

Polynomial Histogram による 多次元ノンパラメトリック確率密度推定

寒河江 雅彦*, 野呂 拓矢†, デビッド・スコット‡

Multivariate Polynomial Histogram Density Estimation

Masahiko Sagae*, Takuya Noro† and David W. Scott‡

統計処理の対象となるデータは近年, 大規模化, 多次元化の方向へ急激に増大しつつある. ノンパラメトリック密度推定の研究は, カーネル密度推定の理論が整備され, 実用的な面では主要な統計ソフトウェアに標準装備され, 容易に利用できる. しかし大規模データと多次元データに対応したノンパラメトリック統計解析の研究は進んでいない. この原因は, 多次元カーネル関数の構成法が未開発であることと, カーネル推定では大規模データの計算負荷を大幅に改善する方法は今のところなく, 計算機のハード及びソフトのパワーに多くを依存していることによると考えられる. そこで我々は, 大規模データへの計算負荷を軽減する方法として, ビン型推定に着目する. 多次元データの推定精度の問題はあまり議論されていないが, 多次元密度推定において次元が増加するにつれて推定精度は低下する. したがって, カーネル推定でこれを改善するには次元かつ高次オーダー特性 (収束率) をもつカーネル関数の利用が必要となるが, この種のカーネル関数は現在のところ知られていない. ヒストグラムに代表されるビン型推定の計算負荷は相対的に少ないが, 推定精度の低下を伴うことがよく知られている. 近年, 推定精度を保つビン型推定として Polynomial Histogram (Sagae and Scott (1997)) が提案され, 計算負荷を軽減しつつ, カーネル推定と同等な推定精度を持つことが示された. 本稿では多次元データへこの方法を拡張し, 多次元 Polynomial ヒストグラムを提案する. この密度関数は高次オーダー特性を持ちつつ, 大規模データに対する計算負荷の低減が可能であることを示す. また, 数値例でその有効性を示す.

This paper extends polynomial histogram Sagae and Scott (1997) to multi-dimensional case. There are a number of recent studies about the multi-dimensional kernel density estimation. However, the multi-dimensional kernel density estimation with higher-order asymptotic performance is undeveloped as far as I know and also studies of the multi-dimensional density function have been stagnant on grouping data. We propose a multi-dimensional polynomial histogram and prove higher-order asymptotic property. Numerical experiments confirm the effectiveness.

キーワード: ヒストグラム, 多次元ノンパラメトリック, 密度関数, 高次オーダー特性

* 金沢大学人間社会研究域経済学経営学系 〒 920-1192 石川県金沢市角間町.

† 株式会社 東芝 セミコンダクター社 四日市工場.

‡ ライス大学統計学科.

1. はじめに

1.1 データの大規模化と多次元化

近年，統計処理の対象となるデータは大規模化，多次元化の方向へ急速に進みつつある．計算機の進展及び効率的な統計計算技法が開発されているが，それにも増してデータの大規模化及びそれに伴う詳細な情報の収集はデータの高次元化をもたらし，ノンパラメトリックな推定法においても大規模データへの計算負荷の問題と高次元に対応した方法が必要となってきた．

ノンパラメトリック確率密度推定の研究は，カーネル型密度推定が理論的に整備され，実用的な面では主な統計ソフトウェアに標準装備され，利用しやすい環境にある．その一方でデータの大規模化と多次元化に対するノンパラメトリック密度推定の研究ではこの2つの大きな潮流に対応するモデル開発は必ずしも進んでいない．この原因を具体的に述べると，通常のカーネル法は，全てのデータ点に対してカーネル関数を利用するため大規模データセットでの計算負荷は極めて重いのが現状であり，計算負荷を根本的に減らすことが難しい．また，多次元データを扱うために多次元カーネル関数の構成が必要となるが，1次元のカーネルの積で定義された積型カーネル（実際には積型正規カーネル）か，単純化した多次元正規カーネル或いは，多次元 Epanechnikov カーネルが利用されている．大規模データに対する計算負荷の問題を軽減する方法として，ビン型推定，特にヒストグラム推定がよく知られているが，カーネル推定に比べて推定精度が劣ることからあまり魅力的な研究対象とは考えられていない．

1.2 多次元カーネル密度関数の推定精度

多次元カーネル密度推定における漸近的な性質を調べると，分散は次元（以降， d 次元とする）に依存して大きくなる．バイアスは次元 d に依存しないが，カーネル関数の高次オーダー特性に依存する．したがって，積分平均2乗誤差基準（MISE と略す）で見ると，多次元データの密度推定を行ったとき推定精度が低下するという重要な問題点があるにもかかわらず，あまり認識されていない．実際問題としては1次元でうまく推定できても多次元で同様な方法を用いた場合，推定精度が保障されないことである．これを理論的に改善するには，バイアスが次元 d に依存しないことからバイアスを改良できれば，MISE を改善できる．バイアスの改良はカーネル関数に高次オーダー特性を持たせることで改良できる．つまり高次元の推定では，推定精度を保つために高次オーダーカーネル関数の利用或いは高次オーダー特性を持つ新しい推定法の開発が必要である．分散を改良した場合には漸近的な効率は変わらないため，バイアス項を改良するほうがより重要となる．1次元の高次オーダーカーネルの構成法は例えば，Jones and Foster (1993) で対応できるが，多次元カーネルにおいて高次オーダー特性をもつカーネル関数の構成法は現在のところ未開発

である。現状では積型カーネル或いは多次元正規カーネルを利用しているのがほとんどである。しかしながら、積型カーネル及び多次元正規カーネルはいわゆる2次オーダーの性質を持ったカーネル関数であり、高次元データの推定では推定精度がかなり低下する。上記のように2次オーダーカーネルしか利用可能な多次元カーネル関数は今のところ知られていない。この理由は例えば、 d 次元正規カーネルにしてもカーネル関数のパラメータは $d(d+1)/2$ のパラメータの設定が必要であるが、これを用いても2次オーダーの漸近特性しか得られない。1次元の高次カーネル構成法を単純に拡張できない。また、多次元では変数間の依存関係が発生し、カーネルの構成が極めて複雑になるからである。それに加えて、バンド幅パラメータの数が次元と共に増加することからバンド幅選択問題の計算負荷も追加的に膨大となる。

例えば、共通なバンド幅パラメータ h をもった2次オーダーの d 次元カーネル密度推定を定義すると

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n K_H(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (1.1)$$

ここで $\mathbf{x} : d \times 1$, $\mathbf{H} : d \times d$, h : バンド幅パラメータ, $K_H(\mathbf{x}) = |\mathbf{H}|^{-\frac{1}{2}} K(\mathbf{H}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{x})$: d 次元2次オーダーカーネル関数とする。この $\hat{f}(\mathbf{x})$ の積分2乗バイアス (ISB) は $O(h^4)$ となり、積分分散 (IV) は $O((nh^d)^{-1})$ となる。そこで最適な MISE は

$$\text{MISE}^* = O\left(n^{-\frac{4}{d+4}}\right), \quad (1.2)$$

となる。次元の変化と MISE の変化を見ると、1次元では $O(n^{-\frac{4}{5}})$, 2次元では $O(n^{-\frac{2}{3}})$ で、1次元ヒストグラムと同等な精度に低下し、4次元では $O(n^{-\frac{1}{2}})$ となる。そこで、2次元の場合、3次オーダーカーネルを用いると、MISE は $O(n^{-\frac{3}{4}})$ となり、4次オーダーカーネルでは MISE は $O(n^{-\frac{4}{5}})$ で、1次元2次オーダーカーネルと同等な推定精度が得られる。例えば、Wand and Jones (1995) に詳しい。

カーネル推定で推定精度を改善するには高次オーダー特性をもつカーネル関数の利用が必要となるが、この種の多次元カーネル関数は残念ながら知られていない。近年、1次元の問題に対して、ビン型推定にもかかわらず、推定精度が低下しない Polynomial Histogram (Sagae and Scott (1997)) が提案され、計算負荷を軽減しつつ、同時にカーネル推定と同等な推定精度を持つことが示された。本稿では多次元データへ Polynomial Histogram を拡張し、その推定精度を理論的に導く。この結果、多次元 Polynomial Histogram は高次オーダー特性を持ちつつ、大規模データに対する計算負荷の低減が可能であることを示す。

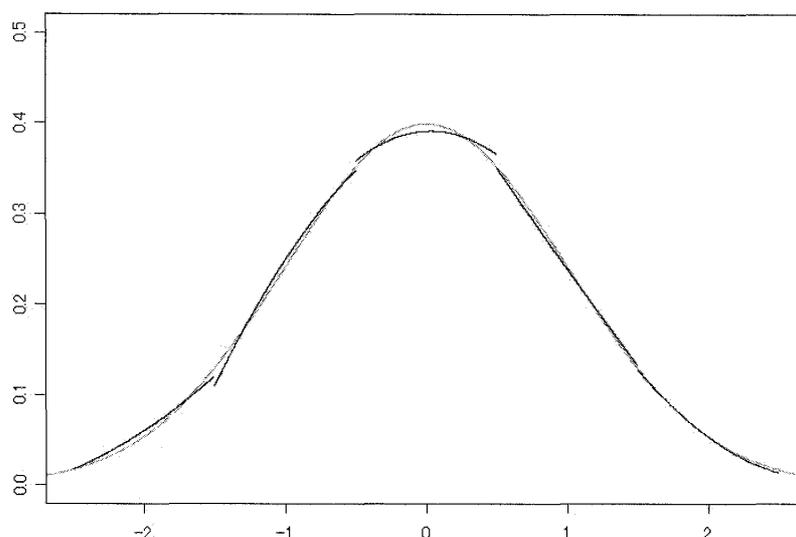


図1 1次元 Polynomial Histogram 推定

2. Polynomial Histogram

Polynomial Histogram(以下, PH と略す) 推定法は, ヒストグラムを拡張した推定法である (Sagae and Scott (1997)). ヒストグラム推定法が度数を用いて区分定数関数(0次関数)を推定するのに対し, PH 推定法では高次の局所モーメント情報を用いて, ビン毎に区分的多項式を用いて推定している. これにより PH 推定法は, ヒストグラム推定法における推定精度の低下を改善している. MISE 基準による推定精度は, 局所モーメント情報の次数が上がるにつれて向上する. PH 推定法の大規模データに対する長所は, 全データをいくつかのビンに分割しているため, データ数が膨大な場合であっても計算負荷が軽減され, かつ高次の局所モーメント情報を付加しているため, 推定精度も良い点である.

図1は, 標準正規分布に従うデータを5分割し, ビン毎に2次PHで推定した例である. 実線が推定結果, 点線が真の密度関数を示す.

1次元 p 次 Polynomial Histogram は, i 番目のビンを $B_i (= [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}])$, h : 分割幅) とすると, 次式で定義される,

$$\hat{f}_{B_i}(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_p x^p, \quad x \in B_i \quad (2.1)$$

このとき, p は局所モーメント情報の最高次数, x は変数, $\alpha_0, \dots, \alpha_p$ はパラメータを表わす. 上式にデータから得られる k 次局所標本モーメント情報を用いて制約式を与える:

$$\int_{B_i} x^k \hat{f}_i(x) dx = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n x_m^k I\{x_m \in B_i\} = \hat{\mu}_k, \quad k = 0, 1, \dots, p \quad (2.2)$$

(2.2)のモーメント制約のもとで(2.1)を解くと, $\hat{\alpha}_0, \dots, \hat{\alpha}_p$ が得られる. 同様に各ビン毎

に B_i , $i = 1, \dots, m$ についても, 中心化したデータについて, (2.1), (2.2) を用いることで, $\hat{f}_1(x), \dots, \hat{f}_m(x)$ が得られる. この PH 推定の性質を Sagae and Scott (1997) から引用すると, 積分 2 乗バイアス (ISB) $= O(h^{2(p+1)})$ と 積分分散 (IV) $= \frac{p+1}{nh}$ から, 最適なビン幅は $h^* = O(n^{-\frac{1}{2p+3}})$ となり, 最適な MISE* $= O(n^{-\frac{2p+2}{2p+3}})$ を得る. このことから, 標本モーメントの次数 p を上げれば, 高次オーダーの推定精度を持つ密度関数を得られることがわかる.

3. 多次元 Polynomial Histogram

多次元データ解析へ対応するモデルの開発が多くの統計手法で進展している. 大規模データへの対応と計算負荷を軽減する方法として多次元 Polynomial Histogram を提案する. 我々は, Polynomial Histogram を一般次元 (以降, d 次元) へ拡張し, その理論的性質を示し, 4 章では数値例を示す. 2次元の PH については, 寒河江ほか (2006) がある.

3.1 記法と定義

本章の説明で必要となる記法を導入し, d 次元 Polynomial Histogram を定義する. 確率変数 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T$, 原点を $\mathbf{0} : d \times 1$, D 番目のビン B_D を $[-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]^d \equiv [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}] \times \dots \times [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]$ とし, B_D で示す. ビン B_D に入るデータ数を n_D , 全データ数を n とする. B_D はインデックス D 番目の d 次元超立方体とし, ビン B_D におけるインデックス D は 1次元の場合 $D = \{i, i = 1, \dots, m\}$ で B_i を表わす. 2次元の場合 $D = \{(i, j), i, j = 1, \dots, m\}$ で B_{ij} を表わす. d 次元の場合 $D = \{j_1, j_2, \dots, j_d\}$ と表わし, d 次元超立方体上のインデックスを表わしている. 一般に B_i を i 番目のビンとした時, B_i は $[-\frac{h}{2} + t_1^i, \frac{h}{2} + t_1^i] \times \dots \times [-\frac{h}{2} + t_d^i, \frac{h}{2} + t_d^i]$ で与えられ, $\mathbf{t}^i = (t_1^i, \dots, t_d^i)$ は B_i の中点である. 以降, ビン B_i での局所モーメントを計算する場合, $\mathbf{x} - \mathbf{t}^i (\mathbf{x} \in B_i)$ として, データを対応するビンの中点を原点とするようにシフトしてから中心化モーメントを計算することに注意する. ビン B_D における局所モーメントを 0 次モーメント (1×1):

$$\mu_0 = \int_{B_D} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{B_D} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.1)$$

1 次モーメント ($d \times 1$):

$$\boldsymbol{\mu}_1 = (\mu_{11}, \mu_{12}, \dots, \mu_{1d})^T = \int_{B_D} \mathbf{x} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.2)$$

2 次モーメント ($d \times d$):

$$\boldsymbol{\mu}_2 = \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.3)$$

と定義する.

また, (3.1)–(3.3) に対応する局所標本モーメントを 0 次モーメント (1×1):

$$S_0 = \frac{1}{n_D} \sum_{i=1}^n I(\mathbf{x}_i \in B_D) = 1, \quad (3.4)$$

1 次モーメント ($d \times 1$):

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{n_D} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i I(\mathbf{x}_i \in B_D), \quad (3.5)$$

同様に 2 次モーメント ($d \times d$):

$$\mathbf{S}_2 = \frac{1}{n_D} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T I(\mathbf{x}_i \in B_D), \quad (3.6)$$

で定義する.

多次元の偏微分に関する簡潔な表記を以降で用いる. 1 階偏微分を

$$\nabla f(\mathbf{x}) \equiv \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right)^T, \quad (3.7)$$

とし, 2 階偏微分を次に与える,

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) \equiv \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{i,j=1,\dots,d} = [f_{ij}]_{i,j=1,\dots,d}. \quad (3.8)$$

3 階偏微分は要素の表現のみを用いて,

$$\frac{\partial^3 f(\mathbf{x})}{(\partial \mathbf{x})^3} = \left[\frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \right]_{i,j,k=1,\dots,d} = [f_{ijk}]_{i,j,k=1,\dots,d}, \quad (3.9)$$

とする.

$f_{B_D}(\mathbf{x})$ の原点でのマクローリン展開は

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{0}) + \mathbf{x}^T \nabla f(\mathbf{0}) + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H}(\mathbf{0}) \mathbf{x} + \frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk}(\mathbf{0}) + \dots, \quad (3.10)$$

と表わせる.

3.2 d 次元 1 次 Polynomial Histogram

3.2.1 定義

d 次元 1 次 Polynomial Histogram は

$$\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}_1^T \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in B_D \quad (3.11)$$

で定義される. ここで $\alpha_0, \boldsymbol{\alpha}_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)^T$ はパラメータ, 変数 \mathbf{x} は ($d \times 1$) である. ビン B_D 上のモーメント制約式, 局所 0 次モーメント $S_0 = 1$, 局所 1 次モーメント \mathbf{S}_1 を与

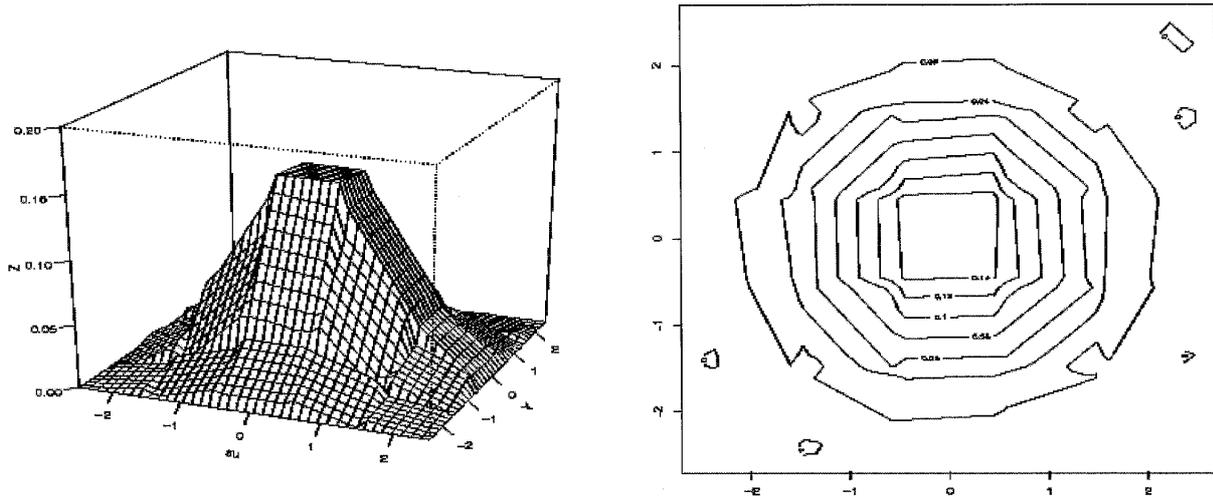


図2 2次元標準正規乱数 ($n = 40000$) に基づく 2次元 1次 PH 密度推定 (5×5 分割)

えたもとで推定方程式：

$$\int_{B_D} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = S_0 \frac{n_D}{n}, \quad (3.12)$$

$$\int_{B_D} \mathbf{x} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{S}_1 \frac{n_D}{n}, \quad (3.13)$$

を満たす α_0, α_1 を求める. この局所的な推定方程式を解くことから局所モーメント法 (Sagae and Scott (1997)) と呼ばれている. この手順ですべてのビンに対して $\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ を求めることで, 推定は完了する. 図2は2次元標準正規分布に従うデータ ($n = 40000$) を発生し, $[-3, 3] \times [-3, 3]$ の区間を 5×5 分割し, 2次元 1次 PH で推定した例である. 左図が推定した確率密度関数のグラフである. 右図は等高線を表わす.

3.2.2 性質

d 次元 1次 PH 密度関数の理論的性質を示す. 本稿では推定精度を平均 2 乗誤差 (MSE) に基づいている. (3.12), (3.13) の推定方程式を解くと, 次の通りである.

命題 3.1

$$\hat{\alpha}_0 = \frac{n_D}{nh^d}, \quad (3.14)$$

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{12n_D}{nh^{d+2}} \mathbf{S}_1, \quad (3.15)$$

証明 3.1 (3.14) と (3.15) の証明：

$$\begin{aligned} \int_{B_D} \hat{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \int_{B_D} (\alpha_0 + \alpha_1^T \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{B_D} \alpha_0 d\mathbf{x} + \int_{B_D} \alpha_1^T \mathbf{x} d\mathbf{x} = h^d \alpha_0 = \frac{n_D}{n}, \quad (3.16) \\ \int_{B_D} \mathbf{x} \hat{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \int_{B_D} \mathbf{x} (\alpha_0 + \alpha_1^T \mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned}$$

$$= \int_{B_D} \mathbf{x} \alpha_0 d\mathbf{x} + \int_{B_D} \mathbf{x} \alpha_1^T \mathbf{x} d\mathbf{x} = \frac{h^{d+2}}{12} \alpha_1 = \frac{n_D}{n} \mathbf{S}_1, \quad (3.17)$$

より, 得られる. \square

次に, 平均 2 乗誤差を導くために, 推定された $\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ のバイアスを導く.

補助定理 3.1 バイアス

$\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ の点 $\mathbf{x} \in B_D$ における漸近バイアスは次のとおりである:

$$\text{Bias} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} = \frac{h^2}{24} \text{tr} \mathbf{H} - \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x}. \quad (3.18)$$

証明 3.1 バイアスの漸近表現を求める. まず $\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ の期待値を求めると,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} &= \mathbb{E} \left[\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1^T \mathbf{x} \right] = \mathbb{E} \left[\frac{1}{h^d} \frac{n_D}{n} + \frac{12}{h^{d+2}} \left(\frac{n_D}{n} \mathbf{S}_1 \right)^T \mathbf{x} \right] \\ &= \frac{1}{h^d} \mu_0 + \frac{12}{h^{d+2}} \mathbf{x}^T \boldsymbol{\mu}_1. \end{aligned}$$

A.1 より, 次の表現を得る.

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} &= \frac{1}{h^d} \left(h^d f + \frac{h^{d+2}}{24} \text{tr} \mathbf{H} \right) + \frac{12}{h^{d+2}} \mathbf{x}^T \frac{h^{d+2}}{12} \nabla f \\ &= f + \mathbf{x}^T \nabla f + \frac{h^2}{24} \text{tr} \mathbf{H}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

以上より, バイアスを求めると,

$$\text{Bias} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} = \mathbb{E} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} - f_{B_D}(\mathbf{x}) = \frac{h^2}{24} \text{tr} \mathbf{H} - \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x}. \quad (3.20)$$

\square

定理 3.1 積分 2 乗バイアス (ISB)

$$\text{ISB} = \frac{h^4}{288} \int \text{tr} (\mathbf{H}^2(\mathbf{x})) d\mathbf{x} - \frac{h^4}{480} \int \text{tr} \left[(\text{diag} \mathbf{H}(\mathbf{x}))^2 \right] d\mathbf{x}. \quad (3.21)$$

証明 3.1 原点周りでの ISB を導出する;

$$\begin{aligned} \text{ISB}(0) &= \int_{B_D} \text{Bias}^2 \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} d\mathbf{x} \\ &= \int_{B_D} \left(\frac{h^4}{24^2} (\text{tr} \mathbf{H})^2 + \frac{1}{4} (\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x})^2 - \frac{h^2}{24} (\text{tr} \mathbf{H}) \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} \right) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

ここで, 各項についてそれぞれ展開する. ここで $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{0})$ に注意すると,

$$\text{第一項} = \frac{h^4}{24^2} \int_{B_D} (\text{tr} \mathbf{H})^2 d\mathbf{x} = \frac{h^{d+4}}{576} (\text{tr} \mathbf{H})^2, \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \text{第二項} &= \frac{1}{4} \int_{B_D} (\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x})^2 d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{h^{d+4}}{72} \text{tr}(\mathbf{H}^2) + \frac{h^{d+4}}{144} (\text{tr} \mathbf{H})^2 - \frac{h^{d+4}}{120} \text{tr}([\text{Diag} \mathbf{H}]^2) \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\text{第三項} = -\frac{h^2}{24} (\text{tr} \mathbf{H}) \int_{B_D} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} d\mathbf{x} = -\frac{h^{d+4}}{24 \cdot 12} (\text{tr} \mathbf{H})^2. \quad (3.25)$$

以上より,

$$\begin{aligned} \text{ISB}(0) &= \frac{h^{d+4}}{576} (\text{tr} \mathbf{H})^2 \\ &+ \frac{1}{4} \left\{ \frac{h^{d+4}}{72} \text{tr}(\mathbf{H}^2) + \frac{h^{d+4}}{144} (\text{tr} \mathbf{H})^2 - \frac{h^{d+4}}{120} \text{tr}([\text{Diag} \mathbf{H}]^2) \right\} - \frac{h^{d+4}}{24 \cdot 12} (\text{tr} \mathbf{H})^2 \\ &= \frac{h^{d+4}}{288} \text{tr}(\mathbf{H}^2) - \frac{h^{d+4}}{480} \text{tr}([\text{Diag} \mathbf{H}]^2). \end{aligned} \quad (3.26)$$

ビン B_D の区間でリーマン近似を行うと, ビン B_D における漸近的な ISB は次式となる,

$$\text{ISB}(B_D) = \frac{h^4}{288} \int_{B_D} \text{tr}(\mathbf{H}^2(\mathbf{x})) d\mathbf{x} - \frac{h^4}{480} \int_{B_D} \text{tr}[(\text{diag} \mathbf{H}(\mathbf{x}))^2] d\mathbf{x}. \quad (3.27)$$

(3.27) をすべてのビン $B_D, D \in \Omega_D$ について和をとると ISB を得る. \square

次に, $\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ の原点における分散を求める.

補助定理 3.2 分散

$$\text{Var} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} = \frac{1}{nh^{2d}} (\mu_0 - \mu_0^2) + \frac{144}{nh^{2d+4}} \mathbf{x}^T (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\mu}_1^T) \mathbf{x}. \quad (3.28)$$

証明 3.2 分散を求める.

$$\begin{aligned} \text{Var} \left\{ \hat{f}(\mathbf{x}) \right\} &= \text{Var} \left[\hat{\alpha}_0 + \hat{\boldsymbol{\alpha}}_1^T \mathbf{x} \right] \\ &= \text{Var} [\hat{\alpha}_0] + \text{Var} \left[\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1^T \mathbf{x} \right] + 2\text{Cov} \left[\hat{\alpha}_0, \hat{\boldsymbol{\alpha}}_1^T \mathbf{x} \right]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

各項について計算するが, 共分散項は積分によって消去されるため, 以降, 略すと,

$$\text{Var} [\hat{\alpha}_0] = \text{Var} \left[\frac{1}{h^d} \frac{n_D}{n} \right] = \frac{1}{h^{2d}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n}, \quad (3.30)$$

$$\text{Var} \left[\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1^T \mathbf{x} \right] = \text{Var} \left[\frac{12}{h^{d+2}} \left(\frac{n_D}{n} \mathbf{S}_1 \right)^T \mathbf{x} \right] = \frac{144}{h^{2d+4}} \mathbf{x}^T \frac{\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\mu}_1^T}{n} \mathbf{x}. \square \quad (3.31)$$

定理 3.2 積分分散

$$\text{IVar} = \frac{d+1}{nh^d}. \quad (3.32)$$

証明 3.2 各項を展開し, B_D 区間で積分する. ここで μ_0, μ_1, μ_2 は A.1 の計算結果を用いると,

$$\begin{aligned} \text{IVar}[\hat{\alpha}_0] &= \int_{B_D} \left(\frac{1}{h^{2d}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n} \right) d\mathbf{x} = \frac{1}{nh^{2d}} (\mu_0 - \mu_0^2) \int_{B_D} d\mathbf{x} \\ &= \frac{f(\mathbf{0})}{n} + O\left(\frac{h^d}{n}\right). \end{aligned} \quad (3.33)$$

$\mu_2 - \mu_1\mu_1^T$ において (A.1.2) と (A.1.3) より, $\mu_2 - \mu_1\mu_1^T$ は μ_2 が主要項となるので

$$\begin{aligned} \text{IVar}[\hat{\alpha}_1^T \mathbf{x}] &= \frac{144}{nh^{2d+4}} \int \mathbf{x}^T (\mu_2 - \mu_1\mu_1^T) \mathbf{x} d\mathbf{x} \\ &\approx \frac{144}{nh^{2d+4}} \int \mathbf{x}^T \mu_2 \mathbf{x} d\mathbf{x} \\ &= \frac{f(\mathbf{0})}{n} \cdot d, \end{aligned} \quad (3.34)$$

よって

$$\text{IVar}(\hat{f}_{B_D}(\mathbf{0})) = \text{IVar}(\hat{\alpha}_0) + \text{IVar}(\hat{\alpha}_1^T \mathbf{x}) = \frac{d+1}{n} f(\mathbf{0}). \quad (3.35)$$

以上から区間 B_D 上の積分分散 (IV) は

$$\begin{aligned} \text{IV}(B_D) &= \int_{B_D} \text{Var}(\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1^T \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{B_D} \text{Var}(\hat{\alpha}_0) d\mathbf{x} + \int_{B_D} \text{Var}(\hat{\alpha}_1^T \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{f(\mathbf{0})}{nh^d} + \frac{d \cdot f(\mathbf{0})}{nh^d} \right) \cdot h^d = \frac{d+1}{nh^d} f(\mathbf{0}) \cdot h^d. \end{aligned} \quad (3.36)$$

次に全区間上での IV を求めるために, ビンのインデックス Ω_D (全ビンのインデックス) とおくと, リーマン積分近似を用いると,

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \int_{-\infty}^{\infty} \text{Var}(\hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} = \sum_{D \in \Omega_D} \int_{B_D} \text{Var}(\hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &= \sum_{D \in \Omega_D} \text{IV}(B_D) \cdot h^d \\ &= \frac{d+1}{nh^d} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{d+1}{nh^d} + O\left(\frac{1}{n}\right). \end{aligned} \quad (3.37)$$

を得る. \square

系 3.1 積分平均 2 乗誤差 (MISE)

IV と ISB の和が MISE となるので,

$$\text{MISE} = \text{ISB} + \text{IV}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{h^4}{288} \int \text{tr}(\mathbf{H}^2(\mathbf{x})) d\mathbf{x} - \frac{h^4}{480} \int \text{tr}(\text{diag}\mathbf{H}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \\
&+ \frac{d+1}{nh^d} + O\left(h^6 + \frac{1}{n}\right). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

MISE の主要項を最小値とするビンの最適幅 h^* を求める.

$$h^* = \left[\frac{d(d+1)}{4c_1n} \right]^{\frac{1}{d+4}}. \tag{3.39}$$

最適な MISE は h^* をビン幅に用いるから

$$\text{MISE}^* = c_1^{\frac{d}{d+4}} \cdot \left\{ \frac{d(d+1)}{4} \right\}^{\frac{4}{d+4}} \left(1 + \frac{4}{d} \right) n^{-\frac{4}{d+4}}. \tag{3.40}$$

但し, $c_1 = \int \frac{\text{tr}(\mathbf{H})}{288} - \int \frac{\text{tr}(\text{diag}\mathbf{H})}{480}$ なるある定数である.

この結果は, d 次元 2 次オーダーのカーネル推定量と同等な性能を持つことに注意する.

3.3 d 次元 2 次 Polynomial Histogram

3.3.1 定義

d 次元 2 次 Polynomial Histogram を定義する:

$$\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}_1^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in B_D. \tag{3.41}$$

ここで $B_D = [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]^d$ で原点に中心をもつビンとする. ビンのインデックスを D で表わし, 他のビンについては, 例えば, $B_{D'}$ についてはその中心を $\mathbf{t}_{D'} = (t_1^{D'}, \dots, t_d^{D'})^T$ とおくと, 上記モデルでは, $\mathbf{x} - \mathbf{t}_{D'}$, ($\mathbf{x} \in B_{D'}$) として前もって原点でビン中点をもつ区間 $[-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]^d$ にシフトし, 局所モーメントを定義することに注意する. これによって, どのビンにおいても中心化モーメントを求めることで, B_D 上の議論が同様に成り立つことになる.

(3.41) のパラメータ: α_0 , $\boldsymbol{\alpha}_1 : (d \times 1)$, $\mathbf{A} : (d \times d)$ は, 0 次-2 次までの局所モーメント制約を満たすように決めることとする.

ビン B_D 上の局所モーメント:

$$0 \text{ 次モーメント} : \int_{B_D} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mu_0, \tag{3.42}$$

$$1 \text{ 次モーメント} : \int_{B_D} \mathbf{x} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu}_1, \tag{3.43}$$

$$2 \text{ 次モーメント} : \int_{B_D} \mathbf{x}^T \mathbf{x} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu}_2, \tag{3.44}$$

とする. 推定方程式は (3.42)-(3.44) を標本モーメントで置き換えた式で与えられる.

すなわち,

$$0 \text{ 次標本モーメント} : S_0 = \frac{1}{n_D} \sum_{m=1}^n I(\mathbf{x}_m \in B_D) = 1, \tag{3.45}$$

$$1 \text{ 次標本モーメント} : \mathbf{S}_1 = \frac{1}{n_D} \sum_{m=1}^n \mathbf{x}_m I(\mathbf{x}_m \in B_D), \quad (3.46)$$

$$2 \text{ 次標本モーメント} : \mathbf{S}_2 = \frac{1}{n_D} \sum_{m=1}^n \mathbf{x}_m \mathbf{x}_m^T I(\mathbf{x}_m \in B_D), \quad (3.47)$$

とおくと,

$$\int_{B_D} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{n_D}{n}, \quad (3.48)$$

$$\int_{B_D} \mathbf{x} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{S}_1 \cdot \frac{n_D}{n}, \quad (3.49)$$

$$\int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{S}_2 \cdot \frac{n_D}{n}. \quad (3.50)$$

上記の推定方程式は2次モーメントの対称性より, パラメータ数とモーメント制約数は共に $\frac{(d+1)(d+2)}{2}$ である. 上記の方程式は明示的な解をもち, 次の解をもつ.

命題 3.2

$$\hat{\alpha}_0 = \frac{4+5d}{4h^d} \cdot \frac{n_D}{n} - \frac{15}{h^{d+2}} \cdot \frac{n_D}{n} \cdot \text{tr} \mathbf{S}_2, \quad (3.51)$$

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{12}{h^{d+2}} \cdot \frac{n_D}{n} \cdot \mathbf{S}_1, \quad (3.52)$$

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{cases} (\hat{\alpha}_{ii}) = \frac{180}{h^{d+4}} \cdot \frac{n_D}{n} \cdot S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \cdot \frac{n_D}{n}, \\ (\hat{\alpha}_{ij}) = \frac{144}{2h^{d+4}} \cdot \frac{n_D}{n} \cdot S_{2ij}. \end{cases} \quad (3.53)$$

計算の詳細は A.2 に示す.

3.3.2 性質

d 次元2次 Polynomial Histogram の理論的性質を示す.

補助定理 3.3 バイアス点 $\mathbf{x} \in B_D$ におけるバイアスは次のとおりである:

$$\begin{aligned} \text{Bias} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} &= \frac{h^2}{40} \sum_i^d x_i f_{iii}(\mathbf{0}) + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{j \neq k}^d x_i f_{ijj} \\ &\quad - \frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

証明 3.3

$$\mathbb{E} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} = \mathbb{E} \left[\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \hat{\mathbf{A}} \mathbf{x} \right]$$

$$= E[\hat{\alpha}_0] + E\left[\sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{1i} x_i\right] + E\left[\sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2\right] + E\left[\sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j\right]. \quad (3.55)$$

期待値の各項を計算 (A.3) し, (3.55) に代入すると,

$$\begin{aligned} E\left\{\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})\right\} &= f + \sum_{i=1}^d x_i f_i + \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i^d \sum_j^d x_i x_j f_{ij} + O(h^4), \end{aligned} \quad (3.56)$$

を得る. 推定式 $\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})$ のバイアスを導くと,

$$\begin{aligned} \text{Bias}\left\{\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})\right\} &= E\left\{\hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})\right\} - f_{B_D}(\mathbf{x}) \\ &= \left(f + \sum_{i=1}^d x_i f_i + \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj}\right. \\ &+ \left.\frac{1}{2} \sum_i^d \sum_j^d x_i x_j f_{ij}\right) - \left(f + \sum_{i=1}^d x_i f_i + \frac{1}{2} \sum_i^d \sum_j^d x_i x_j f_{ij}\right. \\ &+ \left.\frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk}\right) + O(h^4) \\ &= \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \\ &- \frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk} + O(h^4). \quad \square \end{aligned} \quad (3.57)$$

定理 3.3 積分 2 乗バイアス (ISB)

$$\text{ISB} = \frac{h^6}{100800} \sum_{i=1}^d \mathbf{R}(f_{iii}) + \frac{h^6}{8640} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \mathbf{R}(f_{ijj}) + \frac{h^6}{10368} \sum_{i \neq j \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k}^d \mathbf{R}(f_{ijk}). \quad (3.58)$$

証明 3.3 バイアスの 2 乗を, 区間 $B_D = [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]^d$ で積分する.

$$\begin{aligned} \text{ISB}(B_D) &= \int \cdots \int_{B_D} \text{Bias}^2 d\mathbf{x} \\ &= \int \cdots \int_{B_D} \left(\frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \right. \\ &- \left. \frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk} \right)^2 d\mathbf{x} \\ &= \int \cdots \int_{B_D} \left\{ \left(\frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \right)^2 + \left(\frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \right)^2 \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk} \right)^2 \\
& + \left. \begin{aligned}
& + 2 \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \frac{h^2}{24} \sum_{j \neq k}^d \sum_{l \neq m}^d x_j f_{jkk} - 2 \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \frac{1}{6} \sum_j^d \sum_k^d \sum_l^d x_j x_k x_l f_{jkl} \\
& - 2 \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d x_i f_{ijj} \frac{1}{6} \sum_k^d \sum_l^d \sum_m^d x_k x_l x_m f_{klm} \end{aligned} \right\}. \quad (3.59)
\end{aligned}$$

(3.59) の各項の計算は、A.5 に記す．全区間での ISB を求めるためにリーマン近似を用いると，結果を得る．□

推定式の分散を求める．

定理 3.4 積分分散 (IV)

$$IV = \frac{(d+1)(d+2)}{2nh^d}. \quad (3.60)$$

証明 3.4

$$\begin{aligned}
\text{Var} \left\{ \hat{f}_{BD}(\mathbf{x}) \right\} &= \text{Var} \left[\hat{\alpha}_0 + \sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{1i} x_i + \sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2 + \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j \right] \\
&= \text{Var}[\hat{\alpha}_0] + \sum_{i=1}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{1i} x_i] + \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{1i} x_i, \hat{\alpha}_{jk} x_j] + \sum_{i=1}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{2ii} x_i^2] \\
&+ \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{2ii} x_i^2, \hat{\alpha}_{2jj} x_j^2] + \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j] \\
&+ \sum_{\langle i \neq j \rangle \neq \langle k \neq l \rangle}^d \sum_{k \neq l}^d \sum_{m \neq n}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j, \hat{\alpha}_{2kl} x_k x_l] + 2 \sum_{i=1}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{1i} x_i] \\
&+ 2 \sum_{i=1}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2] + 2 \sum_{i \neq j}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j] \\
&+ 2 \sum_i^d \sum_j^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{1i} x_i, \hat{\alpha}_{2jj} x_j^2] + 2 \sum_i^d \sum_{j \neq k}^d \sum_{l \neq m}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{1i} x_i, \hat{\alpha}_{2jk} x_j x_k] \\
&+ 2 \sum_i^d \sum_{j \neq k}^d \sum_{l \neq m}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{2ii} x_i^2, \hat{\alpha}_{2jk} x_j x_k]. \quad (3.61)
\end{aligned}$$

このとき，積分すると消去できる項を除くと，残る成分は次の項である．

$$\text{Var} \left\{ \hat{f}_{BD}(\mathbf{x}) \right\} = \text{Var}[\hat{\alpha}_0] + \sum_{i=1}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{1i} x_i] + \sum_{i=1}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{2ii} x_i^2] + \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \text{Var}[\hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j]$$

$$+ \sum_{i \neq j}^d \sum_{i=1}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2, \hat{\alpha}_{2jj}x_j^2] + 2 \sum_{i=1}^d \text{Cov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii}x_i^2]. \quad (3.62)$$

(3.62) 式の各項をそれぞれ計算する. 詳細は A.4 を参照せよ.

点 \mathbf{x} における \hat{f}_{B_D} の分散は次のとおりである, 但し主要項のみを表記している.

$$\begin{aligned} \text{Var} \left\{ \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) \right\} &= \frac{4 + 5d}{4} \frac{f(0)}{nh^d} + \frac{12f(0)}{nh^{d+2}} \sum_i x_i^2 \\ &+ \frac{180f(0)}{nh^{d+4}} \sum_i x_i^4 + \frac{144f(0)}{2^2nh^{d+4}} \sum_{i \neq j} \sum x_i^2 x_j^2 - \frac{30f(0)}{nh^{d+2}} \sum_i x_i^2. \end{aligned} \quad (3.63)$$

以上をまとめると, 区間 B_D 上の積分分散の主要項は次のとおりである.

$$\begin{aligned} \text{IV}(B_D) &= \left(\frac{4 + 5d}{4} + d + \frac{9d}{4} + 0 + \frac{d^2 - d}{2} - \frac{5d}{2} \right) \frac{f(\mathbf{0})}{n} \\ &= \frac{(d+1)(d+2)}{2} \frac{f(\mathbf{0})}{n}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

リーマン近似を用いて, 全区間での積分分散を求めると,

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(d+1)(d+2)}{2} \frac{1}{nh^d} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \frac{(d+1)(d+2)}{2} \frac{1}{nh^d}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

を得る. \square

系 3.2 積分平均 2 乗誤差 MISE

(3.58) と (3.60) から

$$\begin{aligned} \text{MISE} &= \text{ISB} + \text{IV} \\ &= \left[\frac{1}{100800} \sum_i \text{R}(f_{ii}) + \frac{1}{8640} \sum_{i \neq j} \sum \text{R}(f_{ijj}) + \frac{1}{10368} \sum_{i \neq j \neq k} \sum \sum \text{R}(f_{ijk}) \right] h^6 \\ &+ \frac{(d+1)(d+2)}{2nh^d}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

を得る.

MISE の最小値となる最適なビン幅 h^* を求めると,

$$h^* = \left[\frac{d(d+1)(d+2)}{12c_2n} \right]^{\frac{1}{d+6}}. \quad (3.67)$$

但し, $c_2 = \left[\frac{1}{100800} \sum_i \text{R}(f_{ii}) + \frac{1}{8640} \sum_{i \neq j} \sum \text{R}(f_{ijj}) + \frac{1}{10368} \sum_{i \neq j \neq k} \sum \sum \text{R}(f_{ijk}) \right]$ で,
 $\text{R}(f') = \int (f'(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}$ を表わすものとする.

h^* のとき, 最小 MISE* を得るので,

$$\text{MISE}^* = c_2^{\frac{d}{d+6}} \cdot \left\{ \frac{d(d+1)(d+2)}{12} \right\}^{\frac{6}{d+6}} \cdot \left(1 + \frac{6}{d} \right) \cdot n^{-\frac{6}{d+6}}. \quad (3.68)$$

d 次元 2 次 PH 推定値は, 3 次オーダーカーネル相当量の推定精度をもち, d 次元 2 次カーネルの推定精度 $O\left(n^{-\frac{4}{d+4}}\right)$ よりも優れている. 多次元の 3 次オーダーカーネル関数が現在のところ知られていないため, ここで提案した推定量は, 多次元では現在のところ理論上最も優れている.

4. 数値実験

数値実験を通して, 多次元 PH の有効性を示す. 本章では 2 次元 PH によるシミュレーションを行った.

4.1 異なるモーメント次数による推定

2 次元 PH 推定においてモーメント次数 $m = 0, 1, 2, 3$ の場合について, 推定値を図示した. シミュレーションデータは混合正規分布

$$0.8N\left(\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right) + 0.2N\left(\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right)$$

から発生させた $n = 200,000$ 個のデータに基づいて推定を行った. 比較のため分割数は 5×5 とし, $[-4, 4] \times [-4, 4]$ を推定する全区間とする. 上記の表現は, 4:1 の割合で 2 つの正規分布を混合した分布を意味することに注意する.

図 3 は上から真の関数, 0-3 次の PH 推定値であり, 左は 2 次元グラフ, 右は等高線図である. モーメントの次数が増すにつれて推定値が真の分布へ近づく様子が見られ, 漸近的な性質を支持する結果となった.

上記の議論は視覚的な結果のため, 次に MISE に基づく数値比較を行う. 図 4 は, 図 3 で用いたデータを用いてビンの幅の変化に伴う MISE の挙動を示したものである. モーメント次数は 1 次, 2 次, 3 次の PH 推定による MISE である. 結果から最適なビン幅が推定可能であること, モーメント次数が上がるにつれて, 最適ビン幅は広がること, また, モーメント次数が上がるにつれて, 最適な MISE は, 小さくなるのが分かる. これは 3. 章の PH の性質で理論上述べたことを数値実験の結果は, 支持していることが分かる. この点は重要である. なぜならば, 漸近論の結果と有限サンプルでの数値実験結果が異なる例は, しばしば起こるからである.

4.2 計算時間

これまでの議論から, 理論的にも, 数値実験からも多次元 PH 推定が良い結果を与えることは確認できた. ビン型推定の長所はデータ数に比べてビン数は極めて少ないことから

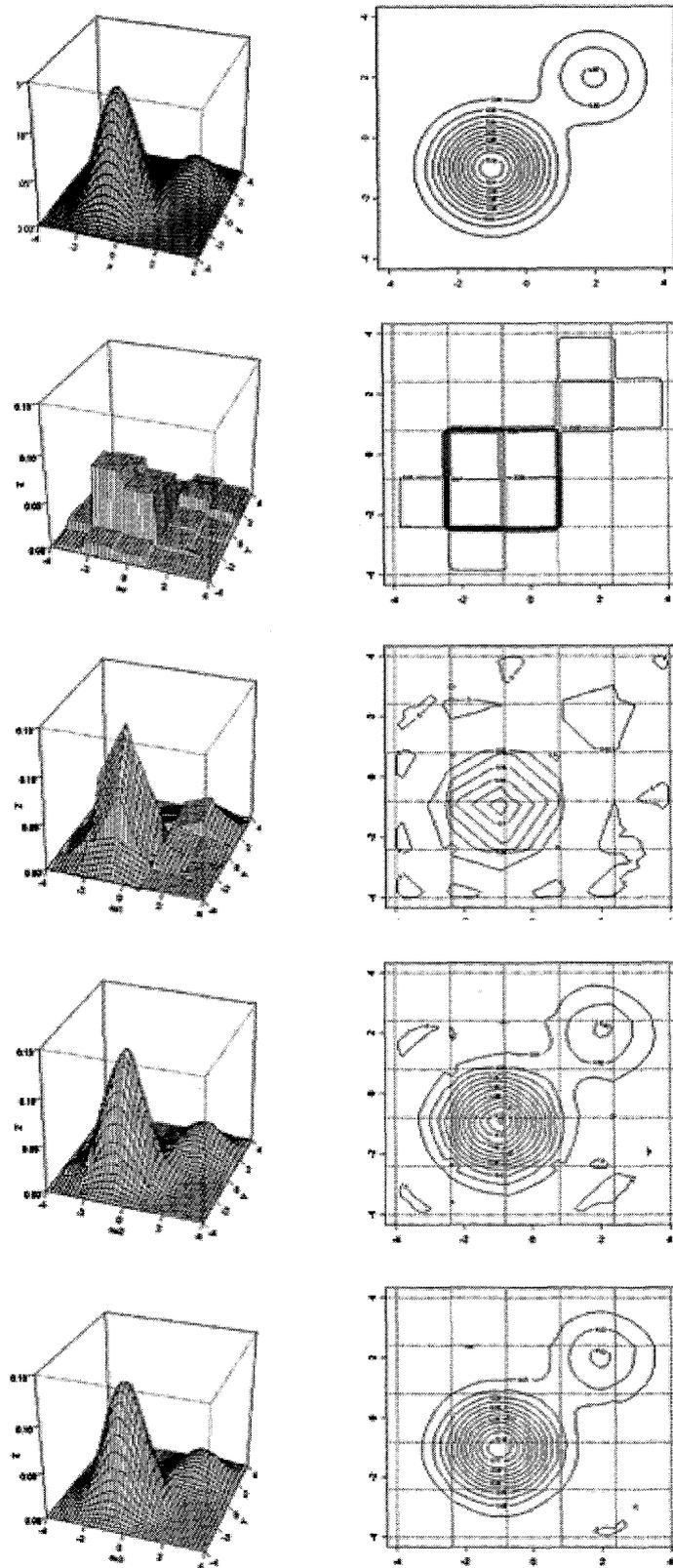


図3 2次元混合正規分布からの乱数 ($n = 200,000$) に基づく 2次元 PH 推定 (上から, 真の関数, 2次元ヒストグラム (0次 PH), 1,2,3次 PH のグラフと等高線図)

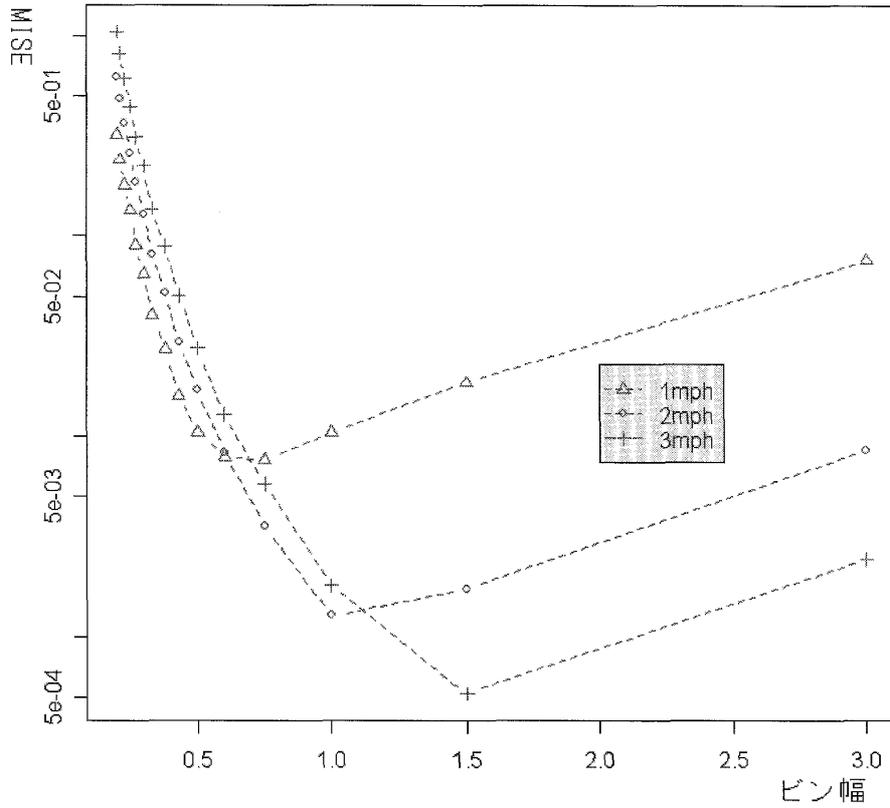


図4 2次元混合正規分布に基づくビン幅とMISEの動き

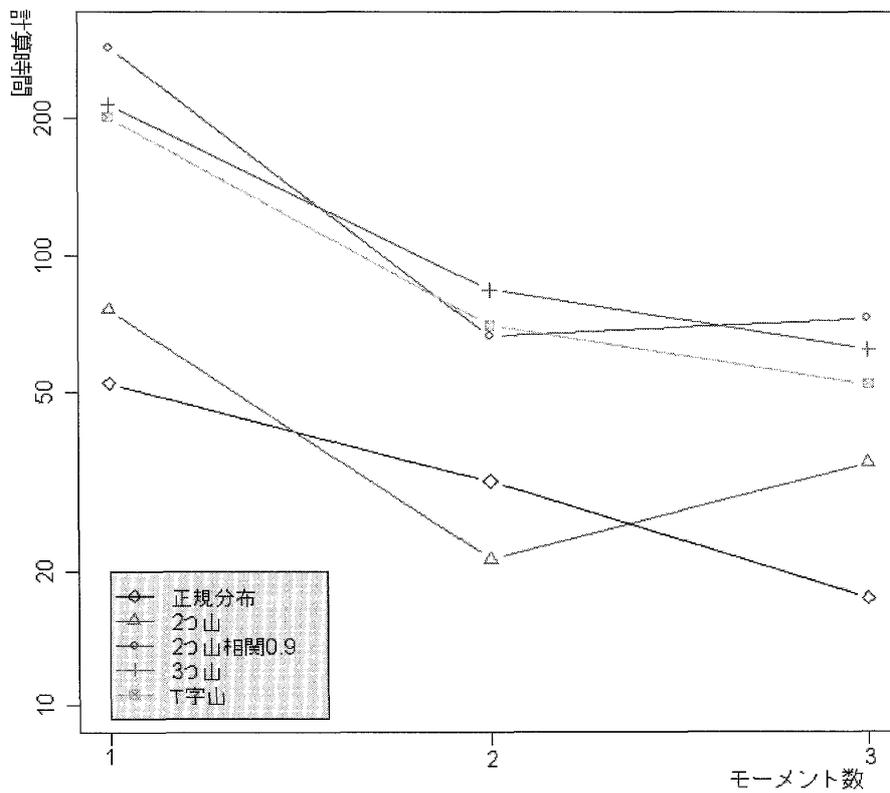


図5 2次元PHのモーメント次数と計算時間

大規模データにおいて計算負荷を軽減できる点である。他方、各ビン毎のデータの集計、指定された次数までのモーメントの計算が付加的に必要なものである。

ここではいろいろな分布 (5 種類) について、モーメント次数を 1,2,3 次とした時の推定に必要な計算時間を比較した。図 5 から、どの分布に対しても概ね、モーメント次数が上がるにつれて、計算時間は短くなる傾向をもつ。これはモーメント次数が上がると、最適ビン幅が広がり、ビン数は減ることになる。モーメントの計算のコストよりも、ビン数の減少に伴うトータルの計算時間は少なくなることを示している。結果としてモーメント次数が上がる程、推定精度とともに計算時間も短縮される。

4.3 実データの例

Old Faithful 間欠泉データ (Bishop (2006)) として知られた 272 件のデータに基いて 2 次元 PH 推定を行う。図 6 は、横軸は間欠泉の連続した噴出継続時間 (分)、縦軸は次の間欠泉噴出までの時間間隔 (分) の 2 次元データに基く散布図とその推定値を等高線で示したグラフである。このデータは多くの密度推定の例として取り上げられており、1 次元解析では Scott (1992) が累積分布の推定、2 次元解析では Bishop (2006) が二つの正規分布の混合分布を用いている。上記の結果で 2 峰型の特徴が示唆されている。ここで提案した 2 次元 PH では、 9×11 分割したビン毎にグルーピングしたデータとそのモーメントに基いた推定結果であるが、2 峰型の特徴を捉えている。しかし、非常に少ないサンプル数への適用のため分割数も少なく荒い推定値となった。

5. 考察と展望

5.1 次元とデータ数とビン数

次元とデータ数及びビン数との関係について述べる。Silverman (1986), Scott (1992) では、推定精度 (MSE) を一定とし、次元を上げたとき、それに必要なデータ数を示している。Silverman の計算によると 1 次元で $n = 4$ のとき、同じ MSE を保つために 2 次元では $n = 19$, 3 次元では $n = 67$, 7 次元では $n = 10700$, 10 次元では $n = 842000$ のデータが必要となる。この議論は多次元の次元の呪いを防ぐために必要なデータ数を見積もっている。

2 次元 PH の最適なビン幅は、0 次 PH (2 次元ヒストグラム) のとき $h^* = O(n^{-\frac{1}{4}})$, 1 次 PH のとき $h^* = O(n^{-\frac{1}{6}})$, 2 次 PH のとき $h^* = O(n^{-\frac{1}{8}})$ とモーメント次数を増加させることはビン幅を広げる、すなわちビン数減らすことに対応する。具体的に示すと、ビンの数を m とおくと 2 次元の場合、 $m \propto h^{-d}$ に比例するから、0 次 PH ではビン数 $n^{\frac{1}{2}}$, 1 次 PH ではビン数 $n^{\frac{1}{3}}$, 2 次 PH ではビン数 $n^{\frac{1}{4}}$ に比例する。これは多次元で次元 d とともに指数的に増加するビン数、これに伴う次元の呪いの問題を軽減できる可能性をもつ。

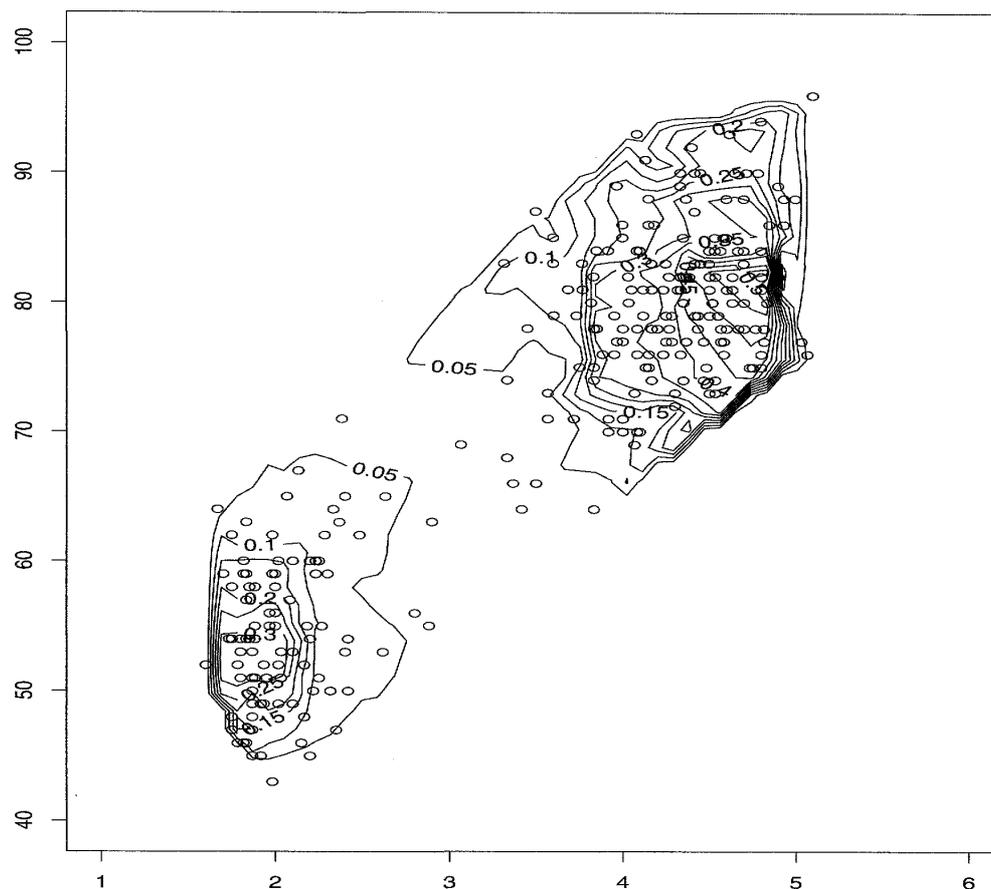


図6 Old Faithful 間欠泉の2次元 PH 推定結果

5.2 バンド幅（ビン幅）と多次元化

カーネル密度推定では単一のバンド幅パラメータ h のみで多次元カーネルを構成するのが単純で一般的である。例えば Fukunaga (1972) では多次元正規カーネル, $K(\mathbf{x}) \sim N(\mathbf{0}, h\Sigma)$ なるカーネルを考え, Σ は標本分散行列で置き換えるアイデアである。これは, 多変量正規カーネルを仮定し, 問題となるバンド幅行列 (共分散行列) の構成をデータに基づいて決めること, 多次元データを標準化して推定を行うもので, 超楕円形の多次元カーネルを球状化して推定を行う, 先見的なものである。

他に積型カーネルなども共通なバンド幅パラメータ h を選ぶ問題に帰着され, この h を CV(Cross-Validation) 法あるいは Plug-in 法で推定している (Wand and Jones (1994)). PH 法のビン幅も同様な CV, Plug-in 法が適用可能である。Wand (1997) は1次元ではあるが, 計算コストを考えて, ビン化したデータでビン幅を推定する Plug-in 法を提案した。

5.3 多次元化によって生じる問題

1次元では, 理論的に整備されたノンパラメトリックな密度推定の研究は多次元へ拡張する場合に新たな問題が生じる。本節はこの問題点を指摘し, 整理しておく。

- 1) 次元が上がると, 推定精度が低下するため, 追加的な情報を旨く利用して, 精度の低

下を軽減することが重要であり，多次元 PH は付加的なモーメント情報を利用した一つの試みである．

- 2) 本質的には，次元が上がるとともに次元の呪いにとらわれないようなデータ量が必要である．データマイニング等で扱われるような大規模データの収集が可能な分野では，高い次元での解析もチャレンジングであろう．
- 3) しかし，データ数が追加できない場合，データの変数が多く，次元の呪い等のデータの過疎性によって満足な推定結果が得られないことがある．そのときには主成分分析か射影追跡法のような低い次元へデータを変換する次元縮約をして，密度推定を行うことが良いと思われる (Jones and Sibsen (1987)).
- 4) 境界バイアスの問題は，分布の裾付近に関心がある場合，気をつける点であるが，多次元の場合，この問題はより影響が大きくなる．従って境界バイアス補正が重要となる．1次元のこの補正の方法は多次元でも同様に展開可能である．

5.2 節で述べたバンド (あるいはビン) 幅推定の問題は，1次元では CV 法，Plug-in 法が良く利用されている．低次元でも理論上及び比較研究で，Plug-in 法が優れていることが知られている．しかしながら，低次元では優位であった Plug-in 法が高次元になると，CV 法の方が理論上優位となる逆転現象が起こる．この現象は数値実験での比較研究がされていないため，実際の影響は明らかではないが，注意を要する (Wand and Jones (1995), Simonoff (1998)).

5.4 今後の展望

多次元データにおいて，パラメトリックな密度関数の構成ができない場合の代替案として，もしくはより積極的にノンパラメトリックなアプローチが有効となる応用分野が考えられる．

非線形及び多次元の判別分析では，多次元 PH あるいは多次元カーネル密度関数の利用が考えられる．大規模データに基づく判別では SVM (Support Vector Machine) の計算コストに比べて，ノンパラメトリックな方法はより効率的であり，判別曲線の統計的性質を調べることが可能である．これは SVM に比べて優位な点である．我々はこの方向で現在，検討を進めている．ノンパラメトリックな方法はデータへの追従性が高く，Good and Gaskin (1972) で扱われた bump hunting の問題への応用が有望と思われる．Minnotte and Scott (1993) では，ノンパラメトリック推定したあとのモードの挙動を調べる mode tree を提案しているが，適用分野は広い．この他にノンパラメトリックなアプローチが応用できる分野として Silverman (1986) や Simonoff (1998) ではクラスター分析，多峰性への検定，平滑化ブートストラップ，生存時間解析，射影追跡を挙げている．

d 次元 PH の一般次数 (p 次モーメント) に基づく推定の理論は, いくつかの問題が未解決である. 1次元 PH (Sagae and Scott (1997)) では一般次数での漸近特性の導出に成功しているが, 単純に多次元化できないため, 今後の検討課題である. 一方で, 多次元カーネルの研究動向は, 2次オーダーカーネル (例えば, 積型正規カーネル, Fukunaga の多次元正規カーネル) のクラスに対するバンド幅推定問題の研究が進んでいる. 前述のように CV 法, Plug-in 法に基づくバンド幅推定が中心である. しかし, 次元の増加に伴う推定精度の低下を防ぐために高次オーダー特性をもつ多次元カーネル関数の構成法及び, 大規模データへの効率的な推定アルゴリズムの開発が望まれる.

謝辞

本論文の数値実験及びグラフ作成では日比野夏輝君 (元岐阜大学大学院) に感謝致します. また, 査読者からの貴重なコメントに対して, 記して感謝致します. また, 本研究は科学研究費基盤研究 (B) の課題番号 21340026 の援助を受けたものである.

A. 補遺

A.1 μ_0, μ_1 の漸近表現

$$\begin{aligned}\mu_0 &= \int_{B_D} f_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &\approx \int_{B_D} \left(f + \mathbf{x}^T \nabla f + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} \right) d\mathbf{x} \\ &= h^d f + \frac{h^{d+2}}{24} \text{tr} \mathbf{H} + O(h^{d+4}),\end{aligned}\tag{A.1.1}$$

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \int_{B_D} \mathbf{x} f_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &\approx \int_{B_D} \mathbf{x} \left(f + \mathbf{x}^T \nabla f + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} \right) d\mathbf{x} \\ &= \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T \nabla f d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} d\mathbf{x} \\ &= \frac{h^{d+2}}{12} \nabla f + O(h^{d+4}),\end{aligned}\tag{A.1.2}$$

$$\begin{aligned}\mu_2 &= \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T f_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T \left(f(0) + \mathbf{x}^T \nabla f(0) + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H}(0) \mathbf{x} \right) d\mathbf{x} \\ &= \frac{h^{d+2}}{12} \mathbf{I} f(0) + 0 + \frac{1}{2} \int_{B_D} \mathbf{x} \mathbf{x}^T \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} d\mathbf{x} \\ &= \begin{cases} (i, i) : \frac{h^{d+2}}{12} f(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{f_{ii}}{180} + \frac{1}{144} \sum_k^d f_{kk} \right) h^{d+4} + O(h^{d+6}). \\ (i, j) : \frac{f_{ij}}{144} h^{d+4} + O(h^{d+6}). \end{cases}\end{aligned}\tag{A.1.3}$$

ここで

$$\int \mathbf{x}\mathbf{x}^T(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})d\mathbf{x} = \begin{cases} (i,i), & \left(\frac{f_{ii}}{180} + \frac{1}{144}\sum_k^d f_{kk}\right)h^{d+4} \\ (i,j), & \frac{f_{ij}}{72}h^{d+4} \end{cases}$$

を用いた.

A.2 推定方程式を解く

$$\begin{aligned} \text{A-1.} \quad & \int_{B_D} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \frac{n_D}{n}, \\ \text{A-2.} \quad & \int_{B_D} x_i \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \frac{n_D}{n}S_{1i}, \\ \text{A-3.} \quad & \int_{B_D} x_i^2 \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \frac{n_D}{n}S_{2ii}, \\ \text{A-4.} \quad & \int_{B_D} x_i x_j \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \frac{n_D}{n}S_{2ij}, \end{aligned}$$

A-1:左辺を計算すると,

$$\begin{aligned} \int_{B_D} \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} &= \int_{B_D} \left(\alpha_0 + \sum_{i=1}^d \alpha_{1i}x_i + \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii}x_i^2 + \sum_{i \neq j}^d \sum_{j=1}^d \alpha_{2ij}x_i x_j \right) d\mathbf{x} \\ &= h^d \alpha_0 + \frac{h^{d+2}}{12} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} = \frac{n_D}{n}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.1})$$

A-2:左辺を計算すると

$$\begin{aligned} \int_{B_D} x_i \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} &= \int_{B_D} x_i \left(\alpha_0 + \sum_{j=1}^d \alpha_{1j}x_j + \sum_{j=1}^d \alpha_{2jj}x_j^2 + \sum_{j \neq k}^d \sum_{k=1}^d \alpha_{2jk}x_j x_k \right) d\mathbf{x} \\ &= \int_{B_D} \left\{ x_i \alpha_0 + (x_i^2 \alpha_{1i} + x_i \sum_{i \neq j}^d \alpha_{1j}x_j) + (x_i^3 \alpha_{2ii} + x_i \sum_{j \neq i}^d \alpha_{2jj}x_j^2) \right. \\ &\quad \left. + (x_i^2 \sum_{j \neq k}^d \sum_{k=1}^d \alpha_{2ik}x_k + x_i^2 \sum_{j \neq k=i}^d \sum_{k=1}^d \alpha_{2ji}x_j + x_i \sum_{j \neq k \neq i}^d \sum_{k=1}^d \alpha_{2jk}x_j x_k) \right\} d\mathbf{x} \\ &= \frac{h^{d+2}}{12} \alpha_{1i} = \frac{n_D}{n}S_{1i}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.2})$$

A-3:左辺を計算すると

$$\int_{B_D} x_i^2 \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_{B_D} x_i^2 \left(\alpha_0 + \sum_{j=1}^d \alpha_{1j}x_j + \sum_{j=1}^d \alpha_{2jj}x_j^2 + \sum_{j \neq k}^d \sum_{k=1}^d \alpha_{2jk}x_j x_k \right) d\mathbf{x}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{B_D} \left\{ x_i^2 \alpha_0 + (x_i^3 \alpha_{1i} + x_i^2 \sum_{j \neq i}^d \alpha_{1j} x_j) + (x_i^4 \alpha_{2ii} + x_i^2 \sum_{j \neq i}^d \alpha_{2jj} x_j^2) \right. \\
&+ \left. (x_i^3 \sum_{j=i \neq k}^d \sum_{k \neq j}^d \alpha_{2ik} x_k + x_i^3 \sum_{j \neq k=i}^d \sum_{k \neq j}^d \alpha_{2ji} x_j + x_i^3 \sum_{j \neq k \neq i}^d \sum_{k \neq j}^d \alpha_{2jk} x_j x_k) \right\} d\mathbf{x} \\
&= \frac{h^{d+2}}{12} \alpha_0 + \frac{h^{d+4}}{80} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{j \neq i}^d \alpha_{2jj} \\
&= \frac{h^{d+2}}{12} \alpha_0 + \frac{h^{d+4}}{180} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} = \frac{n_D}{n} S_{2ii}. \tag{A.2.3}
\end{aligned}$$

ただし,

$$\begin{aligned}
\frac{h^{d+4}}{80} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{j \neq i}^d \alpha_{2jj} &= \left(\frac{1}{180} + \frac{1}{12^2} \right) h^{d+4} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{j \neq i}^d \alpha_{2jj} \\
&= \frac{h^{d+4}}{180} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii},
\end{aligned}$$

である. 下記の式で $i \neq j \neq k$ は, i, j, k いずれも等しくないものに対して和を定義している. 同様に $j \neq k = i$ は, $(i = k)$ かつ $i \neq j$ である. $\langle k \neq l \rangle \neq \langle i \neq j \rangle$ は k と l に関する和において, $k \neq l$ であり, 他のインデックス ($i \neq j$) なる i と j と k, l は等しくないことを意味する.

A-4: $i \neq j$ なる (i, j) 成分について,

$$\begin{aligned}
\int_{B_D} x_i x_j \hat{f}_{B_D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \int_{B_D} x_i x_j \left(\alpha_0 + \sum_{k=1}^d \alpha_{1k} x_k \right. \\
&+ \left. \sum_{k=1}^d \alpha_{2kk} x_k^2 + \sum_{k \neq l}^d \sum_{k \neq l}^d \alpha_{2kl} x_k x_l \right) d\mathbf{x} \\
&= \int_{B_D} \left\{ x_i x_j \alpha_0 + (x_i^2 x_j \alpha_{1i} + x_i x_j^2 \alpha_{1j} + x_i x_j \sum_{\langle i \neq j \rangle \neq k}^d \alpha_{1k} x_k) \right. \\
&+ (x_i^3 x_j \alpha_{2ii} + x_i x_j^3 \alpha_{2jj} + x_i x_j \sum_{k \neq \langle i \neq j \rangle}^d \alpha_{2kk} x_k^2) \\
&+ \left\{ (x_i^2 x_j^2 \alpha_{2ij} + x_i^2 x_j^2 \alpha_{2ji} + x_i^2 x_j \sum_{\langle k=i \rangle \neq \langle j \neq l \rangle}^d \sum_{\langle k=i \rangle \neq \langle j \neq l \rangle}^d \alpha_{2il} x_l) \right. \\
&+ x_i^2 x_j \sum_{\langle l=i \rangle \neq \langle k \neq j \rangle}^d \sum_{\langle l=i \rangle \neq \langle k \neq j \rangle}^d \alpha_{2ki} x_k + x_i x_j^2 \sum_{\langle k=j \rangle \neq \langle l \neq i \rangle}^d \sum_{\langle k=j \rangle \neq \langle l \neq i \rangle}^d \alpha_{2jl} x_l \\
&+ \left. \left. x_i x_j^2 \sum_{\langle l=j \rangle \neq \langle k \neq i \rangle}^d \sum_{\langle l=j \rangle \neq \langle k \neq i \rangle}^d \alpha_{2kj} x_k + x_i x_j \sum_{\langle k \neq l \rangle \neq \langle i \neq j \rangle}^d \sum_{\langle k \neq l \rangle \neq \langle i \neq j \rangle}^d \alpha_{2kl} x_k x_l \right) \right\} \\
&\left. \right\} d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

$$= \frac{h^{d+4}}{12^2}(\alpha_{2ij} + \alpha_{2ji}) = \frac{2h^{d+4}}{144}\alpha_{2ij} = \frac{n_D}{n}S_{2ij}. \quad (\text{A.2.4})$$

(A.2.1) と (A.2.3) から (i, i) 成分について,

$$\begin{aligned} \frac{h^{d+2}}{12} \left\{ \frac{1}{h^d} \left(\frac{n_D}{n} - \frac{h^{d+2}}{12} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} \right) \right\} + \frac{h^{d+4}}{180} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} &= \frac{n_D}{n} S_{2ii} \\ \frac{h^2 n_D}{12 n} - \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{180} \alpha_{2ii} + \frac{h^{d+4}}{12^2} \sum_{i=1}^d \alpha_{2ii} &= \frac{n_D}{n} S_{2ii} \\ \therefore \hat{\alpha}_{2ii} &= \frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.5})$$

最後に

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{1}{h^d} \left\{ \frac{n_D}{n} - \frac{h^{d+2}}{12} \sum_{i=1}^d \left(\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{h^d} \left(\frac{n_D}{n} + \frac{5d}{h^2} \frac{n_D}{n} - \frac{15}{h^2} \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii} \right) \\ \therefore \hat{\alpha}_0 &= \frac{4 + 5d}{4h^d} \frac{n_D}{n} - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.6})$$

A.3 期待値の導出

$$\begin{aligned} \text{E}[\hat{\alpha}_0] &= \frac{4 + 5d}{4h^d} \text{E} \left[\frac{n_D}{n} \right] - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \text{E} \left[\frac{n_D}{n} S_{2ii} \right] \\ &= \frac{4 + 5d}{4h^d} \mu_0 - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \\ &= \frac{4 + 5d}{4h^d} \left(h^d f + \frac{h^{d+2}}{24} \sum_{i=1}^d f_{ii} + O(h^{d+4}) \right) \\ &\quad - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \left(\frac{h^{d+2}}{12} f + \frac{h^{d+4}}{2 \cdot 180} f_{ii} + \frac{h^{d+4}}{2 \cdot 144} \sum_{i=1}^d f_{ii} + O(h^{d+6}) \right) \\ &= \left(\frac{4 + 5d}{4} - \frac{15d}{12} \right) f + \left(\frac{4 + 5d}{4 \cdot 24} - \frac{15}{2 \cdot 180} - \frac{15d}{2 \cdot 144} \right) h^2 \sum_{i=1}^d f_{ii} + O(h^4) \\ &= f + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{A.3.1})$$

$$\begin{aligned} \text{E} \left[\sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{1i} x_i \right] &= \sum_{i=1}^d x_i \frac{12}{h^{d+2}} \text{E} \left[\frac{n_D}{n} S_{1i} \right] = \sum_{i=1}^d x_i \frac{12}{h^{d+2}} \mu_{1i} \\ &= \sum_{i=1}^d x_i \frac{12}{h^{d+2}} \left(\frac{h^{d+2}}{12} f_i + \frac{h^{d+4}}{6 \cdot 80} f_{iii} + \frac{3h^{d+4}}{6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj} \right) \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^d x_i f_i + \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} + \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj}. \quad (\text{A.3.2})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^d \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2 \right] &= \sum_{i=1}^d x_i^2 \mathbb{E} \left[\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} \right] \\ &= \sum_{i=1}^d x_i^2 \left(\frac{180}{h^{d+4}} \mu_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \mu_0 \right) \\ &= \sum_{i=1}^d x_i^2 \left\{ \frac{180}{h^{d+4}} \left(\frac{h^{d+2}}{12} f + \frac{h^{d+4}}{2 \cdot 180} f_{ii} + \frac{h^{d+4}}{2 \cdot 144} \sum_{i=1}^d f_{ii} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{15}{h^{d+2}} \left(h^d f + \frac{h^{d+2}}{24} \sum_{i=1}^d f_{ii} \right) \right\} \\ &= \sum_{i=1}^d x_i^2 \left(\frac{15}{h^2} f + \frac{1}{2} f_{ii} + \frac{5}{8} \sum_{i=1}^d f_{ii} - \frac{15}{h^2} f - \frac{5}{8} \sum_{i=1}^d f_{ii} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d x_i^2 f_{ii}. \quad (\text{A.3.3}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \hat{\alpha}_{2ij} x_i x_j \right] &= \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i x_j \frac{144}{2h^{d+4}} \mu_{2ij} = \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i x_j \frac{144}{2h^{d+4}} \frac{h^{d+4}}{144} f_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i x_j f_{ij}. \quad (\text{A.3.4}) \end{aligned}$$

A.4 ISB の計算

- (3.59) 式の第一項: $\int_{B_D} \left(\frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \right)^2 d\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} &= \frac{h^4}{40^2} \int_{B_D} \sum_{i=1}^d x_i^2 f_{iii}^2 d\mathbf{x} = \frac{h^4}{40^2} \frac{h^{d+2}}{12} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 \\ &= \frac{h^{d+6}}{40^2 \cdot 12} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2. \quad (\text{A.4.1}) \end{aligned}$$

- (3.59) 式の第二項: $\int_{B_D} \left(\frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \right)^2 d\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} &= \frac{h^4}{24^2} \int_{B_D} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \sum_{k \neq l}^d \sum_{k \neq l}^d x_i f_{ijj} x_k f_{kll} d\mathbf{x} \\ &= \frac{h^4}{24^2} \int_{B_D} \left(\sum_{k=i \neq j=l}^d \sum_{k=i \neq j=l}^d x_i^2 f_{ijj}^2 + \sum_{k=i \neq j \neq l}^d \sum_{k=i \neq j \neq l}^d x_i^2 f_{ijj} f_{ill} \right) d\mathbf{x} \end{aligned}$$

$$= \frac{h^{d+6}}{24^2 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + \frac{h^{d+6}}{24^2 \cdot 12} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk}. \quad (\text{A.4.2})$$

• (3.59) 式の第三項：
$$\int_{B_D} \left(\frac{1}{6} \sum_i^d \sum_j^d \sum_k^d x_i x_j x_k f_{ijk} \right)^2 d\mathbf{x}$$

$$= \frac{1}{36} \int_{B_D} \left\{ 1 \cdot x_i^6 \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 + \left(9 \cdot x_i^2 x_j^4 \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + 6 \cdot x_i^4 x_j^2 \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj} f_{iii} \right) \right. \\ \left. + \left(9 \cdot x_i^2 x_j^2 x_k^2 \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk} + 6 \cdot x_i^2 x_j^2 x_k^2 \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijk}^2 \right) \right\} d\mathbf{x}$$

$$= \frac{h^{d+6}}{36 \cdot 448} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 + \frac{9h^{d+6}}{36 \cdot 12 \cdot 80} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + \frac{6h^{d+6}}{36 \cdot 80 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj} \\ + \frac{9h^{d+6}}{36 \cdot 12^3} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk} + \frac{6h^{d+6}}{36 \cdot 12^3} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijk}^2. \quad (\text{A.4.3})$$

• (3.59) 式の第四項：
$$\int_{B_D} 2 \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \frac{h^2}{24} \sum_{j \neq k}^d \sum_{j \neq k}^d x_j f_{jkk} d\mathbf{x}$$

$$= \frac{2h^4}{40 \cdot 24} \int_{B_D} \sum_{i=j \neq k}^d \sum_{i=j \neq k}^d x_i^2 f_{iii} f_{ikk} d\mathbf{x}$$

$$= \frac{2h^{d+6}}{40 \cdot 24 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj}. \quad (\text{A.4.4})$$

• (3.59) 式の第五項：
$$\int_{B_D} -2 \frac{h^2}{40} \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \frac{1}{6} \sum_j^d \sum_k^d \sum_l^d x_j x_k x_l f_{jkl} d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{40 \cdot 6} \int_{B_D} \left\{ \sum_{i=1}^d x_i f_{iii} \left(\sum_{j=1}^d x_j^3 f_{jjj} \right) \right. \\ \left. + 2 \sum_{j \neq k}^d \sum_{j \neq k}^d x_j^2 x_k f_{jjk} + \sum_{j \neq k}^d \sum_{j \neq k}^d x_j x_k^2 f_{jkk} \right\} d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{40 \cdot 6} \int_{B_D} \left(\sum_{i=1}^d x_i^4 f_{iii}^2 + 2 \sum_{j \neq k=i}^d \sum_{j \neq k=i}^d x_j^2 x_i^2 f_{iii} f_{jji} \right. \\ \left. + \sum_{i=j \neq k}^d \sum_{i=j \neq k}^d x_i^2 x_k^2 f_{iii} f_{ikk} \right) d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{40 \cdot 6} \int_{B_D} \left(\sum_{i=1}^d x_i^4 f_{iii}^2 + 3 \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i^2 x_j^2 f_{iii} f_{ijj} \right) d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^{d+6}}{40 \cdot 6 \cdot 80} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 - \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{40 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj}. \quad (\text{A.4.5})$$

• (3.59) 式の第六項：

$$\int_{B_D} -2 \frac{h^2}{24} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \frac{1}{6} \sum_k^d \sum_l^d \sum_m^d x_k x_l x_m f_{klm} d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{24 \cdot 6} \int_{B_D} \left\{ \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i f_{ijj} \left(\sum_{k=1}^d x_k^3 f_{kkk} \right. \right.$$

$$\left. \left. + 2 \sum_{k \neq l}^d \sum_{k \neq l}^d x_k^2 x_l f_{kkl} + \sum_{k \neq l}^d \sum_{k \neq l}^d x_k x_l^2 f_{kll} \right) \right\} d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{24 \cdot 6} \int_{B_D} \left(\sum_{k=i \neq j}^d \sum_{k=i \neq j}^d x_i^4 f_{ijj} f_{iii} + 2 \sum_{j=k \neq l=i}^d \sum_{j=k \neq l=i}^d x_j^2 x_i^2 f_{ijj} f_{jji} + \sum_{i=k \neq l=j}^d \sum_{i=k \neq l=j}^d x_i^2 x_j^2 f_{ijj}^2 \right.$$

$$\left. + 2 \sum_{j \neq k \neq l=i}^d \sum_{j \neq k \neq l=i}^d x_k^2 x_i^2 f_{ijj} f_{kki} + \sum_{i=k \neq l \neq j}^d \sum_{i=k \neq l \neq j}^d x_i^2 x_l^2 f_{ijj} f_{ill} \right) d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{24 \cdot 6} \int_{B_D} \left(\sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i^4 f_{iii} f_{ijj} + 2 \sum_{j \neq i}^d \sum_{j \neq i}^d x_j^2 x_i^2 f_{ijj}^2 + \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i^2 x_j^2 f_{ijj}^2 \right.$$

$$\left. + 2 \sum_{j \neq k \neq i, i \neq j}^d \sum_{j \neq k \neq i, i \neq j}^d x_k^2 x_i^2 f_{ijj} f_{ikk} + \sum_{i \neq k \neq j, i \neq j}^d \sum_{i \neq k \neq j, i \neq j}^d x_i^2 x_k^2 f_{ijj} f_{ikk} \right) d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^2}{24 \cdot 6} \int_{B_D} \left(\sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i^4 f_{iii} f_{ijj} + 3 \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d x_i^2 x_j^2 f_{ijj}^2 \right.$$

$$\left. + 3 \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d x_i^2 x_k^2 f_{ijj} f_{ikk} \right) d\mathbf{x}$$

$$= -\frac{2h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 80} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj} - \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2$$

$$- \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk}.$$

(A.4.6)

よって (3.59) 式は、以下の通り書き換えることが出来る。

$$\text{ISB}(\mathbf{0}) = \frac{h^{d+6}}{40^2 \cdot 12} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 + \frac{h^{d+6}}{24^2 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + \frac{h^{d+6}}{24^2 \cdot 12} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk}$$

$$+ \frac{h^{d+6}}{36 \cdot 448} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 + \frac{9h^{d+6}}{36 \cdot 12 \cdot 80} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + \frac{6h^{d+6}}{36 \cdot 80 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj}$$

$$+ \frac{9h^{d+6}}{36 \cdot 12^3} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk} + \frac{6h^{d+6}}{36 \cdot 12^3} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj}^2$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2h^{d+6}}{40 \cdot 24 \cdot 12} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj} \\
& - \frac{2h^{d+6}}{40 \cdot 6 \cdot 80} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 - \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{40 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj} \\
& - \frac{2h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 80} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{iii} f_{ijj} - \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 \\
& - \frac{2 \cdot 3h^{d+6}}{24 \cdot 6 \cdot 12^2} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijj} f_{ikk} \\
& = \frac{h^{d+6}}{100800} \sum_{i=1}^d f_{iii}^2 + \frac{h^{d+6}}{8640} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d f_{ijj}^2 + \frac{h^{d+6}}{10368} \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d \sum_{i \neq j \neq k, i \neq k}^d f_{ijk}^2. \quad (\text{A.4.7})
\end{aligned}$$

A.5 分散の計算

$$\begin{aligned}
\text{Var}[\hat{\alpha}_0] &= \text{Var} \left[\frac{4+5d}{4h^d} \frac{n_D}{n} - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii} \right] \\
&= \left(\frac{4+5d}{4h^d} \right)^2 \text{Var} \left[\frac{n_D}{n} \right] + \left(\frac{15}{h^{d+2}} \right)^2 \sum_{i=1}^d \text{Var} \left[\frac{n_D}{n} S_{2ii} \right] \\
&+ \left(\frac{15}{h^{d+2}} \right)^2 \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \text{Cov} \left[\frac{n_D}{n} S_{2ii}, \frac{n_D}{n} S_{2jj} \right] \\
&- 2 \frac{4+5d}{4h^d} \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \text{Cov} \left[\frac{n_D}{n}, \frac{n_D}{n} S_{2ii} \right] \\
&= \frac{(4+5d)^2}{16h^{2d}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{4iii} - \mu_{2ii}^2}{n} \\
&+ \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \frac{\mu_{4iijj} - \mu_{2ii} \mu_{2jj}}{n} - \frac{2(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{2ii} - \mu_0 \mu_{2ii}}{n}. \quad (\text{A.5.1})
\end{aligned}$$

$\text{Var}(\hat{\alpha}_0)$ の主要項のみ整理して, $\text{AVar}(\hat{\alpha}_0)$ とすると,

$$\begin{aligned}
\text{AVar}[\hat{\alpha}_0] &\approx \frac{(4+5d)^2}{16h^{2d}} \frac{\mu_0}{n} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{4iii}}{n} \\
&+ \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \frac{\mu_{4iijj}}{n} - \frac{2(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{2ii}}{n} \\
&= \frac{(4+5d)^2}{16h^{2d}} \frac{h^d f}{n} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{\frac{h^{d+4}}{80} f}{n} \\
&+ \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i \neq j}^d \sum_{i \neq j}^d \frac{\frac{h^{d+4}}{144} f}{n} - \frac{2(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{\frac{h^{d+2}}{12} f}{n}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{16 + 40d + 25d^2}{16} + \frac{15^2 d}{80} + \frac{15^2 d(d-1)}{144} - \frac{2 \cdot 15(4 + 5d)d}{4 \cdot 12} \right) \frac{f}{nh^d} \\
&= \frac{4 + 5d}{4} \frac{f}{nh^d}.
\end{aligned} \tag{A.5.2}$$

同様に、各分散とその主要項を計算すると、

$$\begin{aligned}
\text{Var}[\hat{\alpha}_{1i}x_i] &= \text{Var} \left[\frac{12}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} S_{1i}x_i \right] = \left(\frac{12}{h^{d+2}} \right)^2 \text{Var} \left[\frac{n_D}{n} S_{1i} \right] x_i^2 \\
&= \frac{12^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_{2ii} - \mu_{1i}^2}{n} x_i^2.
\end{aligned} \tag{A.5.3}$$

$$\text{AVar}[\hat{\alpha}_{1i}x_i] \approx \frac{12^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_{2ii}}{n} x_i^2 = \frac{12^2}{h^{2d+4}} \frac{h^{d+2}}{12} \frac{f}{n} x_i^2 = \frac{12f}{nh^{d+2}} x_i^2. \tag{A.5.4}$$

$$\begin{aligned}
\text{Var}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] &= \text{Var} \left[\left(\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} \right) x_i^2 \right] \\
&= \left(\frac{180}{h^{d+4}} \right)^2 \text{Var} \left[\frac{n_D}{n} S_{2ii} \right] x_i^4 + \left(\frac{15}{h^{d+2}} \right)^2 \text{Var} \left[\frac{n_D}{n} \right] x_i^4 \\
&\quad - 2 \frac{180}{h^{d+4}} \frac{15}{h^{d+2}} \text{Cov} \left[\frac{n_D}{n} S_{2ii}, \frac{n_D}{n} \right] x_i^4 \\
&= \frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iii} - \mu_{2ii}^2}{n} x_i^4 + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n} x_i^4 \\
&\quad - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \frac{\mu_{2ii} - \mu_0 \mu_{2ii}}{n} x_i^4.
\end{aligned} \tag{A.5.5}$$

$$\begin{aligned}
\text{AVar}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] &\approx \frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iii}}{n} x_i^4 + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_0}{n} x_i^4 - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \frac{\mu_{2ii}}{n} x_i^4 \\
&= \frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{h^{d+4}}{80} \frac{f}{n} x_i^4 + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{h^d f}{n} x_i^4 - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \frac{h^{d+2}}{12} \frac{f}{n} x_i^4 \\
&= \left(\frac{180^2}{80} + 15^2 - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{12} \right) \frac{f}{nh^{d+4}} x_i^4 = \frac{180f}{nh^{d+4}} x_i^4.
\end{aligned} \tag{A.5.6}$$

$$\begin{aligned}
\text{Var}[\hat{\alpha}_{2ij}x_i x_j] &= \text{Var} \left[\frac{144}{2h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ij}x_i x_j \right] = \text{Var} \left(\frac{144}{2h^{d+4}} \right)^2 \left[\frac{n_D}{n} S_{2ij} \right] x_i^2 x_j^2 \\
&= \frac{144^2}{2^2 h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iijj} - \mu_{2ij}^2}{n} x_i^2 x_j^2.
\end{aligned} \tag{A.5.7}$$

$$\begin{aligned}
\text{AVar}[\hat{\alpha}_{2ij}x_i x_j] &\approx \frac{144^2}{2^2 h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iijj}}{n} x_i^2 x_j^2 = \frac{144^2}{2^2 h^{2d+8}} \frac{h^{d+4}}{144} \frac{f}{n} x_i^2 x_j^2 \\
&= \frac{144f}{2^2 n h^{d+4}} x_i^2 x_j^2.
\end{aligned} \tag{A.5.8}$$

$$\begin{aligned}
\text{Cov}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2, \hat{\alpha}_{2jj}x_j^2] &= \text{E}[(\hat{\alpha}_{2ii} - \text{E}[\hat{\alpha}_{2ii}])(\hat{\alpha}_{2jj} - \text{E}[\hat{\alpha}_{2jj}])] x_i^2 x_j^2 \\
&= \text{E} \left[\left(\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} - \frac{180}{h^{d+4}} \mu_{2ii} + \frac{15}{h^{d+2}} \mu_0 \right) \right. \\
&\quad \cdot \left. \left(\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2jj} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} - \frac{180}{h^{d+4}} \mu_{2jj} + \frac{15}{h^{d+2}} \mu_0 \right) \right] x_i^2 x_j^2 \\
&= \text{E} \left[\frac{180^2}{h^{2d+8}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2ii} S_{2jj} - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2ii} \right. \\
&\quad \left. - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2jj} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 \mu_0 \right] x_i^2 x_j^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{180^2}{h^{2d+8}} \mu_{2jj} \frac{n_D}{n} S_{2ii} + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_0 \frac{n_D}{n} S_{2ii} \\
& - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2jj} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_{2jj} \frac{n_D}{n} \\
& - \frac{15^2}{h^{2d+4}} \mu_0 \frac{n_D}{n} - \frac{180^2}{h^{2d+8}} \mu_{2ii} \frac{n_D}{n} S_{2jj} + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_{2ii} \frac{n_D}{n} \\
& + \frac{180^2}{h^{2d+8}} \mu_{2ii} \mu_{2jj} - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_0 \mu_{2ii} + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_0 \frac{n_D}{n} S_{2jj} \\
& - \left. \frac{15^2}{h^{2d+4}} \mu_0 \frac{n_D}{n} - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \mu_0 \mu_{2jj} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \mu_0^2 \right\} x_i^2 x_j^2 \\
& = \left\{ \frac{180^2}{h^{2d+8}} \left(\frac{\mu_{4iijj} + n \mu_{2ii} \mu_{2jj} - \mu_{2ii} \mu_{2jj}}{n} \right. \right. \\
& - \mu_{2jj} \mu_{2ii} - \mu_{2ii} \mu_{2jj} + \mu_{2ii} \mu_{2jj}) \\
& - \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(- \frac{\mu_{2ii} + n \mu_0 \mu_{2ii} - \mu_0 \mu_{2ii}}{n} + \mu_0 \mu_{2ii} \right. \\
& - \left. \frac{\mu_{2jj} + n \mu_0 \mu_{2jj} - \mu_0 \mu_{2jj}}{n} \right. \\
& + \left. \mu_{2jj} \mu_0 + \mu_{2ii} \mu_0 - \mu_0 \mu_{2ii} + \mu_0 \mu_{2jj} - \mu_0 \mu_{2jj} \right) \\
& + \left. \frac{15^2}{h^{2d+4}} \left(\frac{\mu_0 + n \mu_0^2 - \mu_0^2}{n} - \mu_0^2 - \mu_0^2 + \mu_0^2 \right) \right\} x_i^2 x_j^2 \\
& = \left\{ \frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iijj} - \mu_{2ii} \mu_{2jj}}{n} \right. \\
& + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(- \frac{\mu_{2ii} - \mu_0 \mu_{2ii}}{n} - \frac{\mu_{2jj} - \mu_0 \mu_{2jj}}{n} \right) \\
& + \left. \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n} \right\} x_i^2 x_j^2. \tag{A.5.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{ACov} [\hat{\alpha}_{2ii} x_i^2, \hat{\alpha}_{2jj} x_j^2] & \approx \left\{ \frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{\mu_{4iijj}}{n} + \frac{180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \left(- \frac{\mu_{2ii}}{n} - \frac{\mu_{2jj}}{n} \right) + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{\mu_0}{n} \right\} x_i^2 x_j^2 \\
& = \left(\frac{180^2}{h^{2d+8}} \frac{h^{d+4}}{144} f - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{h^{2d+6}} \frac{h^{d+2}}{12} f + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{h^d f}{n} \right) x_i^2 x_j^2 \\
& = \left(\frac{180^2}{144} - \frac{2 \cdot 180 \cdot 15}{12} + 15^2 \right) \frac{f}{n h^{d+4}} x_i^2 x_j^2 = 0. \tag{A.5.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Cov} [\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2] & = \text{E} [(\hat{\alpha}_0 - \text{E}[\hat{\alpha}_0])(\hat{\alpha}_{2ii} - \text{E}[\hat{\alpha}_{2ii}])] x_i^2 \\
& = \text{E} \left[\left(\frac{4 + 5d}{4h^d} \frac{n_D}{n} - \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii} \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{4 + 5d}{4h^d} \mu_0 + \frac{15}{h^{d+2}} \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \right) \right. \\
& \cdot \left. \left(\frac{180}{h^{d+4}} \frac{n_D}{n} S_{2ii} - \frac{15}{h^{d+2}} \frac{n_D}{n} - \frac{180}{h^{d+4}} \mu_{2ii} + \frac{15}{h^{d+2}} \mu_0 \right) \right] x_i^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E \left[\frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2ii} - \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 \right. \\
&- \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \mu_{2ii} \frac{n_D}{n} + \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \mu_0 \frac{n_D}{n} \\
&- \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \sum_{i=1}^d \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2ii} S_{2jj} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \left(\frac{n_D}{n} \right)^2 S_{2ii} \\
&+ \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii} \mu_{2jj} - \frac{15^2}{h^{2d+4}} \mu_0 \sum_{i=1}^d \frac{n_D}{n} S_{2ii} \\
&- \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \mu_0 \frac{n_D}{n} S_{2ii} + \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \mu_0 \frac{n_D}{n} \\
&+ \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \mu_0 \mu_{2ii} - \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \mu_0^2 \\
&+ \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \frac{n_D}{n} S_{2jj} - \frac{15^2}{h^{2d+4}} \frac{n_D}{n} \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \\
&- \left. \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \mu_{2jj} + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \mu_0 \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \right] x_i^2 \\
&= \left\{ \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \left(\frac{\mu_{2ii} + n\mu_0\mu_{2ii} - \mu_0\mu_{2ii}}{n} \right. \right. \\
&- \mu_0\mu_{2ii} - \mu_0\mu_{2ii} + \mu_0\mu_{2ii}) \\
&+ \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \left(-\frac{\mu_0 + n\mu_0^2 - \mu_0^2}{n} + \mu_0^2 + \mu_0^2 - \mu_0^2 \right) \\
&+ \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \left(-\frac{\mu_{4iiii} + n\mu_{2ii}^2 - \mu_{2ii}^2}{n} \right. \\
&- \left. \sum_{i \neq j}^d \frac{\mu_{4iijj} + n\mu_{2ii}\mu_{2jj} - \mu_{2ii}\mu_{2jj}}{n} \right. \\
&+ \mu_{2ii}^2 + \sum_{i \neq j}^d \mu_{2ii}\mu_{2jj} + \mu_{2ii}^2 + \sum_{i \neq j}^d \mu_{2ii}\mu_{2jj} - \mu_{2ii}^2 - \sum_{i \neq j}^d \mu_{2ii}\mu_{2jj} \Big) \\
&+ \frac{15^2}{h^{2d+4}} \left(\sum_{i=1}^d \frac{\mu_{2ii} + n\mu_0\mu_{2ii} - \mu_0\mu_{2ii}}{n} \right. \\
&- \left. \mu_0 \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} - \mu_0 \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} + \mu_0 \sum_{i=1}^d \mu_{2ii} \right) \Big\} x_i^2 \\
&= \left\{ \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \frac{\mu_{2ii} - \mu_0\mu_{2ii}}{n} - \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \frac{\mu_0 - \mu_0^2}{n} \right. \\
&- \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \left(\frac{\mu_{4iiii} - \mu_{2ii}^2}{n} + \sum_{i \neq j}^d \frac{\mu_{4iijj} - \mu_{2ii}\mu_{2jj}}{n} \right) \\
&+ \left. \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{2ii} - \mu_0\mu_{2ii}}{n} \right\} x_i^2. \tag{A.5.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{ACov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] &\approx \left\{ \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \frac{\mu_{2ii}}{n} - \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \frac{\mu_0}{n} \right. \\
&\quad \left. - \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \left(\frac{\mu_{4iiii}}{n} + \sum_{i \neq j}^d \frac{\mu_{4iijj}}{n} \right) + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{\mu_{2ii}}{n} \right\} x_i^2 \\
&= \left\{ \frac{(4+5d)180}{4h^{2d+4}} \frac{h^{d+2}}{12} \frac{f}{n} - \frac{(4+5d)15}{4h^{2d+2}} \frac{h^d f}{n} \right. \\
&\quad \left. - \frac{15 \cdot 180}{h^{2d+6}} \left(\frac{h^{d+4}}{80} f + \sum_{i \neq j}^d \frac{h^{d+4}}{144} f \right) + \frac{15^2}{h^{2d+4}} \sum_{i=1}^d \frac{h^{d+2}}{12} \frac{f}{n} \right\} x_i^2 \\
&= \left\{ \frac{(4+5d)180}{4 \cdot 12} - \frac{(4+5d)15}{4} \right. \\
&\quad \left. - 15 \cdot 180 \left(\frac{1}{80} + \frac{d-1}{144} \right) + \frac{15^2 d}{12} \right\} \frac{f}{nh^{d+2}} x_i^2 \\
&= -\frac{15f}{nh^{d+2}} x_i^2. \tag{A.5.12}
\end{aligned}$$

これらを $B_D = [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}]$ 区間で積分する：

$$\begin{aligned}
\text{AIVar}[\hat{\alpha}_0] &= \int_{B_D} \frac{4+5d}{4} \frac{f}{nh^d} d\mathbf{x} \\
&= \frac{4+5d}{4} \frac{f}{n}. \tag{A.5.13}
\end{aligned}$$

$$\text{AIVar}[\hat{\alpha}_{1i}x_i] = \int_{B_D} \frac{12f}{nh^{d+2}} x_i^2 d\mathbf{x} = \frac{12f}{nh^{d+2}} \frac{h^{d+2}}{12} = \frac{f}{n}, \tag{A.5.14}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^d \text{AIVar}[\hat{\alpha}_{1i}x_i] = \sum_{i=1}^d \frac{f}{n} = d \cdot \frac{f}{n}. \tag{A.5.15}$$

$$\begin{aligned}
\text{AIVar}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] &= \int_{B_D} \frac{180f}{nh^{d+4}} x_i^4 d\mathbf{x} \\
&= \frac{180f}{nh^{d+4}} \frac{h^{d+4}}{80} \\
&= \frac{9f}{4n}, \tag{A.5.16}
\end{aligned}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^d \text{AIVar}[\hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] = \sum_{i=1}^d \frac{9f}{4n} = \frac{9d}{4} \frac{f}{n}. \tag{A.5.17}$$

$$\begin{aligned}
\text{AIVar}[\hat{\alpha}_{2ij}x_i x_j] &= \int_{B_D} \frac{144f}{2^2 h^{d+4}} x_i^2 x_j^2 d\mathbf{x} = \frac{144f}{2^2 nh^{d+4}} \frac{h^{d+4}}{12^2} \\
&= \frac{f}{2^2 n}, \tag{A.5.18}
\end{aligned}$$

$$\therefore 2 \sum_{i < j}^d \sum_{i < j}^d \text{AIVar}[\hat{\alpha}_{2ij}x_i x_j] = 2d(d-1) \frac{f}{2^2 n} = \frac{d^2 - d}{2} \frac{f}{n}. \tag{A.5.19}$$

$$\text{AICov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii}x_i^2] = \int_{B_D} -\frac{15f}{nh^{d+2}} x_i^2 d\mathbf{x} = -\frac{15f}{nh^{d+2}} \frac{h^{d+2}}{12} = -\frac{5f}{4n}, \tag{A.5.20}$$

$$\therefore 2 \sum_{i=1}^d \text{AICov}[\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_{2ii} x_i^2] = 2 \sum_{i=1}^d \cdot \left(-\frac{5}{4} \frac{f}{n} \right) = -\frac{5d}{2} \frac{f}{n}. \quad (\text{A.5.21})$$

参 考 文 献

- Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer.
- Fukunaga, K. (1972). *Introduction to Statistical Pattern Recognition*, Academic Press.
- Good, I. J. and Gaskins, R. A. (1980). Density estimation and bump-hunting by the penalized likelihood method exemplified by scattering and meteorite data, *J. Am. Stat. Assoc.*, **75**, 42–73.
- Jones, M. C. and Foster, P. J. (1993). Generalized jackknifing and higher order kernel, *J. Nonparametr. Stat.*, **3**, 81–94.
- Jones, M. C. and Sibson, R. (1987). What is projection pursuit?, *J. Roy. Stat. Soc., Ser. B*, **15**, 1–36.
- Minnotte, M. C. and Scott, D. W. (1993). The mode tree: atool for visualization of nonparametric density features, *J. Comput. Graph. Stat.*, **2**, 51–68.
- Sagae, M. and Scott, D. W. (1997). *Bin Interval Method of locally Addaptive Nonparametric Density Estimation*, Technical Report, Department of Statistics, Rice University.
- 寒河江雅彦, デビッド・スコット, 草野直人 (2006). *A Multivariate Polynomial Histogram by the Method of Local Moments*, Proceedings of the 8th Conference on Nonparametric Statistical Analysis and its Related field, 14–33, in Japanese.
- Scott, D. W. (1992). *Multivariate Density Estimation Theory, Practice, and Visualization*, John Wiley & Sons, Inc.
- Silverman, B. W. (1986). *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*, Chapman and Hall.
- Simonoff, J. S. (1998). *Smoothing Methods in Statistics*, Springer-Verlag.
- Wand, M. P. (1997). Data-based choice of histogram bin width, *Am. Stat.*, **51**, 59–64.
- Wand, M. P. and Jones, M. C. (1994). Multivariate plug-in bandwidth selection, *Comp. Stat.*, **9**, 97–116.
- Wand, M. P. and Jones, M. C. (1995). *Kernel Smoothing*, Chapman & Hall.