



図1.

$$25 - 4x_1^2 - x_2^2 \geq 0$$

のもとで、目的関数

$$f(x) = 0.5x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 7x_1 - 7x_2$$

を最小にする。初期値を $x_0 = (0.0, 0.0)$ とすると、 $f(x_0) = 0.0$ である。このとき、センタード・ニュートン法を用いて、最適解を求めてみた。反復回数は10回となり、解は $x^* = (2.0, 3.0)$ 、 $f(x^*) = -30.0$ となった。ニュートン方向の係数 α とセンタード方向の係数 β は図1のようになった。 α は解に近づくにつれ1.0に近づくが、逆に β は0.0に近づく。

センタード・ニュートン法を適用することにより、今迄パラメータを一つ一つ変えて計算していたことが、パラメータを変数に組み込むことにより、自動的に行えるようになった。またニュートン法によるよりも、反復回数が少なくてすんだ。

参 考 文 献

Hock, W. and Schittkowski, K. (1981). *Test Examples for Nonlinear Programming Codes*, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer, Berlin.
 田辺國士 (1990). Centered Newton method for nonlinear programming, 統計数理, 38, 119-120.

順序制約最小2乗法と、1次元非弾性衝突で生じる一様確率クラスタ

(客員) 慶應義塾大学 理工学部 渋谷 政 昭

直線上で等速運動をする N 個の質点がある。左から順に番号を付け、初期状態における第 n 点の位置を x_n 、質量を m_n 、速度を v_n とする ($n=1, \dots, N$)。もし $v_1 < \dots < v_N$ であれば質点同志衝突することなく点は次第に拡がるが、そうでなく第 $n, n+1$ 質点が衝突すると非弾性的であるために合体し、運動量は保存され、 $v_n = v_{n+1} = (m_n v_n + m_{n+1} v_{n+1}) / (m_n + m_{n+1})$ に変わるとする。最終的には、いくつかの粒子から成るクラスタがいくつかできる。

何が起こるかを理解するのに、 $\xi_n = \sum_{j=1}^n m_j$ 、 $\eta_n = \sum_{j=1}^n m_j v_j$ 、 $\xi_0 = \eta_0 = 0$ とおき、 $\xi\eta$ 平面上の点 $P_n = (\xi_n, \eta_n)$ 、 $n=0, 1, \dots, N$ を結ぶ折れ線を描くと、線分 $P_{n-1}P_n$ が第 n 質点の運動を示す。折れ線 $P_{n-1}P_nP_{n+1}$ が凸で第 $n, n+1$ 質点が衝突した結果は線分 P_nP_{n+1} となる。すべての可能な衝突が終わったときの結果は、このグラフの最初の形状により定まり、最初の点の位置 x_n によらない。ところで、このような解析は、順序制約のある重みつき最小2乗法と完全に一致している：データ y_n 、重み w_n 、 $n=1, \dots, N$ が与えられたとき $\sum_{n=1}^N w_n (y_n - \mu_n)^2$ を $\mu_1 \leq \dots \leq \mu_n$ の条件の下で最小にする (μ_1, \dots, μ_n) を求める。重み w_n と m_n 、データ y_n が v_n に、最適解 μ_n が最終速度に対応する。この解法は Pool-Adjacent-Violators

Algorithm と呼ばれていて、1960年頃に得られているものである。

PAVA で知られていることを拡張すると次の結果となる。「初速度 (v_1, \dots, v_N) がランダムで球面的 (spherical) な確率密度関数をもち質量が置換不変 (exchangeable) ならば、任意の位置にたいして、衝突が有限時間で終わり、 j 個の質点から成るクラスタが c_j 個 ($c_j \geq 0, \sum_{j=1}^N j c_j = N$) となる確率は $1 / \prod_{j=1}^N j^{c_j} c_j!$ となる。極限 $N \rightarrow \infty$ で、 $(c_j)_{j=1}^{\infty}$ は独立な平均 $1/j$ のポアソン分布となる。」

この結果は質点を区別していない。第 n 粒子が j 個の質点から成るクラスタは、速度の分布に依存して、計算は難しい。数値実験と $N=3, 4$ の場合の計算によると、中央部分ほど大きなクラスタが生じやすい。

参 考 文 献

Sibuya, M., Kawai, T. and Shida, K. (1990). Equipartition of particles forming clusters by inelastic collisions, *Physica A*, **167**, 676-689.

統計データ解析センター

定量的・定性的データの成分分析による医学的分類応用

駒 澤 勉

今回はカテゴリカルデータについて成分分析による判別・予測分析の効用を心機能評価データで示した。

まずデータの総合化と分析法について、

[1] アイテム・カテゴリー・データの総合化

$$\langle \text{全体での総合量} \rangle = Y = X_1 + X_2 + \dots + X_m = \sum_{j=1}^m X_j$$

$$\langle \text{グループ } G_t \text{ での総合量} \rangle = Y^{(t)} = X_1^{(t)} + X_2^{(t)} + \dots + X_m^{(t)} = \sum_{j=1}^m X_j^{(t)} \quad (t=1, 2, \dots, T)$$

$$X_j = \sum_{k=1}^{I_j} \delta_{(jk)} x_{(jk)}$$

$$X_j^{(t)} = \sum_{k=1}^{I_j} \delta_{(jk)}^{(t)} x_{(jk)}$$

数量 $x_{(jk)}$ がアイテム・カテゴリー $C_{(jk)}$ に与える数量である。

ここで、

$$\delta_{(jk)} = \begin{cases} 1; & C_{(jk)} \text{ に該当} \\ 0; & C_{(jk)} \text{ に非該当} \end{cases}$$

$$\delta_{(jk)}^{(t)} = \begin{cases} 1; & \text{グループ } G_t, \text{ かつ } C_{(jk)} \text{ に該当} \\ 0; & \text{グループ } G_t, \text{ かつ } C_{(jk)} \text{ に非該当.} \end{cases}$$

[2] 判別・予測のための $C_{(jk)}$ への数量化方法

- (i) 数量化 II 類 … 相関比 η^2 の最大化による数量化 $HX = \eta^2 FX$ (医学データのように説明アイテム間 (X_j, X_k) に多くの従属関係があるときは利用できない。)
- (ii) 数量化 III 類 … 相関係数 r_{XY} の最大化による数量化 $FX = r_{XY}^2 GX$
- (iii) 主成分数量化 … 分散 σ_Y^2 の最大化による数量化 $FX = \sigma_Y^2 CX$ (説明アイテム間 (X_j, X_k) に従属