i まわりのテーラー展開から以下のように近似することができる.

$$(4) \qquad \boldsymbol{y}_i \approx \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta}) + Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\beta}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i = \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{e}_i, \quad (i = 1, 2, \ldots, n).$$

ただし,

$$\boldsymbol{e}_i = Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\beta}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad (i = 1, 2, \ldots, n),$$

であり, それぞれ独立な $p_i \times 1$ 確率変数ベクトルで, $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ と $\boldsymbol{\beta}_i$ の定義から以下のような平均と共分散行列をもつ分布に従うことがわかる.

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{e}_i) = \boldsymbol{0},$$
$$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{e}_i) = \Sigma_i = \sigma^2 \cdot I_{p_i} + Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta}) \cdot \Psi \cdot Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta})'.$$

ここで新たに, $(q + q(q+1)/2 + 1) \times 1$ 未知パラメータベクトル

$$\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\theta}', \mathrm{vech}(\Psi)', \sigma^2)',$$

を導入すれば, Σ_i は $\boldsymbol{t}_i$ と $\boldsymbol{\gamma}$ の関数値行列と考えることができる. これを $\Sigma_i = \Sigma(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\gamma})$ とおく. なお, vech(A) は対称行列 A の異なる成分を並べたベクトルであり, $p \times p$ 対称行列 A の (i, j) 成分を a_{ij} とすると,

$$\mathrm{vech}(A) = (a_{11}, a_{21}, \ldots, a_{p1}, a_{22}, \ldots, a_{p2}, a_{33}, \ldots, a_{p\ p-1})',$$

(Magnus & Neudecker 1999, pp. 48 を参照). (4) 式のモデルで $\boldsymbol{e}_i$ を誤差とみなすと, それぞれのデータにおいて共分散行列は異なるが, 未知パラメータ数は $(q+q(q+1)/2+1)\times 1$ となるような多変量回帰モデルであることがわかる. この近似モデル (4) が一般化非線形混合効果モデル (Generalized Non-linear Mixed-effects Model) と呼ばれるものである. なお $\Psi = 0$ であれば, ランダム効果を伴わない非線形回帰モデルになる.

3.2. 成長曲線の推定

仮に誤差項に具体的な分布が仮定されれば, 最尤法を用いてパラメータ推定を行なうこともできる (Lindstrom & Bates 1990). しかしながら, 本論文では誤差分布を具体的に仮定していないため最尤法は不適当である. そこで本論文では, 具体的な誤差分布の仮定を必要としない EGLS (Estimated Generalized Least Squares, Vonesh & Carter 1992) 法を用いてモデル (4) の未知パラメータの推定を行う. EGLS 法は推定された共分散行列で標準化された残差平方和の最小化により未知パラメータを推定するものであり, 以下の 4 つのステップにより推定量を得ることが出来る.

Step 1. まず残差平方和 RSS (Resudual Sum of Squares)

$$RSS(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \{\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta})\}' \{\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta})\},$$

を最小にする $\boldsymbol{\theta}$ を $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ とする.

Step 2. 残差の推定量を

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_i = \boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i, \tilde{\boldsymbol{\theta}}), \quad (i = 1, 2, \ldots, n),$$

とし,

$$\tilde{\boldsymbol{b}}_i = \left\{Z(\boldsymbol{t}_i, \tilde{\boldsymbol{\theta}})' Z(\boldsymbol{t}_i, \tilde{\boldsymbol{\theta}})\right\}^{-1} Z(\boldsymbol{t}_i, \tilde{\boldsymbol{\theta}})' \tilde{\boldsymbol{e}}_i, \quad \tilde{s}_i^2 = \frac{1}{p_i - q} \tilde{\boldsymbol{e}}_i' \left\{I_{p_i} - P_{Z_i(\boldsymbol{t}_i, \tilde{\boldsymbol{\theta}})}\right\} \tilde{\boldsymbol{e}}_i,$$

を計算する. ただし, P_A は行列 A が張る空間への射影行列で $P_A = A(A'A)^{-1}A'$ で定義される.

Step 3. $\tilde{B} = (\tilde{\boldsymbol{b}}_1, \ldots, \tilde{\boldsymbol{b}}_n)'$ ($n \times q$ 行列) とし, $\boldsymbol{1}_n$ をすべての要素が 1 である $n \times 1$ ベクトルとする. ここで, 行列

$$S_{\tilde{\boldsymbol{b}}} = \frac{1}{n-1} \tilde{B}' \left(I_n - \frac{1}{n} \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n'\right) \tilde{B}, \quad (q \times q \text{ 行列}),$$

を計算し, $S_{\tilde{\boldsymbol{b}}}$ と Step 2 を通じて得られる σ^2 の推定量

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{p - nq} \sum_{i=1}^{n} (p_i - q) \tilde{s}_i^2, \quad \left(p = \sum_{i=1}^{n} p_i\right),$$

を用いて, Ψ の推定量を以下のように計算する.

$$\hat{\Psi} = \begin{cases} S_{\tilde{b}} - \dfrac{\hat{\sigma}^2}{n}\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\left\{Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})'Z_i(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})\right\}^{-1}, & (\hat{\lambda} > \hat{\sigma}^2) \\ S_{\tilde{b}} - \dfrac{\hat{\lambda}}{n}\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\left\{Z_i(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})'Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})\right\}^{-1}, & (\hat{\lambda} \le \hat{\sigma}^2) \end{cases}.$$

ただし, $\hat{\lambda}$ は $q \times q$ 行列

$$S_{\tilde{b}}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})'Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})\right\}^{-1}\right]^{-1},$$

の最小固有値である.

Step 4. $\tilde{\gamma} = (\tilde{\boldsymbol{\theta}}', \mathrm{vech}(\hat{\Psi})', \hat{\sigma}^2)$, $\Sigma(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\gamma}) = \hat{\sigma}^2 I_{p_i} + Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})\hat{\Psi}Z(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\theta})'$ とし, 以下の重み付き残差平方和 WRSS (Weighted Residual Sum of Squares)

$$WRSS(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\gamma}) = \sum_{i=1}^{n}\{\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})\}'\,\Sigma(\boldsymbol{t}_i,\tilde{\gamma})^{-1}\,\{\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})\},$$

を最小にする $\boldsymbol{\theta}$ を $\boldsymbol{\theta}$ の EGLS 推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\tilde{\gamma})$ とする.

EGLS 法において, 残差平方和と重み付き残差平方和の最小化に関しては, 探索範囲内で最適な値を探し, その範囲を移動させることにより最適値を得るスパイダーアルゴリズム (Ohtaki & Izumi 1999) を用いた. このスパイダーアルゴリズムについては Appendix 1 において詳しく説明した. 以下簡略化のために $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}(\tilde{\gamma})$ とおく.

次に, EGLS 法により得られる推定値 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ を使って成長曲線を推定する. 一般化非線形混合効果モデルでは, ランダム効果係数ベクトルを推定することにより, 平均成長を表す曲線と個別の成長を表す曲線を同時に推定することができる. $\boldsymbol{t} = (t_1, \ldots, t_m)'$ をすべての $\boldsymbol{t}_i$ の異なる要素を成分に持つベクトルとする. つまり $\boldsymbol{t}_i = (1,2,5,6)'$, $\boldsymbol{t}_2 = (1,3,6,7)'$ であれば, $\boldsymbol{t} = (1,2,3,5,6,7)'$ となる. このとき, n 個の個体における全体の平均成長を表す曲線は以下のようになる.

(5) $$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t},\hat{\boldsymbol{\theta}}).$$

また, 個体の変動を表すランダム効果係数ベクトル $\boldsymbol{\beta}_i$ は

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_i = \left\{Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})'Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}}))\right\}^{-1} Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})'\left\{\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})\right\},$$

と推定できるので, それぞれの個体別の成長曲線は以下のようになる.

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{y}}_i &= \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}}) + Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})\hat{\boldsymbol{\beta}}_i \\ &= P_{Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})}\boldsymbol{y}_i + \left(I_{p_i} - P_{Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})}\right)\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}}).\end{aligned} \tag{6}$$

これらの結果は未知パラメータの推定値 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ を成長曲線の関数に代入することで得ることができる. また $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ の漸近正規性を用いることで, 以下の定理により, 平均成長を表す曲線の漸近 $1-\alpha$ 信頼区間を求めることもできる (導出に関しては Appendix 2 を参照).

定理: $\chi^2_{q,\alpha}$ を自由度 q の χ^2 分布の上側 α % 点, $\boldsymbol{z}(t_j,\boldsymbol{\theta}_0)$ を以下のような $q\times 1$ ベクトルとする.

$$\boldsymbol{z}(t_j,\boldsymbol{\theta}_0) = \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}f(t_j,\boldsymbol{\theta})\Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0} = \left.\begin{pmatrix}\dfrac{\partial}{\partial\theta_1}f(t_j,\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \dfrac{\partial}{\partial\theta_q}f(t_j,\boldsymbol{\theta})\end{pmatrix}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}.$$

このとき,

$$\begin{aligned}c_j^{(low)} &= f(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}}) - \sqrt{\frac{1}{n}\chi^2_{q,\alpha}\left\{\boldsymbol{z}(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}})'\hat{\Omega}(\hat{\boldsymbol{\gamma}})^{-1}\boldsymbol{z}(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}})\right\}}, \\ c_j^{(up)} &= f(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}}) + \sqrt{\frac{1}{n}\chi^2_{q,\alpha}\left\{\boldsymbol{z}(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}})'\hat{\Omega}(\hat{\boldsymbol{\gamma}})^{-1}\boldsymbol{z}(t_j,\hat{\boldsymbol{\theta}})\right\}},\end{aligned}$$

とする. ただし $\hat{\boldsymbol{\gamma}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathrm{vech}(\hat{\Psi}), \hat{\sigma}^2)'$ であり

$$\hat{\Omega}(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = \left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})'\Sigma(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\gamma}})^{-1}Z(\boldsymbol{t}_i,\hat{\boldsymbol{\theta}})\right\}^{-1},$$

である. ここで $\boldsymbol{c}_{low} = (c_1^{(low)},\ldots,c_m^{(low)})'$, $\boldsymbol{c}_{up} = (c_1^{(up)},\ldots,c_m^{(up)})'$ とすると, 平均成長を表す曲線 $\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t},\boldsymbol{\theta}_*)$ の漸近 $1-\alpha$ 信頼区間は以下のようになる.

$$\boldsymbol{c}_{low} \le \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t},\boldsymbol{\theta}_*) \le \boldsymbol{c}_{up}. \tag{7}$$

4. 林分成長解析への適用

本章では, 前章で導入した一般化非線形混合効果モデルを用いて林分成長分析を行なった例を示す. まず $\boldsymbol{y}_i$ はそれぞれ第 i 番目の林木の t_{i1} 齢から t_{ip_i} 齢までの成長データを並べたベクトルとなり, y_{ij} は i 番目の林木の t_{ij} 林齢における成長量である. 表 1 のような幹材積成長データがあった場合, No. 7 の林木を $i=1$, No. 14 の林木を $i=2$ とした場合, $\boldsymbol{t}_1=(2,\ldots,23)'$, $\boldsymbol{t}_2=(1,\ldots,23)'$ であり, $p_1=22$, $p_2=23$ となり, $\boldsymbol{y}_1$, $\boldsymbol{y}_2$ はそれぞれの幹材積となる. なお, ここで用いた成長データは同林齢内のものであるため, 最大の林齢は同一のものとなるが, 林分成長の違いにより測定可能な最小林齢は異なっている.

— この付近に表 1 を挿入して下さい —

このようなデータに対し, (2) 式のリチャーズの成長関数を $f(t,\boldsymbol{\xi}_i)$ に適用したモデルを考察してみる. なお, このリチャーズの関数をシグモイド型に制約するため, $\boldsymbol{\xi}_i \to e^{\boldsymbol{\xi}_i}$ という変換を行なった成長関数を使うことにする. なお, パラメータ空間は $[0,\infty]$ から $[-\infty,\infty]$ となる. この関数を使うとモデルの平均成長は,

$$\eta(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\xi}_i)=\begin{pmatrix} f(t_{i1},\boldsymbol{\xi}_i) \\ \vdots \\ f(t_{ip_i},\boldsymbol{\xi}_i) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e^{\xi_{i1}}\left\{1-\exp\left(-e^{\xi_{i2}}t_{i1}\right)\right\}^{\exp(\xi_{i3})} \\ \vdots \\ e^{\xi_{i1}}\left\{1-\exp\left(-e^{\xi_{i2}}t_{ip_i}\right)\right\}^{\exp(\xi_{i3})} \end{pmatrix}, \tag{8}$$

と表すことができる. このモデルの場合, パラメータ数 q は 3 である. この関数の偏微分を計算すると $Z(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})$ $(i=1,\ldots,n)$ が得られ, 以下のようになる.

$$Z(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})=D_{f(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})}\begin{pmatrix} 1 & \dfrac{\exp\left(\theta_2+\theta_3-e^{\theta_2}t_{i1}\right)}{\{1-\exp\left(-e^{\theta_2}t_{i1}\right)\}} & e^{\theta_3}\log\left\{1-\exp\left(-e^{\theta_2}t_{i1}\right)\right\} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \dfrac{\exp\left(\theta_2+\theta_3-e^{\theta_2}t_{ip_i}\right)}{\{1-\exp\left(-e^{\theta_2}t_{ip_i}\right)\}} & e^{\theta_3}\log\left\{1-\exp\left(-e^{\theta_2}t_{ip_i}\right)\right\} \end{pmatrix}$$

ただし, $D_{f(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})}=\mathrm{diag}(f(t_{i1},\boldsymbol{\theta}),\ldots,f(t_{ip},\boldsymbol{\theta}))$ である. ここで $\mathrm{diag}(a_1,\ldots,a_m)$ は

対角成分が $a_1,\ldots,a_m$ である以下の対角行列を表す. つまり,

$$\mathrm{diag}(a_1,\ldots,a_m)=\begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_m \end{pmatrix}.$$

なお, モデル (8) において, $e^{\xi_{i1}}$, $e^{\xi_{i2}}$, $e^{\xi_{i3}}$ は, 通常のリチャーズの成長関数における, i 番目の林木の成長飽和密度, 内的自然増加率, 曲線の形状を決めるパラメータ, また e^{θ_1}, e^{θ_2}, e^{θ_3} は林分平均成長の成長飽和密度, 内的自然増加率, 曲線の形状を決めるパラメータである.

これらの成長関数 $f(t_{ij},\boldsymbol{\xi}_i)$ とその偏微分行列 $Z(\boldsymbol{t}_i,\boldsymbol{\theta})$ を用いて $\boldsymbol{\theta}$, σ^2, Ψ の推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, $\hat{\sigma}^2$, $\hat{\Psi}$ を 3.2 章の推定法により計算すれば以下の分析結果を得ることができる.

1. (5) で得られる林分の平均成長を表す推定曲線 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$.
2. (6) で得られる林分内の林木の個別成長を表す推定曲線 $\hat{\boldsymbol{y}}_i$ $(i=,\ldots,n)$.
3. (7) で得られる林分の平均成長曲線の信頼区間 $[\boldsymbol{c}_{low},\boldsymbol{c}_{up}]$.
4. 個別林木の成長曲線のパラメータ $\boldsymbol{\xi}_i$ の相関係数行列 P. ただし P の (a,b) 成分 ρ_{ab} は $\hat{\Psi}$ の (a,b) 成分 $\hat{\psi}_{ab}$ を使って以下のように書ける.

$$\rho_{ab}=\frac{\hat{\psi}_{ab}}{\sqrt{\hat{\psi}_{aa}\hat{\psi}_{bb}}},\quad (a=1,\ldots,q,\ b=1,\ldots,q).$$

   ここでは, 各林木の成長飽和密度, 内的自然増加率, 曲線の形状を決めるパラメータの対数値の相関である.

実際の成長データを使った分析結果は以下の通りである. 今回解析に使用したデータは, 福岡県八女群星野村における 23 年生の無間伐林より抽出した 30 本から得た成長データである. 試験林の形状は 図 1 に示す通りで, プロット内の林木の総数は 136 本であった. 図 1 の o は林木立木位置を示し, その大きさは観測時点での胸高直径の相対的な大きさに対応している.

— この付近に図 1 を挿入して下さい —

30 本のサンプルに対し樹幹解析 (Philip 1994, 等参照) を行い, 胸高直径, 樹高, 材積の成長データを算出し, それらに一般化非線形混合効果モデルをあてはめ, 上記の分析項目 1 ～ 4 を推定した. 得られた未知パラメータの推定値は表 2 に示す通りである.

— この付近に表 2 を挿入して下さい —

推定された相関係数行列から, ξ_{i1} と ξ_{i2}, ξ_{i3} には負, ξ_{i2} と ξ_{i3} には正の高い相関が見られることがわかる. すなわち最終的に大きく育つ林木ほど内的自然増加率は小さく, その増加率が大きくなれば曲線の形状を決めるパラメータも大きくなることがわかる.

表 2 の推定値から得られる推定曲線を図 2 ～ 7 に示す. 図 2, 3, 4 は胸高直径, 樹高, 材積のデータに関するあてはめ結果である. それぞれの図では, 実測データを左上に, 平均成長を表す推定曲線とその 0.95 同時信頼区間を右上に, ランダム効果係数を考慮に入れた推定法での全推定曲線を左下に載せている. さらに, 図 5, 6, 7 は, 胸高直径, 樹高, 材積のデータに対し, ランダム効果係数を考慮に入れた推定法での各林木の全推定曲線を示したもである.

— この付近に図 2 ～ 7 を挿入して下さい —

5. おわりに

昨今炭素吸収源としての役割など多方面からの森林資源への関心がますます高まりつつある. そうした社会からのニーズに対し効率よく対応すべく持続的あるいは循環型の森林資源管理のあり方が現在模索されている. その一方では林業を取り巻く経済環境の悪化により植林放棄や管理放棄が少しずつ目立ち始めて来ている.

現存する森林資源をどのような目的であれ管理していくには, 森林資源が持つ基

礎的な性質すなわちその成長過程を把握することは必要不可欠である．現在、多変量分析の手法の開発とともに，森林の持つ特性を把握した成長の詳細な分析が可能になってきている．今回はその一例として林分データに基づいた一般化非線形混合効果モデルによる成長分析の手法について紹介した．林分は一つのグループ化された集合体であり，その林分内の林木は林分全体が持つ成長環境ばかりでなく，個々の林木が所有する成長特性を持ち成長している．これまではそれら２つの現象を区別することなく成長分析が行われて来たが，より正確に成長現象を捉え分析及び成長予測を行うにはここで紹介した手法の適用が必要不可欠となる．今後はさらに適用事例を増やすことにより，成長モデリングにおける手法の有効性を示して行く．

引用文献

Bazaraa, M. S. and Shetty, C. M. 1979. *Nonlinear Programming, Theory and Algorithms.* John Wiley & Sons, New York.

Lindstrom, M. J. and Bates, D. M. 1990. Nonlinear mixed effects models for repeated measures data. *Biometrics*, **46**, 673–687.

Magnus, J. R. and Neudecker, H. 1999. *Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics.* Revised Ed. John Wiley and Sons, New York.

Ohtaki, M. and Izumi, S. 1999. Globally convergent algorithm without derivatives for maximizing a multivariate function. *Presented at the Symposium on "Exploratory Methods and Analysis for Nonlinear Structures of Data with Random Variation" in Hiroshima, Japan*, January 7 – 11, 1999.

Philip, M. S. (1994). *Measuring Trees and Forests.* 2nd. ed. CAB INTERNATIONAL.

Potthoff, R. F. and Roy, S. N. 1964. A generalized multivariate analysis of variance model useful especially for growth curve problems. *Biometrika*, **51**, 313–325.

Rao, C. R. 2002. *Linear Statistical Inference and Its Applications.* Paperback Ed. John Wiley and Sons, Inc.

Richards, F. J. 1958. A flexible growth function to empirical use. *J. Exp. Bot.*, **10**, 290–300.

Vonesh, E. F. and Carter, R. L. 1987. Efficient inference for random-coefficient growth curve models with unbalanced data. *Biometrics*, **43**, 617–628.

Vonesh, E. F. and Carter, R. L. 1992. Mixed-effects nonlinear regression for unbalanced repeated measures. *Biometrics*, **48**, 1–17.

柳原宏和, 吉本 敦. 2003. 一般化多変量分散分析モデルの林木直径成長分析への適用可能性. 統計数理, **51**, 19–35.

Appendix

A.1. スパイダーアルゴリズム

ここでは, Ohtaki & Izumi (1999) によって提案されたスパイダーアルゴリズムについて説明する. このアルゴリズムは Line Search 法 (Bazaraa & Shetty 1979) に類似したもので, 関数値をそのまま最適化に用いるため, ニュートン法などに見られる微分計算を用いず, 探索点を動かしていくことにより最適化を行うものである. その結果, ニュートン法より計算時間がかかるという欠点を持つが, ニュートン法を用いたときにしばしば起こる最適化の途中段階で計算が破綻するということがない. そのため, スパイダーアルゴリズムは複数回の繰り返し最適化を行うのに適したアルゴリズムと言える.

まずは単変量 x における $f(x)$ の最小化問題を考える. スパイダーアルゴリズムでは, 中心値 x と探索範囲 τ で構成される $x-\tau$, $x+\tau$ の 3 点の探索点において最小値を探す. そして, 中心値で最小値をとれば探索範囲を狭くし, 端の値で最小値をとれば中心値を最小値となる値にずらし探索範囲を広げ新しく探索点を更新し, その更新された探索点で最小値となる点を探すというプロセスを繰り返し最小値となる点を探していく. つまり,

1. もし $f(x)$ が最小であったら, $f(\cdot)$ を最小にする点は $x-\tau$ と $x+\tau$ の間にあるとみなし, 探索点の中心はそのままで探索範囲を 1/2 倍に狭くする. つまり新しい探索点を $x-\tau/2$, x, $x+\tau/2$ とする.
2. もし $f(x-\tau)$ が最小であったら, $f(\cdot)$ を最小にする点は x よりも小さい点にあるとみなし, 探索点の中心を小さい方にずらし探索範囲を 2 倍に広げる. つまり新しい探索点を $x-3\tau$, $x-\tau$, $x+\tau$ とする.
3. もし $f(x+\tau)$ が最小であったら, $f(\cdot)$ を最小にする点は x よりも大きい点にあるとみなし, 探索点の中心を大きい方にずらし探索範囲を 2 倍に広げる. つまり新しい探索点は $x-\tau$, $x+\tau$, $x+3\tau$ とする.

新しい探索値で最小値をとる値を探し, そこで探索値を更新する. このプロセスを収束するまで繰り返すことにより最終的な $f(\cdot)$ を最小にする値を得ることができるわけである. このアルゴリズムを数式表記すると, 以下の様になる.

<u>単変量スパイダーアルゴリズム (SPIDER 1 : Ohtaki & Izumi 1999)</u>

Step 1 : τ_i を探索範囲とし, 初期値 x_0 をあらかじめ決めておく.

Step 2 : $\tau_0 = x_0$ とし $f_0 = \min\{\, f(x) \mid x = x_0 - \tau_0, x_0, x_0 + \tau_0\}$ を計算する. このとき τ_1 と x_1 を以下の手順に従って更新する.

(*i*) $f_0 = f(x_0)$ であれば $\tau_1 = \tau_0/2$, $x_1 = x_0$;

(*ii*) $f_0 = f(x_0 - \tau_0)$ であれば $\tau_1 = 2\tau_0$, $x_1 = x_0 - \tau_0$;

(*iii*) $f_0 = f(x_0 + \tau_0)$ であれば $\tau_1 = 2\tau_0$, $x_1 = x_0 + \tau_0$.

Step 3 : τ_i と x_i を i 回の繰り返しで得られる探索範囲と最小値をとる値とし, $f_i = \min\{\ f(x) \mid x = x_i - \tau_i, x_i, x_i + \tau_i\}$ とする. このとき τ_{i+1} と x_{i+1} を以下の手順に従って更新する.

(*i*) $f_i = f(x_i)$ であれば $\tau_{i+1} = \tau_i/2$, $x_{i+1} = x_i$;

(*ii*) $f_i = f(xi - \tau_i)$ であれば, $\tau_{i+1} = 2\tau_i$, $x_{i+1} = x_i - \tau_i$;

(*iii*) $f_i = f(x_i + \tau_i)$ であれば $\tau_{i+1} = 2\tau_i$, $x_{i+1} = x_i + \tau_i$.

Step 4 : 不等式 $|(f_{i+1} - f_i)/f_i| < d$ を満たすまで Step 3 を繰り返し, 満たした場合は x_{i+1} を $f(\cdot)$ を最小にする x とする. ただし d は収束を保証する任意の値である.

次に, この単変量のスパイダーアルゴリズムを多変量に拡張する. Ohtaki & Izumi (1999) では SPIDER 1 を繰り返し用いることで最適化を行う多変量版のスパーダーアルゴリズム, SPIDER 2 を提案しているが, 以下では, 格子点を探索点に使用した q 変量スパイダーアルゴリズムを提案する. 今, -1, 0, 1 のいずれかの値をとるような成分をもつ全ての $q \times 1$ ベクトル $\boldsymbol{j}_l = (j_{l1}, \ldots, j_{lq})'$ を考える. このときすべての成分の組み合わせは 3^q 個あるので $l = 1, \ldots, 3^q$ である. なお, このベクトルは原点を中心とした格子点の組み合わせになっている. 例えば, $q = 2$ のときは,

$$\begin{array}{lll} \boldsymbol{j}_1 = (\ -1\ \ -1\ )', & \boldsymbol{j}_2 = (\ -1\ \ 0\ )', & \boldsymbol{j}_3 = (\ -1\ \ 1\ )', \\ \boldsymbol{j}_4 = (\ 0\ \ -1\ )', & \boldsymbol{j}_5 = (\ 0\ \ 0\ )', & \boldsymbol{j}_6 = (\ 0\ \ 1\ )', \\ \boldsymbol{j}_7 = (\ 1\ \ -1\ )', & \boldsymbol{j}_8 = (\ 1\ \ 0\ )', & \boldsymbol{j}_9 = (\ 1\ \ 1\ )', \end{array}$$

である. このベクトルの組を用いて, SPIDER 1 を原点を中心点とし探索点を格子点に拡張する. ただし, 最小値をとる値が中心点である場合のみ, 探索範囲を狭くすることとする. また探索範囲を広げる場合は, 最小値をとる値があった方向に広げる. 図 A.1 に探索範囲の更新状況をイメージ図を示す.

— この付近に図 A.1 を挿入して下さい —

このような更新アルゴリズムを数式表記すると以下の様になる.

<u>q 変量スパイダーアルゴリズム</u>

Step 1 : $\boldsymbol{\tau}_i = (\tau_{i1}, \ldots, \tau_{iq})'$ を $q \times 1$ 探索範囲ベクトルとし, 初期値 $\boldsymbol{x}_0 = (x_{01}, \ldots, x_{0q})'$ をあらかじめ決めておく.

Step 2 : $D_l = \mathrm{diag}(\boldsymbol{j}_l')$ とし, $f_0 = \min\{\ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + D_l\boldsymbol{\tau}_0,\ (l = 1, \ldots, 3^q)\}$ を計算する. このとき $\boldsymbol{\tau}_1$ と $\boldsymbol{x}_1$ を以下の手順に従って更新する.

(*i*) $f_0 = f(\boldsymbol{x}_0)$ であれば $\boldsymbol{\tau}_1 = \boldsymbol{\tau}_0/2$, $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0$;

(*ii*) $f_0 \neq f(\boldsymbol{x}_0)$ であれば, f_0 となる値を $\boldsymbol{x}_0 + D_{l_0}\boldsymbol{\tau}_0$ とすると

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \boldsymbol{\tau}_0 + D_{l_0}^2\boldsymbol{\tau}_0, \quad \boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + D_{l_0}\boldsymbol{\tau}_0.$$

Step 3 : $\boldsymbol{\tau}_i$ と $\boldsymbol{x}_i$ を i 回の繰り返しで得られる探索範囲と最小値をとるベクトルとし, $f_i = \min\{\ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_i + D_l\boldsymbol{\tau}_i,\ (l = 1, \ldots, 3^q)\}$ とする. このとき $\boldsymbol{\tau}_{i+1}$ と $\boldsymbol{x}_{i+1}$ を以下の手順に従って更新する.

(*i*) $f_i = f(\boldsymbol{x}_i)$ であれば $\boldsymbol{\tau}_{i+1} = \boldsymbol{\tau}_i/2$, $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i$;

(*ii*) $f_i \neq f(\boldsymbol{x}_i)$ であれば f_i をとる値を $\boldsymbol{x}_i + D_{l_i}\boldsymbol{\tau}_i$ とすると

$$\boldsymbol{\tau}_{i+1} = \boldsymbol{\tau}_i + D_{l_i}^2\boldsymbol{\tau}_i, \quad \boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + D_{l_i}\boldsymbol{\tau}_i.$$

Step 4 : 不等式 $|(f_{i+1} - f_i)/f_i| < d$ を満たすまで Step 3 を繰り返し, 満たした場合は $\boldsymbol{x}_{i+1}$ を $f(\cdot)$ を最小にする $\boldsymbol{x}$ とする. ただし d は収束を保証する任意の値である.

A.2. 平均成長曲線の信頼区間の導出

ここでは 3 章での定理を詳説する. Vonesh & Carter (1992) により, 妥当な条件のもとで得られる $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は以下のような漸近特性を持つことが知られている.

真のモデルのパラメータを $\boldsymbol{\theta}_*$ とし, また $\hat{\Psi}, \hat{\sigma}^2$ は $\Psi_* = \lim_{n\to\infty}\hat{\Psi}$, $\sigma_*^2 = \lim_{n\to\infty}\hat{\sigma}^2$, のような値に収束するとすると,

(i) $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は $\boldsymbol{\theta}_*$ の強一致推定量である.

(ii) $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は以下のような漸近正規性を持つ.

$$\sqrt{n}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta}_*\right) \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathrm{N}_q(\mathbf{0}, \Omega(\boldsymbol{\gamma}_*)),\ (n \to \infty).$$

ただし, $\boldsymbol{\gamma}_* = (\boldsymbol{\theta}_*', \mathrm{vech}(\Psi_*)', \sigma_*^2)'$ であり,

$$\Omega(\boldsymbol{\gamma}_*) = \lim_{n\to\infty}\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta}_*)'\Sigma(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\gamma}_*)^{-1} Z(\boldsymbol{t}_i, \boldsymbol{\theta}_*)\right\}^{-1}.$$

今, テーラー展開により

$$\sqrt{n}\left\{f(t_j, \hat{\boldsymbol{\theta}}) - f(t_j, \boldsymbol{\theta}_*)\right\} = \boldsymbol{z}(t_j, \hat{\boldsymbol{\theta}})'\boldsymbol{u} + \mathrm{O}_p(n^{-1/2}),$$

であることがわかる. ただし $\boldsymbol{u} = \sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)$ である. 以下

(9)
$$\sqrt{n}\left\{f(t_j, \hat{\boldsymbol{\theta}}) - f(t_j, \boldsymbol{\theta}_*)\right\} \approx \boldsymbol{z}(t_j, \hat{\boldsymbol{\theta}})'\boldsymbol{u},$$

として考える. 行列の 2 次形式の特性から任意の正則行列 A, ベクトル $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{x}$ に関して

$$\frac{(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{d})^2}{\boldsymbol{x}'A\boldsymbol{x}} \leq \boldsymbol{d}'A^{-1}\boldsymbol{d},$$

のような不等式が成り立つ (Rao 2002, p 60, 等を参照). この不等式を利用すると, すべての t に関して不等式

(10)
$$\frac{\{\boldsymbol{z}(t, \hat{\boldsymbol{\theta}})'\boldsymbol{u}\}^2}{\boldsymbol{z}(t, \hat{\boldsymbol{\theta}})'\hat{\Omega}(\hat{\gamma})\boldsymbol{z}(t, \hat{\boldsymbol{\theta}})} \leq \boldsymbol{u}'\hat{\Omega}(\hat{\gamma})^{-1}\boldsymbol{u},$$

が成り立つ. ここで,

$$\boldsymbol{u} \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathrm{N}_q(\mathbf{0}, \Omega(\boldsymbol{\gamma}_*)), \quad \hat{\Omega}(\hat{\gamma}) \to \Omega(\boldsymbol{\gamma}_*), \quad (n \to \infty)$$

であることに注意すれば, (10) の右辺は漸近的に自由度 q の χ^2 分布に収束することがわかる. これらを用いると,

$$\mathrm{P}\left(\frac{n\left\{f(t, \hat{\boldsymbol{\theta}}) - f(t, \boldsymbol{\theta}_*)\right\}^2}{\boldsymbol{z}(t, \hat{\boldsymbol{\theta}})'\hat{\Omega}(\hat{\gamma})\boldsymbol{z}(t, \hat{\boldsymbol{\theta}})} \leq \chi^2_{q,\alpha} : \text{すべての } t\right) \geq 1 - \alpha,$$

が漸近的に成り立つ．ここで，

$$r_j = \frac{n\left\{f(t_j,\hat{\theta}) - f(t_j,\theta_*)\right\}^2}{z(t_j,\hat{\theta})'\hat{\Omega}(\hat{\gamma})z(t_j,\hat{\theta})}, \quad r_{\max} = \max_{j=1,\dots,m} r_j,$$

とおくと，r_j の同時確率は

$$\mathrm{P}(r_1 \le x, \dots, r_m \le x) = \mathrm{P}\left(r_{\max} \le x\right),$$

であるので，

$$\mathrm{P}(r_1 \le \chi^2_{q,\alpha}, \dots, r_m \le \chi^2_{q,\alpha}) = \mathrm{P}\left(r_{\max} \le \chi^2_{q,\alpha}\right) \ge 1-\alpha.$$

が漸近的に成り立つ．区間 $r_j \le \chi^2_{q,\alpha}$ と $c_j^{(low)} \le f(t_j,\theta_*) \le c_j^{(up)}$ は同値であるので，

$$\mathrm{P}(\boldsymbol{c}_{low} \le \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{t},\boldsymbol{\theta}_*) \le \boldsymbol{c}_{up}) \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathrm{P}\left(r_1 \le \chi^2_{q,\alpha}, \dots, r_m \le \chi^2_{q,\alpha}\right) \ge 1-\alpha,$$

である．よって (7) は漸近的に $1-\alpha$ になる同時信頼区間になることがわかる．

表 1: 幹材積成長データの例

No. 7

林齢 ($year$)	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
幹材積 (m^3)	0.0001	0.0004	0.0017	0.0050	0.0109	0.0193	0.0290	0.0379	0.0477	0.0543	0.0625
林齢 ($year$)	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
幹材積 (m^3)	0.0731	0.0855	0.0935	0.1023	0.1139	0.1264	0.1395	0.1527	0.1654	0.1779	0.1906

No. 14

林齢 ($year$)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
幹材積 (m^3)	0.0001	0.0001	0.0002	0.0010	0.0030	0.0067	0.0121	0.0191	0.0258	0.0336	0.0395	0.0475
林齢 ($year$)	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	
幹材積 (m^3)	0.0563	0.0663	0.0729	0.0798	0.0889	0.0973	0.1057	0.1139	0.1219	0.1310	0.1393	

表 2: 未知パラメータの推定値

	$\hat{\theta}$	$(e^{\hat{\theta}})$	$\hat{\sigma}^2$	$\hat{\Psi}$			(相関行列 P)		
胸高直径	3.235	25.396	0.209	0.043	−0.066	−0.068	1.000	−0.999	−0.984
	−2.318	0.099		−0.066	0.104	0.099	−0.999	1.000	0.976
	0.977	2.657		−0.068	0.099	0.143	−0.984	0.976	1.000
樹高	3.167	23.728	0.087	0.018	−0.023	−0.015	1.000	−0.999	−0.990
	−2.734	0.065		−0.023	0.050	0.039	−0.999	1.000	0.995
	0.594	1.811		−0.015	0.039	0.037	−0.990	0.995	1.000
材積	−0.797	0.451	2.654×10^{-6}	0.826	−0.306	−0.041	1.000	−0.998	−0.932
	−2.764	0.063		−0.306	0.158	0.081	−0.998	1.000	0.956
	1.377	3.963		−0.041	0.081	0.104	−0.932	0.956	1.000

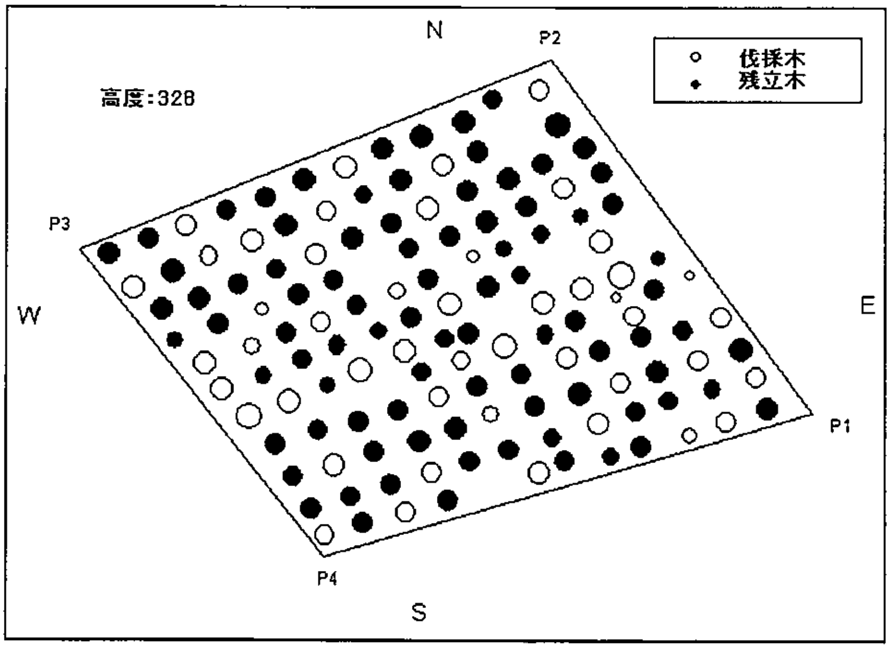

図 1: 試験林内の立木位置

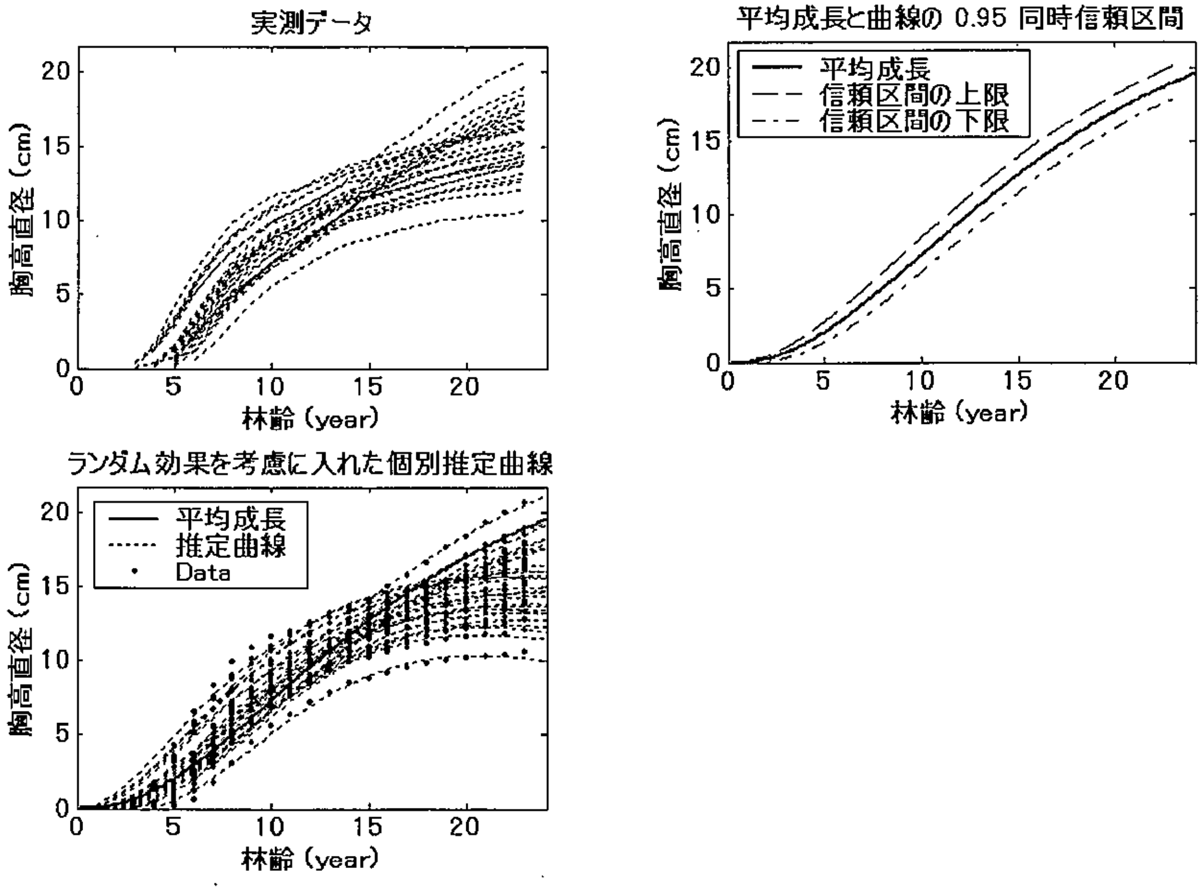

図 2: 胸高直径に関するあてはめ結果

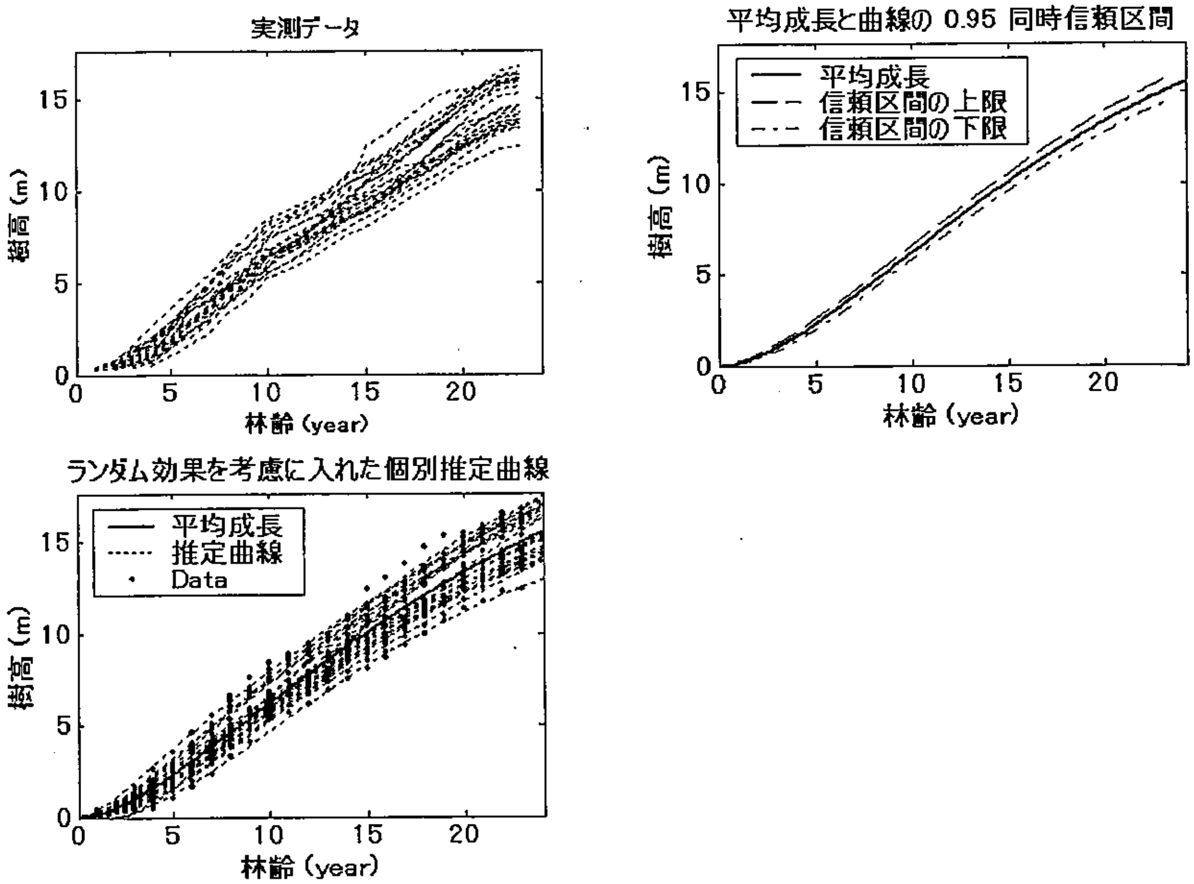

図 3: 樹高に関するあてはめ結果

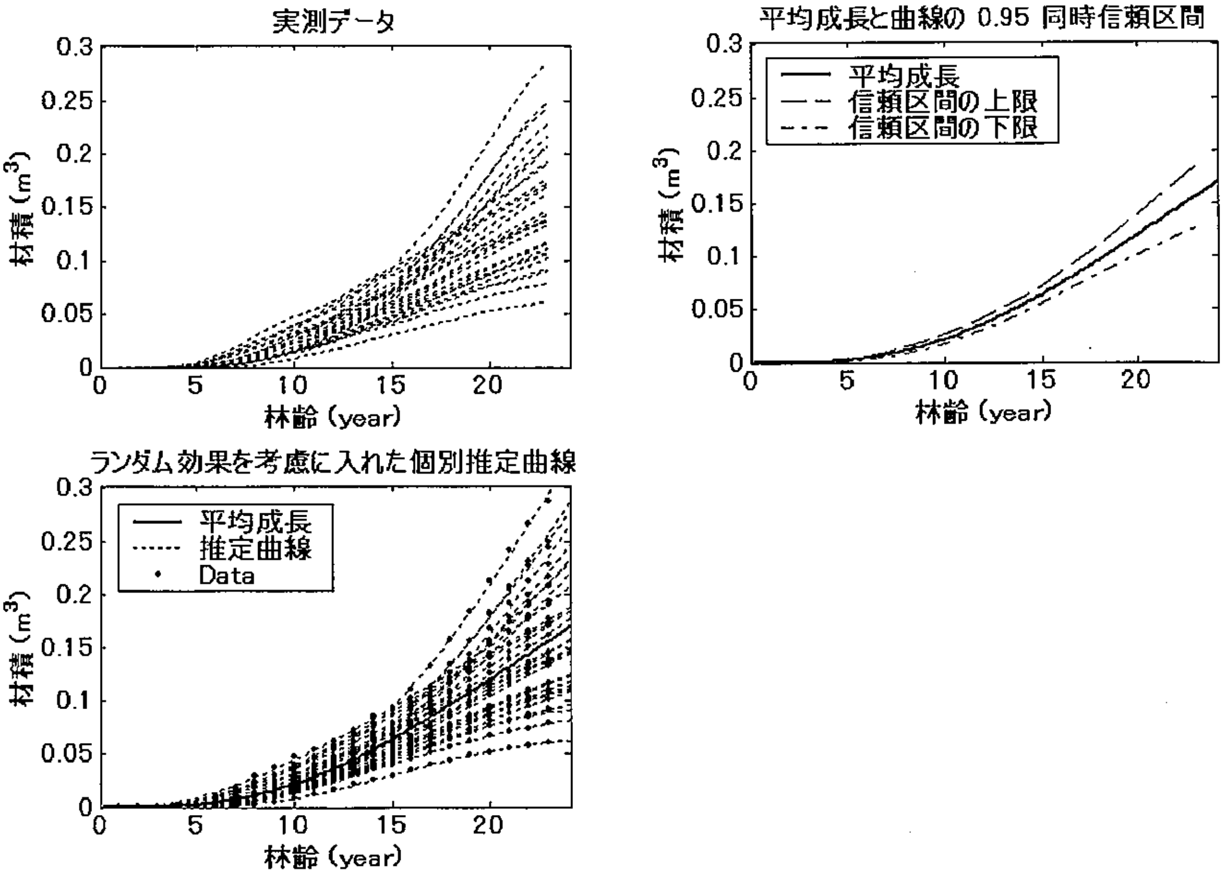

図 4: 材積に関するあてはめ結果

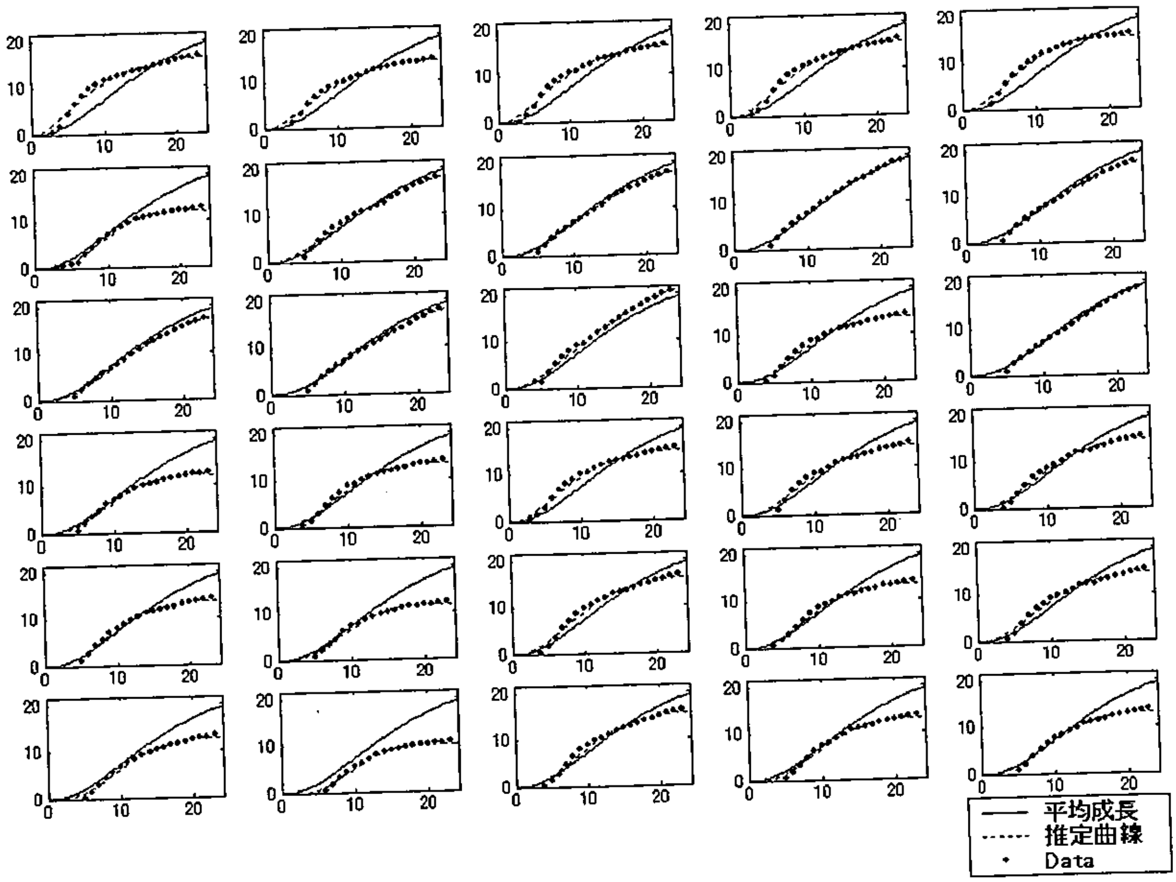

図 5: ランダム効果係数を考慮に入れた胸高直径に関する各林木の推定曲線

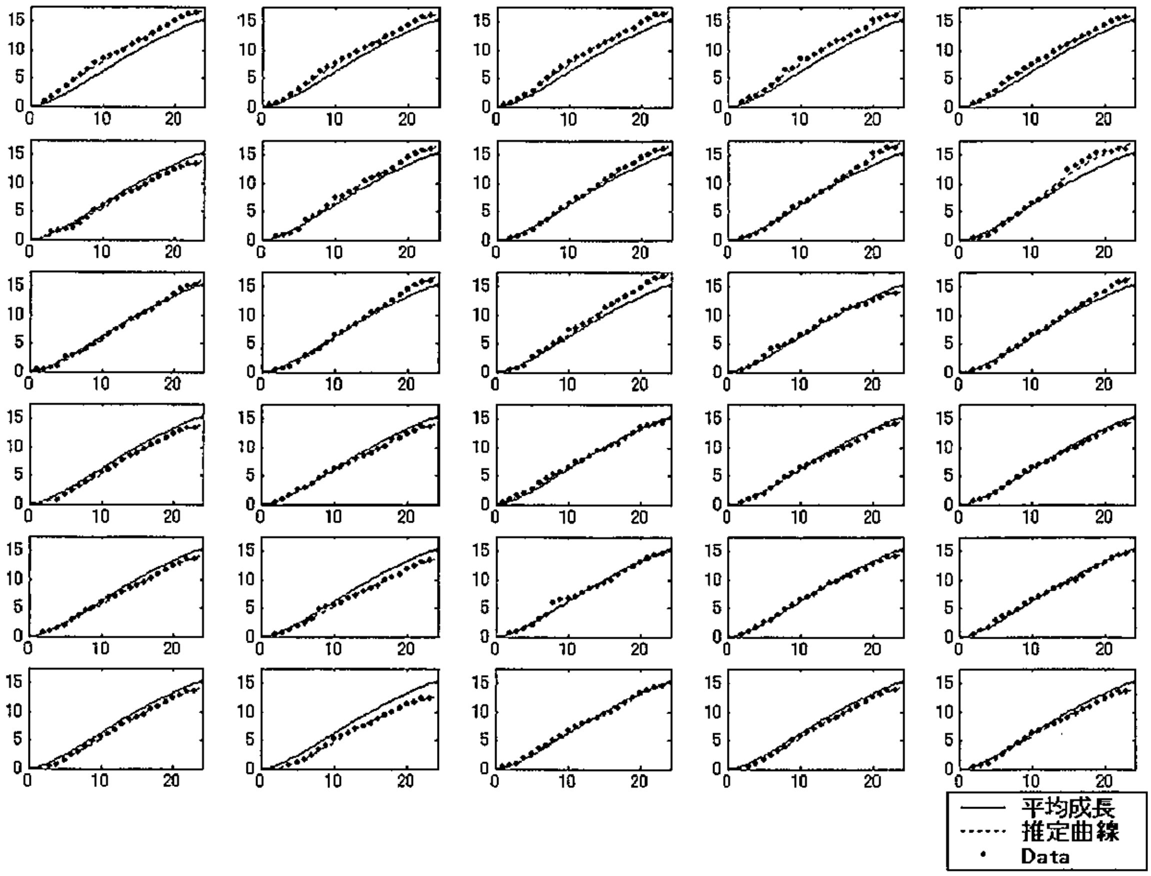

図 6: ランダム効果係数を考慮に入れた樹高に関する各林木の推定曲線

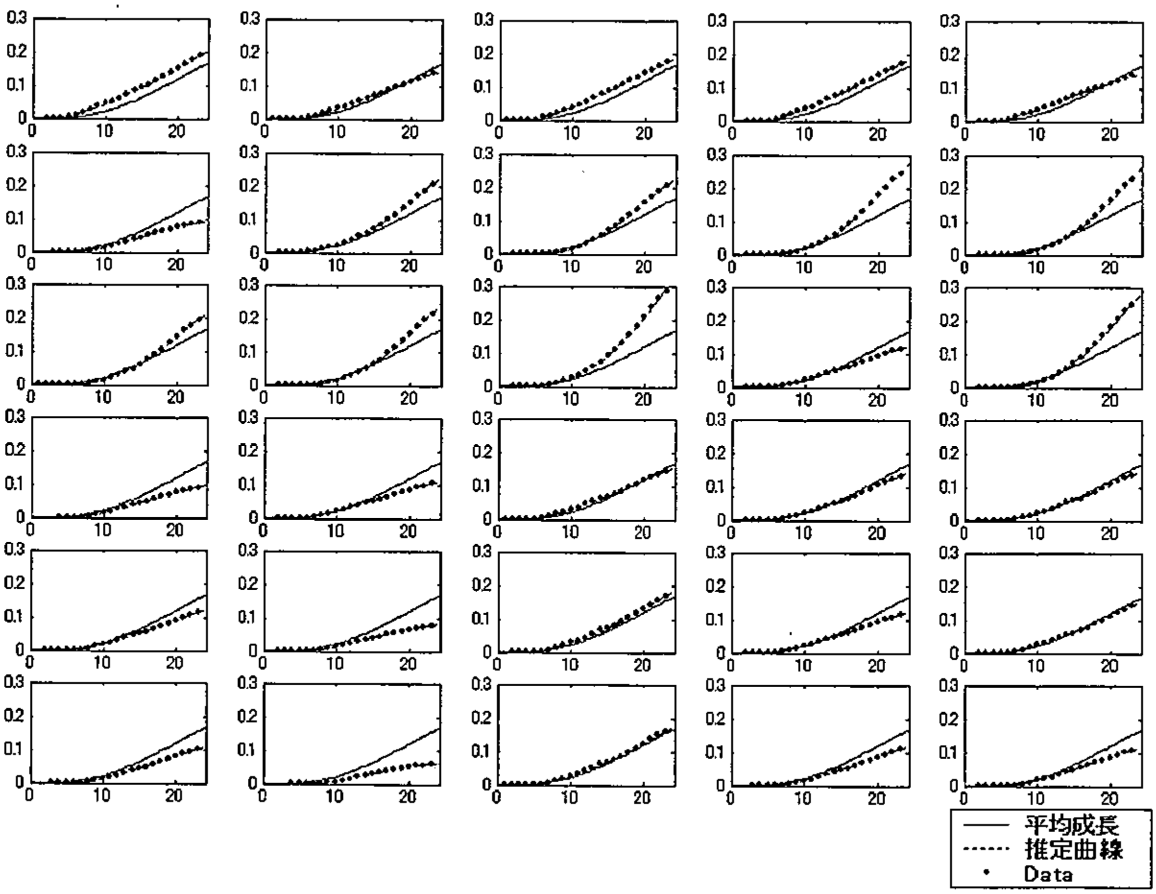

図 7: ランダム効果係数を考慮に入れた材積に関する各林木の推定曲線

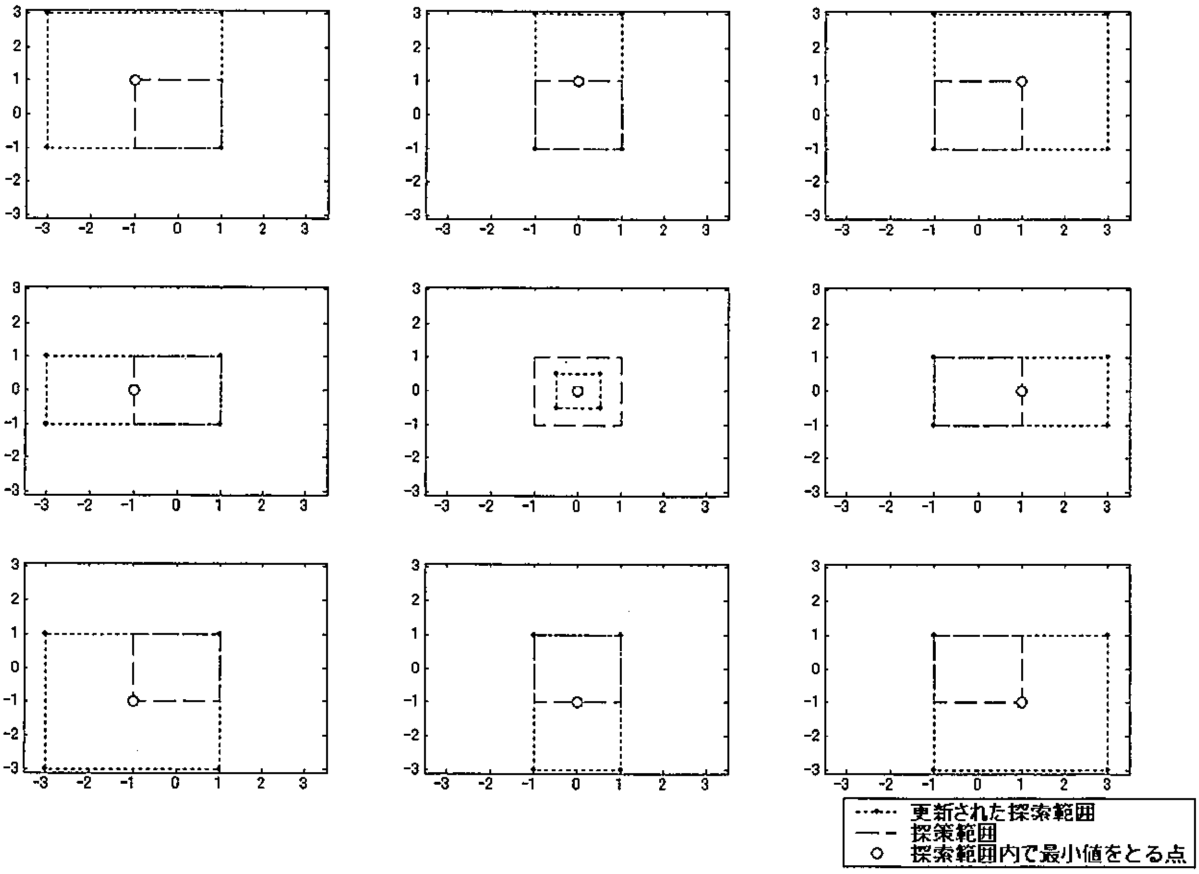

図 A.1: 2 変量スパーダーアルゴリズムにおける探索範囲の更新イメージ図