

$$\begin{aligned}
 g(T) &= \sum (\Delta^k T_i)^2, & h_1(S) &= \sum (\Delta^k S_i)^2, \\
 h_2(S) &= \sum \left(\sum_{j=0}^{p-1} S_{i-j} \right)^2, & h_3(S) &= \sum (\Delta^m S_i)^2, \\
 \Delta T_i &= T_i - T_{i-1}, & \Delta_p S_i &= S_i - S_{i-p},
 \end{aligned}$$

θ は必要なパラメータのベクトル, α, β, γ は正の値をとるパラメータ. $h_3(S)$ は BAYSEA では入っていない. 経済時系列のときにはいらぬが, ここで扱うのは体温のデータなので入れる. モデルの尤度を $f(y|\theta)$ とすると, $ABIC(d) = -2 \log \int f(y|\theta) \cdot \pi(\theta|d) d\theta$ となる. ハイパーパラメータ d の選択は, ABIC の値を最小にするものにする. パラメータをいろいろ変えて試してみる. 今までに次の様なことがわかった. ある患者の病期においては, リズムが平坦である. 日内の体温の最低値をとる時刻をみると, 正常なものに対して, 約 10 時間位の位相のずれがみられる. 即ち, 昼夜が逆転した状態に近づいている. 寛解期には正常にもどっている. これらのデータは, 国立精神・神経センター高橋清久部長によるものである. 今年 4 月から, 共同研究でさらに詳しく検討する予定である.

参 考 文 献

- [1] 高橋清久 (1981). 躁うつ病に対する時間生物学的接近.
- [2] 高橋清久 (1985). 疾患と生体リズム.
- [3] 高橋清久・山崎 潤 (1986). 時間生物学的研究.
- [4] 永山治男 他 (1986). 口内温リズムよりみたうつ病のリズム障害.
- [5] Akaike, H., Ishiguro, M. (1980). BAYSEA, C.S.M., No. 13.
- [6] Akaike, H. (1983). Statistical Inference and Measurement of Entropy.

構造のある離散スプラインのあてはめ

上 田 澄 江

観測値から回帰曲線を推定する問題を考える. ここでは推定すべき曲線の構造, 例えば単調性, 非負性, 凸性等があらかじめ分かっている場合にそれらをモデルに簡単に組み込むことによって, より確実に構造を反映した曲線を推定する.

今, 区間 $[a, b]$ に m 個の観測値 (x_i, y_i) が得られたとき次のような回帰モデルを考える.

$$(1) \quad y_i = E g_j(f) + \epsilon_i \quad (i=1, \dots, m, j=1, \dots, n)$$

ここで, n は m より十分大きくとる. また y_i の誤差 ϵ_i は互いに独立で $N(0, \sigma^2)$ に従い, E は y_i と g_j との対応を表す行列, $g(f)$ は推定すべき関数 f をパラメータにもつ関数とする. すなわち

$$(2) \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \dots \end{pmatrix} : m \times n \text{ 行列, } m: \text{ データ数, } n: \text{ メッシュ数}$$

$$g = T p q - f_{n+2} \cdot \mathbf{1} - f_{n+3} \cdot \mathbf{i}$$

$$p = \left(e^{f^1} / \sum_{j=1}^n e^{f^j}, \dots, e^{f^n} / \sum_{j=1}^n e^{f^j} \right)^t, \quad T: n \times n \text{ の構造を表す行列,}$$

$$q = e^{-f^{n+1}}, \quad \mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^t, \quad \mathbf{i} = (1, 2, \dots, n)^t$$

である. 上記 (2) 式は曲線が凸性または凹性をもつ場合である. 非負の場合には右辺第 2, 3 項を無視し,

単調性をもつ場合には第3項を無視する. 行列 T は非負, 単調増加, 凸性を表すときにはそれぞれ

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & \cdot \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 1 & 1 & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ n & n-1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

の形をしている. 凹関数, 減少から増加へ転じる関数等行列 T によってかなり自在に表現することができる.

関数 f の平滑化として3次の離散スプラインを用いると(1)の回帰関数 g を推定する問題は,

$$R^2(f) = \|y - Eg(f)\|^2 + \alpha^2 \|Df\|^2$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot \\ & & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} : (n-2) \times n \text{ 行列}$$

とおけば, $\text{Min}_f R^2(f)$ となる f^* を求める非線形最小2乗問題となる. 従ってこれを Gauss-Newton 法によって解き, $\text{ABIC}(\alpha)$ を定義することにより最適な関数を得る.

下に掲げた図1, 2は凸性のあるデータに α を固定して非負条件だけをつけた時と凸性を構造に組み込んだ場合, 図3, 4は正規分布より上部にある関数を推定した時の最適な関数と α が小さい場合との相違を示す.

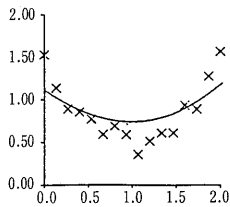


図1. data=16
mesh=155
 $\alpha=400$

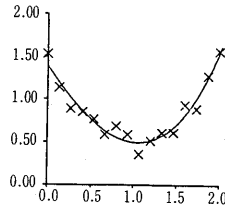


図2. data=16
mesh=155
 $\alpha=400$

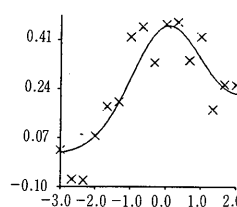


図3. data=16
mesh=155
 $\alpha=396.8$

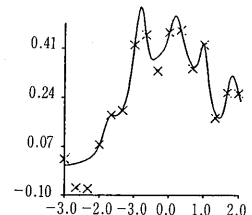


図4. data=16
mesh=155
 $\alpha=0.1$

非線形方程式系の数値解の精度推定について

土 谷 隆

伊理によって提案された“高速微分法” ([1]) は, 従来数値微分に頼らざるを得なかったような大規模な方程式の Jacobi 行列や関数の勾配, Hesse 行列を高速にしかも正確に計算し, 同時に関数値の丸め誤差推定値を得るための手法であり, 非線形方程式系, 非線形最適化問題や常微分方程式系の解法などに役立つことが期待されている.

Newton 法系統の算法によって n 変数の非線形方程式系 $f_i(x)=0$ ($i=1, \dots, n$) の解を求める際にも, この手法は (1) 反復に際して正確な Jacobi 行列を利用でき, (2) 関数値の丸め誤差の大きさのシャープな上からの評価 $\overline{\Delta f}$ を利用して, “ $|f_i(x)| \leq \overline{\Delta f}_i(x)$ ($i=1, \dots, n$) が成立した時に反復を停止する” といった, 数値解析的に見て合理的な停止条件を採用できる, 等の利点をもたすことが, 実用的な問題