

成するが、標準化外積率間の単純な演算はそれに対応した別種の記述統計量の系を与えることが出来る。これらの統計量について、Gibrat 分布や Mardia 第 2 種パレート分布が良い例証を与える。

参 考 文 献

- [1] Taguchi, T. (1981). On a multiple Gini's coefficient and some concentrative regressions, *Metron*, Vol. XXXIX-N, 1-2.
- [2] 田口時夫 (1984). 経済分析と多次元解析 —— 新しい計量空間の形成と展望 ——.
- [3] Taguchi, T. (1987). On the structure of multivariate concentration —— Some relationships among the concentration surface and two variate mean difference and regressions —— *Comput. Statist. Data Anal.*, 6, North-Holland, Amsterdam-New York.

ライントランセクトサンプリング

岸 野 洋 久

生物、生態学における野外調査では、しばしばライントランセクトサンプリングが行われる。トラックラインを決めてその上を走り、そこから発見されたものをサンプリングして行く。対象が不均質に分布しているとき各場所で密度に比例してサンプリングされるので、偏りのない推定が保証される。予め設定された幅の中をすべて調べるストリップトランセクトに比し実施が容易であり、船や飛行機、車による調査に適している。

これをトラックラインの決定を第一段とし、そこからの発見を第二段とする二段抽出とみると、その特性、注意すべき問題点が整理される。第二段の抽出率は未知であるが、多くの船を用いた大規模調査から対象の地理的分布を推定する場合や、資源の経年変化を見る場合には、この抽出率の船間比較が必要となる。トラックラインからの横距離別の発見確率を $g(y)$ とすると、最終的な抽出率は、 $2L \cdot \int_0^2 g(y) dy / A$ である。ここで、 L はトラックラインの長さ、 A は対象の分布する面積である。 $g(0)=1$ が保証される場合は発見の横距離分布からこれを知ることができる。そうでないときは二人の観察者が独立に観察し、二重発見率を調べるなど別に付加情報が必要となる (Kishino (1988)).

推定量の精度は第一次抽出単位 (部分トランセクト) の間の分散により評価される。資源密度 D の推定の場合、 $\text{var}(\hat{D}) = \sum_{i=1}^k L_i (\hat{D}_i - \hat{D})^2 / L(k-1)$ として評価される。 L_i, \hat{D}_i はそれぞれ i 番目の部分トランセクトの長さ及びその推定密度である。発見数が少ないときはジャックナイフ法を用いる。部分トランセクトをどの程度の大きさにするかは解析の際に事後的に決められる。系統抽出である為、これをパッチスケールより小さく取ると、部分トランセクト間で正の相関を持ち、分散を過小評価してしまう (Kishino (1987)).

参 考 文 献

- [1] Kishino, H. (1987). Notes on sampling design and evaluation of the survey of wildlife population in the contagious distribution, Paper SC/39/Mi 6 presented to the IWC Scientific Committee, June 1987.
- [2] Kishino, H., Kasamatu, F. and Toda, T. (1988). On double line transect method, *Rep. Int. Whal. Commn.*, Vol. 38 (in press).

組み合わせ的階層分類法における距離の性質

大 隅 昇

階層的分類法とは、分類対象間の距離 (一般には類似度・非類似度) にもとづく分類操作のことである。この種の分類法のいくつかの手法 (少なくとも 9 つの手法) は、クラスター生成過程における距離

の更新式を用いて統一的に表されることが知られている。いまあるクラスター C_i と C_j が結合されたとき、この結合によって得られたクラスター $(C_i \cup C_j)$ と、これ以外のクラスター $C_k (k \neq i, j)$ との更新距離は4つのパラメータ $(\alpha_i, \alpha_j, \beta, \gamma)$ とクラスター間の距離により、つぎのように与えられ、パラメータの値を変えることにより、複数の手法が表されることから組み合わせ的算法という ([2], [4])。

$$d(C_i \cup C_j, C_k) \equiv \alpha_i d(C_i, C_k) + \alpha_j d(C_j, C_k) + \beta d(C_i, C_j) + \gamma |d(C_i, C_k) - d(C_j, C_k)|$$

($i \neq j, k \neq i, j$)

(ここで、 $d(C_i, C_j) < d(C_i, C_k) < d(C_j, C_k)$)。

この算法でクラスターを作るとき、更新距離は明らかにもとの距離を保存せず、これを“距離のひずみ”といい、手法によってその挙動(ひずみの大きさや鎖状効果など)が異なることや階層構造の単調性(新しい結合距離はそれより前に作られたそれよりも大きいという距離空間の単調性)が崩れること(結合距離の逆転現象)などが知られていた([2], [3])。これらはいずれも実験的に観察されていたが、これを数理的に示すために、クラスター間の距離についてのある順序関係を用意し、これにより距離空間のひずみを、保存・拡大・縮小の3つに区分し、各手法がとりうる状態が、これらのいずれに相当するかを示した。これらは、DuBien らの結果の拡張でもある([1])。たとえば、群平均法は常に空間保存、最近隣法は縮小、最遠隣法は拡大であること、ワード法は従来言われていたこととは異なり、保存・拡大の混在、可変法は拡大・保存・縮小がパラメータのとりうる範囲によって異なること、などがすべて明らかになった。さらに、パラメータ $(\alpha_i, \alpha_j, \beta)$ の作る空間を考えると、各手法の相対的な位置関係が説明されるとともに、より一般的に保存・拡大・縮小となるための各パラメータの許容領域が示される。これらの結果を用いて、可変法が最近隣法、最遠隣法をも含むこと(したがってパラメータ γ は不要であること)、距離空間を保存の状態において、可変法と群平均法の性質を併せ持つような折衷型の新しい算法(調整型可変法)が考えられること、などを示した。

参 考 文 献

- [1] DuBien, J.L. and Warde, W.D. (1979). A mathematical comparison of the members of an infinite family of agglomerative clustering algorithms, *Canad. J. Statist.*, **7**, 29-38.
- [2] Lance, G.N. and Williams, W.T. (1967). A general theory of classificatory sorting strategies, I. Hierarchical systems, *Comput. J.*, **9**, 373-380.
- [3] Milligan, G.W. (1979). Ultrametric hierarchical clustering algorithms, *Psychometrika*, **44**, 343-346.
- [4] Williams, W.T. and Lance, G.N. (1977). Hierarchical classificatory methods, (eds. K. Enslein, A. Ralston and H.S. Wilf), *Statistical Methods for Digital Computers*, Vol. 3, Wiley, New York, 269-295.

分子動力学法における統計的諸問題

種 村 正 美

物質を形作る原子・分子のミクロなレベルから出発して、その物質の示す物理的性質を導き出すために計算機実験が行なわれる。その方法を大別するとモンテカルロ法と分子動力学法がある。分子動力学法は Newton の運動方程式を解いていくもので、モンテカルロ法と比較して確率・統計とは一見無縁のようであるが実は種々の統計的問題が潜んでいる。

われわれは分子動力学法による実験の信頼性に関係して現われるいくつかの問題点を整理し、実際に実験を行なうことによって検討した。その一つは計算精度の問題であるが、計算に用いる精度が1ワード32, 36 および 64 ビットの場合について、それぞれ同一の初期条件から出発して、ある時間ステップ進んだ時点で時間の進行方向を反転させて、どれくらい以前のミクロな状態が再現されるかを調べた。もしも数値誤差が存在しなければ、いくらでも元の径路を遡ることが出来るはずである。検討の結果、少