



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  $\alpha$  とセンタード方向の係数  $\beta$  は図1のようになった。 $\alpha$  は解に近づくにつれ1.0に近づくが、逆に  $\beta$  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  $(\mu_1, \dots, \mu_n)$  を求める。重み  $w_n$  と  $m_n$ 、データ  $y_n$  が  $v_n$  に、最適解  $\mu_n$  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  $\eta^2$  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  $\sigma_Y^2$  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