い場合は初期値を変え収束判定基準を1桁ずつゆるめていく．

一般に，重根や近接根があると，解の精度が下がり，計算時間もかかる．時系列の例では，多項式の次数 n が大きいと，根が密集して近接根が多くなる．近接根があっても精度が悪くならないような方法を用いなければならない．この場合 McAuley 法を数値計算の本に出ているままの形ではなく，各々の問題にあうように修正して利用することによって良い結果が得られるというのが今回の結論である．

非線型最適化プログラム UCOP 1 について

上　田　澄　江

非線型で十分になめらかな函数 $f(x)$ の極小値を求めるプログラム UCOP 1 を開発した．

一般に非線型最適化を実現するために次の手法がとられる．

μ	EX	I	DFP	INV-DFP	BFGS	INV-BFGS	GILL-M	SSR	PSB
小	11	I	8	8	6	6	6	6	18
↑	12	I	6	6	6	6	6	6	7
	13	I	8	8	8	11	8	10	13
↓	14	I	26	23	23	24	20	23	446
大	15	I	39	59	38	35	50	32	313
小	21	I	7	6	6	6	6	7	9
↑	22	I	6	6	7	7	6	6	12
	23	I	13	13	10	10	10	10	11
↓	24	I	29	32	19	25	20	17	251
大	25	I	29	92	29	41	28	30	306
小	31	I	6	6	6	8	6	6	7
↑	32	I	7	6	6	6	7	8	8
	33	I	8	12	9	9	10	10	13
↓	34	I	62	79	34	27	26	20	439
大	35	I	37	308	38	37	38	38	279
⋮	41	I	6	6	7	6	6	6	8
	42	I	8	8	8	8	8	11	8
	43	I	82	78	27	28	27	25	239
	44	I	438	42	43	37	26	30	345
	45	I	368	43	44	32	50	33	291
	51	I	6	6	6	7	7	6	11
	52	I	10	9	9	10	9	10	10
	53	I	31	28	23	26	23	21	32
	54	I	40	40	43	29	47	29	356
	55	I	33	36	38	42	39	45	299
	61	I	6	7	6	6	6	6	8
	62	I	8	9	8	7	7	9	8
	63	I	60	60	28	29	28	26	79
	64	I	439	260	41	46	46	26	290
	65	I	357	199	43	42	47	43	292
	71	I	7	7	8	8	11	7	9
	72	I	13	13	13	13	13	14	12
	73	I	437	439	45	30	43	22	280
	74	I	133	138	48	× 8	59	39	294
	75	I	97	129	47	54	***	43	289
	81	I	7	7	7	7	7	11	9
	82	I	16	21	14	14	14	15	19
	83	I	434	288	35	32	32	21	314
	84	I	122	68	43	45	47	39	298
	85	I	344	47	27	23	37	60	299
	91	I	7	7	8	7	7	7	8
	92	I	10	10	11	11	11	13	16
	93	I	421	422	41	38	38	36	326
	94	I	96	56	40	× 9	33	52	289
	95	I	316	145	58	× 9	50	48	282

表．数値は収束するまでに要した反復回数．×印は失敗，＊＊＊は overflow で中断された場合を示す．EX の番号は大きくなる程解からより離れた初期値が選択されている．

$$\begin{cases} H^k d^k = -\nabla f^k \\ x^{k+1} = x^k + \lambda^k d^k \\ \lambda^k = \arg \underset{\lambda}{\text{minimize}}\ f(x^k + \lambda d^k) \\ H^{k+1} = H^k + \triangle H^k \end{cases}$$

ここで k は反復回数，quasi-Newton 法では H の計算の手間を省くために $H^0 = I$ から出発して，$s = x^{k+1} - x^k$, $y = \nabla f^{k+1} - \nabla f^k$ の情報を利用して H^k を更新し，より良い近似行列 H^{k+1} を得る．この更新方法としてよく知られている DFP, BFGS, DFP 逆，BFGS 逆，Gill-Murray, SSR, PSB 公式を用いて種々の問題について実験を行った．その結果 UCOP 1 では一般的に性能がよいとされ又実際にも一様によい動きを示した BFGS 公式を採用しているが，Gill-Murray, SSR 公式も同様に比較的安定したよい結果を示した．又テスト問題の殆どに対して遅い収束を示していた PSB 公式が 1 問題（2, 3, 5 次の Rosenbrock の函数について実験）にだけ際立ったよい結果をもたらしていたのが興味深い．

UCOP 1 においては，ユーザーは函数値 f とその一次微分 ∇f の値を計算するサブルーチンを用意するのが望ましい．もし一次微分が不可能ならば 2 倍精度で計算をするのが安全である．Example では J. J. McKeown（1975）が提案しているテスト函数で前述の 7 公式について比較した．（前頁の表に示す）

Example. $f(x) = \min \sum_{i=1}^{10} g_i^2$ を求める．

$$x = (x_1, \cdots, x_5)^t$$

$$g = (g_1, \cdots, g_{10})^t = A + Gx + \frac{1}{2}\mu x^t BxD$$

$$\mu = 10^{-4},\ 10^{-2},\ 1,\ 10^2,\ 10^4$$

A, D: 10 次のベクトル，G, B: 10×5, 5×5行列

幾何学的対称性の統計的分布

伊　藤　栄　明

幾何学的対称性を群論をもちいて記述する方法はよく知られている．3 次元空間における周期的な構造について対称性を記述する 230 個の群があり，それらは空間群と呼ばれている．結晶における原子の配列を解析する際に空間群はもちいられる．結晶の対称性は 230 の空間群のいずれかによりあらわされる．したがって空間群を値としてとる統計的分布が考えられる．

対称性の統計的分布について，球の充塡あるいは楕円球の充塡にもとづいたモデルが考えられる．たとえば等大球の立方稠密充塡と六方稠密充塡のいずれになるかということについてある仮定のもとでの確率を議論することは興味ある幾何確率の問題と思われる．ここではこのような幾何学的構造を直接考えずに群とその表現にもとづいたモデルについて議論する．

幾何学的対称性を平行移動の操作を考慮に入れずに記述する点群といわれている 32 個の群がある．それらは定点 O を通る軸による回転及び定点 O についての反転からなる有限群である．点群は結晶の形態を記述する際にもちいられる．点群における対称操作に平行移動の操作を組みあわせたものが空間群であり，各空間群は 32 個の点群のいずれかにもとづいて構成されている．ここでは点群についての統計的分布を考える．

Nowacki, Matsumoto and Edenharter（1967）は結晶を物理的，化学的な性質より分類し，各分類における空間群の統計的データを示した．ここでは彼等の分類における酸化物と水酸化物からなる分類 III について点群についての分布を議論する．多く存在する群は，群として生成されやすいということと考え，生成されやすさということについてのモデルをつくる．分類 III の結晶の点群はすべて C_{2h} と呼ばれている点群を部分群としてもつ．C_{2h} にランダムに対称操作が加わって得られたのが分類 III の結晶の