補足１－10 カテゴリ判断の法則による分析（最尤法）

式(1.24)で与えられる対数尤度関数l

$$l = \log L = \sum_{i=}^{N} \sum_{g=1}^{m} n_{ig} \log p_{ig} \tag{1.24}$$

の最大化を準ニュートン法（Davidon-Fletcher-Powell Method）で行う。このとき、カテゴリ境界の順序制約

$$c_1 < c_2 < \cdots < c_{m-1} \quad \text{(附 1.10.1)}$$

に対応するため、次式で与えられる変数変換を用いる。

$$c_1 = 0 \qquad \text{（制約条件）}$$

$$c_2 = s_1^2$$

$$c_3 = s_1^2 + s_2^2$$

$$\cdots$$

$$c_{m-1} = s_1^2 + s_2^2 + \cdots + s_{m-2}^2$$

最小２乗法のときは、累積比率データ$\sum_{h=1}^{g} n_{ih} \Big/ \sum_{h=1}^{m} n_{ih}$と累積分布関数$\Phi(c_g - \mu_i)$との差を小さくするという目的関数だったので（式（1.21））、制約条件（式（附 1.10.1））を付けずに極値探索を行っても問題はない。

式(1.24)の最大化を、変数s_jおよびμ_iに関して行う。

このとき、偏導関数は次式で与えられる。

$$\frac{\partial l}{\partial \mu_i} = \sum_{g=1}^{m} n_{ig} \cdot \frac{1}{p_{ig}} \cdot \frac{\partial p_{ig}}{\partial \mu_i}$$

$$\frac{\partial l}{\partial s_k} = \sum_{i=}^{N} \sum_{g=1}^{m} n_{ig} \cdot \frac{1}{p_{ig}} \cdot \frac{\partial p_{ig}}{\partial s_k}$$

ここで、$\partial p_{ig}/\partial \mu_i$ および$\partial p_{ig}/\partial s_k$ は次式で与えられる。

$g=1$のとき、

$$\frac{\partial p_{i1}}{\partial \mu_i}=\frac{\partial}{\partial \mu_i}\Phi(c_1-\mu_i)=-\phi_0(c_1-\mu_i)$$

$1<g<m$のとき、

$$\frac{\partial p_{ig}}{\partial \mu_i}=\frac{\partial}{\partial \mu_i}\{\Phi(c_g-\mu_i)-\Phi(c_{g-1}-\mu_i)\}$$

$$=\phi_0(c_g-\mu_i)\times(-1)-\phi_0(c_{g-1}-\mu_i)\times(-1)$$

$$=\phi_0(c_{g-1}-\mu_i)-\phi_0(c_g-\mu_i)$$

$g=m$のとき、

$$\frac{\partial p_{im}}{\partial \mu_i}=\frac{\partial}{\partial \mu_i}\{1-\Phi(c_{m-1}-\mu_i)\}=\phi_0(c_{m-1}-\mu_i)$$

$g\le k$のとき、

$$\frac{\partial p_{ig}}{\partial s_k}=0$$

$g=k+1$のとき、

$$\frac{\partial p_{ig}}{\partial s_k}=\frac{\partial}{\partial c_{k+1}}\{\Phi(c_{k+1}-\mu_i)-\Phi(c_k-\mu_i)\}\cdot\frac{\partial c_{k+1}}{\partial s_k}$$

$$=\phi_0(c_{k+1}-\mu_i)\cdot 2k$$

$g>k+1$のとき、

$$\frac{\partial p_{ig}}{\partial s_k}=\frac{\partial}{\partial s_k}\{\Phi(c_g-\mu_i)-\Phi(c_{g-1}-\mu_i)\}$$

$$=\frac{\partial}{\partial s_k}\Phi(c_g-\mu_i)-\frac{\partial}{\partial s_k}\Phi(c_{g-1}-\mu_i)$$

$$=\frac{\partial}{\partial c_g}\Phi(c_g-\mu_i)\cdot\frac{\partial c_g}{\partial s_k}-\frac{\partial}{\partial c_{g-1}}\Phi(c_{g-1}-\mu_i)\cdot\frac{\partial c_{g-1}}{\partial s_k}$$

$$=\phi_0(c_g-\mu_i)\cdot 2s_k-\phi_0(c_{g-1}-\mu_i)\cdot 2s_k$$

適合度の判断は、飽和モデルと比較して行う。飽和モデルは、確率 p_{ig} について次式

$$\sum_{g=1}^{m} p_{ig} = 1 \qquad \text{（附 1.10.2）}$$

以外の制約をおかない多項分布モデルを用いる。上記の制約条件下での式（1.24）の最大化を考えるために、ラグランジュ乗数（Lagrange's multipliers; Apostol, 1977, p. 381）λ_i を用いて次式を考える。

$$l_1 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{g=1}^{m} n_{ig} \log p_{ig} - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left(\sum_{g=1}^{m} p_{ig} - 1 \right)$$

上式を偏微分して次式を得る。

$$\frac{\partial l_i}{\partial p_{ig}} = \frac{n_{ig}}{p_{ig}} - \lambda_i$$

上式を０とおいて次式を得る。

$$n_{ig} = \lambda_i p_{ig} \qquad \text{（附 1.10.3）}$$

和をとって次式となる。

$$\sum_{g=1}^{m} n_{ig} = \lambda_i \sum_{g=1}^{m} p_{ig}$$

上式と制約条件（附 1.10.2）より、次式を得る。

$$\sum_{g=1}^{m} n_{ig} = \lambda_i$$

上式と式（附 1.10.3）より、次式を得る。

$$p_{ig} = \frac{n_{ig}}{\lambda_i} = \frac{n_{ig}}{\sum_{h=1}^{m} n_{ih}}$$

飽和モデルの場合の自由度 df_{sat} は、制約条件（附 1.10.2）があるので、

$$df_{sat} = (m-1)N$$

である。

　カテゴリ判断の法則のモデルの場合の自由度df_{cat}は、本節の場合の自由パラメタが、$c_g;\, g = 2,\cdots,m-1$、および$\mu_i;\, i = 1,\cdots,N$であるので、

$$df_{cat} = m - 2 + N$$

となる。