新潟県立看護大学学長特別研究費　平成 14 年度　個人研究報告

制約条件付きの非線形の近さの概念の理論的な研究

研究者　橋本明浩
新潟県立看護大学（看護基盤科学）

A theoretical study on non-linear closeness with some constraints

HASHIMOTO Akihiro
Niigata College of Nursing

キーワード：制約条件付き(constraints)，非線形(non-linear)，近さ(closeness)，
相関係数(correlation coefficients

目的

情報解析で問題になるのは，観測者が仮定するモデルの選択，モデルを構成するパラメタの推定，推定方法の安定性であろう．自然科学においては，モデルを想定し，モデルのパラメタ推定をある規準の下で行う．具体例としては，回帰分析法，AIC（An Information Criterion）による比較，[1), 2), 3), 4)参照]，主成分分析法等である．このような手法を統計学的手法と呼んでいるが，情報数理的な考え方をすれば，いずれも「非線形最適化問題」に定式化される．すなわち，最適化する目的関数が残差平方和，尤度，相関係数であると考えることができる．

ところで，パラメタに関しては実験的，社会的な制約により，何らかの制約条件が課せられていることが多く，この場合は「制約条件付きの非線形最適化問題」を解く必要がある．線形制約条件の下での研究については，5) 等の多く報告がなされているが，非線形制約条件の下での非線形最適化問題については未報告部分が多く[6)参照]，数学的な困難さもあって，実際的な非線形制約条件の下での非線形最適化問題の研究がなされていない．そこで，現実的な制約等を考慮した制約条件付き最適化問題の研究の１つを報告する．

対象・研究方法

以下に研究の対象とする定式化を行い，後に定性的な評価を考察する．

$\mathbf{y}'=(y_1,y_2,\ldots,y_n)\in R^n$ を既知の測定値ベクトル，$X=\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}\in R^{n\times p}$ を計画行列とし，重みベクトル $\mathbf{w}'=(w_1,w_2,\ldots,w_p)\in R^p$ とする．この時，「$X\mathbf{w}$ と $\mathbf{y}$ の何らかの規準で近くする」$\mathbf{w}$ を求める問題を考える．一般化最小二乗法[5)]は目的関数 $R_L(\mathbf{w})$ を

$$R_L(\mathbf{w})=(\mathbf{y}-X\mathbf{w})'G(\mathbf{y}-X\mathbf{w}),\ \text{ここに}\ G\in R^{p\times p}\ \text{は正定値行列,}$$

として，これを最小にする手法であり，制約条件付一般化最小二乗法はこれに加えて，重みベクトルについての領域の制約：$\mathbf{w}\in S\subset R^p$ を加えたものである．この近さは，数学的な取扱いが比較的容易（ 5) ,6) 参照）であるために，様々な結果が報告されている．しかし，この“近さの規準”は測定単位に依存するので，“複数の測定があり，その測定単位が同一でない場合には”適切な近さではないと考えられる．尺度，測度に依存しない近さの規準で広く利用されている１つに“相関係数”がある．そこで，非線形制約条件が十分滑らかな変化した場合の最適解の振る舞いについて定性的な考察をおこなう．

相関係数を規準とした場合は，目的関数 $R(\mathbf{w})$，

$$R(\mathbf{w})=\frac{\mathbf{y}'(I-Q_n)X\mathbf{w}}{\|(I-Q_n)\mathbf{y}\|\times\|(I-Q_n)X\mathbf{w}\|},$$

ここに $\|\bullet\|$ はユークリッドノルム，I は単位行列，Q_{n} は $(1,1,\cdots,1)'\in R^n$ への射影行列，

を制約条件：$\mathbf{w}\in S\subset R^p$ の下での最大化問題と定式化される．（ 2) ,3), 4) 参照）

研究結果

$R(\mathbf{w})$ は，R^n の中の２つのベクトル$(I-Q_n)\mathbf{y}$ と$(I-Q_n)X\mathbf{w}$ の成す角の余弦ではあるが，制約条件があるので，その幾何学的な考察を行おうとすれば，複雑である．そこで次の特異値分解を考える．

$(I-Q_n)X = U\Lambda V'$，ここに$U \in R^{n\times n}, V \in R^{p\times p}$ は直行行列，$\Lambda \in R^{n\times p}$ の対角行列である．

以上の概念を図１に示す．$\Lambda \in R^{n\times p}$ はｐ次元からｑ次元への変換であるが，容易に Moor-Penrose の逆行列を見つけることができる．

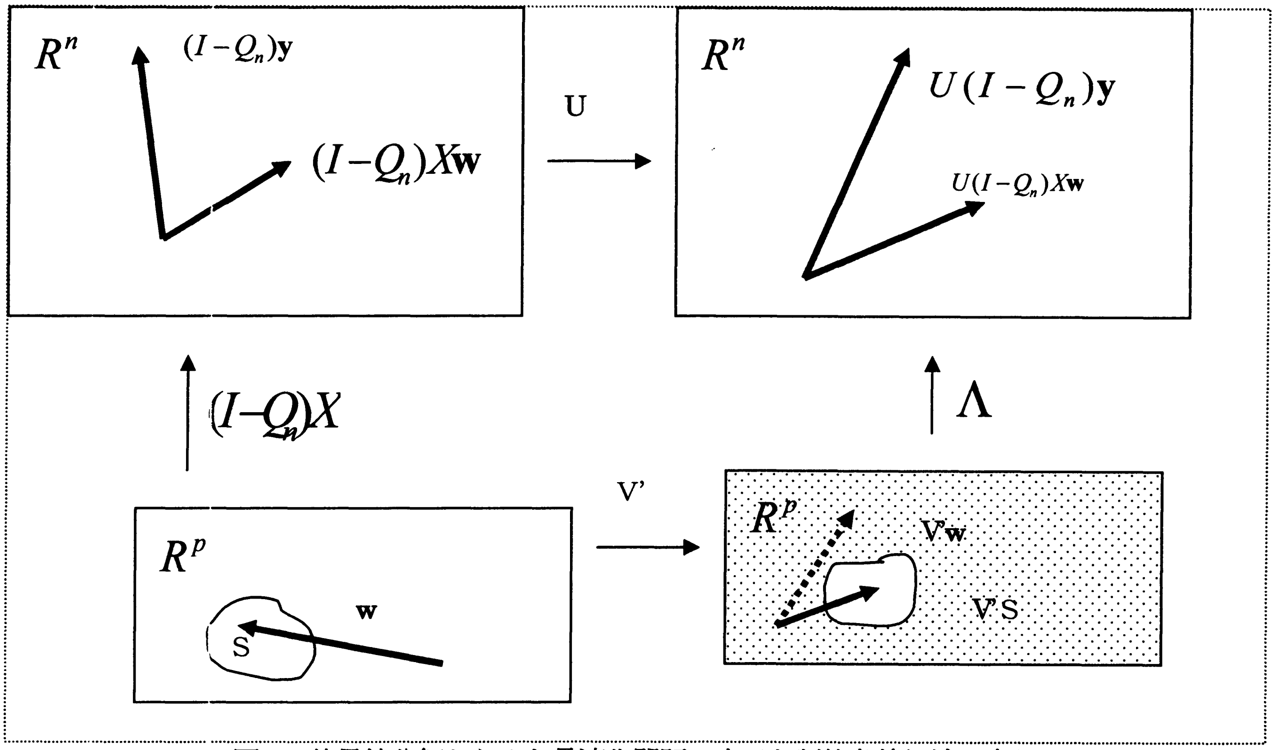

図１　特異値分解からみた最適化問題の次元と制約条件領域の変化

考察

以上の議論より，図１の縮退した空間を考えればよいことになる．このときに凸領域Ｓに滑らかな（回転等）変化を連続的に加えた場合の，最適問題の安定性は否定的である．すなわち，最適解は連続的に変化しない反例が構成されうる．

結論

本年度の研究により，「制約条件付最適化問題は一般に制約条件が十分に滑らかな変動をしても，最適解は滑らかに変化しない」ことが示された．しかし，どの程度滑らかではないかについての問題は，具体的な数値計算，オーダー評価等を行う必要性があるので，今後の研究課題としたい．

参考文献

1) A. Hashimoto, M. Honda, T. Inoue and M. Taguri. "Selection of regression models by several information criterions", Reports of Statistical Application Research, JUSE, 1981. A28(2), 1-16.

2) A. Hashimoto and H. Miyano. "On entrance examination analysis". 学術情報処理研究, 1997. 1. 51-54.

3) A. Hashimoto, H. Miyano & M. Taguri. "Maximization of correlation coefficient under quadratic constraint". Proceeding of the 6th China and Japan Symposium on Statistics, 1997. 66–67.

4) A. Hashimoto, H. Miyano & M. Taguri. "Correlation maximization under linear and quadratic constraints", Bulletin of the International Statistical Institute. 2001. 1. 117–118.

5) Rao CR. "Linear statistical inference and its applications", 2nd edition. Wiley. 1973.

6) G. H. Golub and C. F. Van Loan. "Matrix computations", 3rd edition. Johns Hopkins University Press. 1996.