

多次元尺度法のためのモデル選択

高根 芳雄



Noses of vain, untruthful, luxurious,
and fickle persons.
Barthélémy Coët, *Physiognomie*.

はじめに

多次元尺度法（以下 Multi-Dimensional Scaling の頭文字をとって MDS と略称する）はこれまで主として心理計量学 (psychometrics) の分野で発達してきた、非類似性データの空間的表現 (spatial representation) のための手法である。心理学ではその性格上さまざまな要因が複雑に絡みあった現象を扱わなければならぬことが多い、錯綜したデータの構造をあらわにする手法としての MDS が発達する強い動機づけが存在したとみることができる。ただし現在では MDS の応用範囲は單に心理学にとどまらず、言語学、文化人類学、社会学、政治学、経営学を始めとする人文・社会科学一般、生化学など一部の自然科学にも及んでいる。すでに本誌でも数年前、多次元尺度構成という名で特集が組まれており（印東ほか, 1976）、MDS のさまざまな面からの解説がなされている。したがって MDS が何をするものなのか知っておられる読者も多いと思われるが、ここでは本誌の比較的新しい読者のために、まず MDS の簡単な紹介から話を進めることにしよう。本稿の目的、すなわち MDS における統計的モデル評価の方法的発展を語る上で MDS に関する最小限の知識が不可欠だからである。

MDS とは

MDS は対象間の非類似性を示す測度がデータとして与えられたとき、対象を多次元空間内の点

として表わし、点間の距離が観測された非類似性の測度と何らかの意味で最もよく一致するよう点の布置を定める方法である（高根, 1980）。

たとえばここに一枚の日本地図があるものとしよう。このときこの地図から日本の代表的な都市間の相互距離を表わす表を作るのは比較的簡単である。ところがこの逆の作業、すなわち都市間の相互距離に基づいて都市の位置を定め、地図を修復する作業はそれほど簡単にはいかない。MDS はこの困難な逆の作業を行うための方法である (Kruskal & Wish, 1978)。もっとも MDS の適用がこの例のようにともと空間的な布置を持つ対象に限られるわけではない。むしろ MDS の真価は色彩やモールス信号のように本来空間的布置を持たない対象に空間的表現を与え、対象間の関係を直観的に理解し易い形で提示するところにある。

したがって MDS ではまず何らかの非類似性測度がデータとして与えられ、それに基づいて対象の布置を多次元空間内に構築していくのであるが、その際つぎのような点に留意しなければならない。

- (1) 対象の布置を定める空間の性質。
- (2) データに含まれる誤差の確率的性質。
- (3) 非類似性データの種類。

以下これらの点について順次説明を加えて行くことにしよう。

データの表現モデル

データの組織的変動部分を表わすモデルを表現モデルという。MDSは非類似性データを距離モデルによって表現する方法であるから対象の位置を定める空間としては何らかの距離空間 (metric space) が前提となる。距離が用いられるのは大部分の非類似性データが少なくとも近似的に距離と似たような性質を持つと考えられるからである (高根, 1980, pp. 10-12)。

さまざまな距離関数の中で最も頻繁に用いられるのは

$$d_{ij} = \left\{ \sum_{a=1}^A (x_{ia} - x_{ja})^2 \right\}^{1/2} \quad (1)$$

で定義されるユークリッド距離である。ここで x_{ia} は点 i の次元 a 上の座標, A は空間の次元数を表す。ユークリッド距離はミンコフスキイのパワード距離

$$d_{ij}^{(p)} = \left\{ \sum_{a=1}^A |x_{ia} - x_{ja}|^p \right\}^{1/p} \quad (2)$$

で $p=2$ とおいた場合に相当する。一方、ユークリッド空間は定曲率を持つリーマン空間で曲率がゼロの場合に相当する。ユークリッド距離以外のパワード距離やリーマン空間を用いた MDS も試みられてはいるが、いずれもまだ試みの域を出ていない。そこで以下の議論ではデータの表現モデルとしてユークリッド距離を想定した場合に話を限定する。もっともすべての非類似性データが距離によって近似できるとは限らないとの同様、距離によって近似できる非類似性データがすべてユークリッド距離によって近似できるわけではない。その意味では統計的考慮に基づいた表現モデル（全く形式の異なった表現モデル）の選択といったことも当然考えられなければならないが、MDS の技術水準がそこまで達していないというのが実情である。

誤差モデル

観測データは通常各種の誤差を含んでいるからたとえ表現モデルが正しいとしても、データを完全に記述し尽すことはできない。 d_{ij} に対応する非類似性 λ_{ij} が直接観測されたとしても、 λ_{ij} は d_{ij} の回りにある種の確率法則をもってバラツクのが

普通である。モデル (パラメータ) の推定はこのバラツキ (誤差) の確率法則を考慮しながら行われなければならない。

問題はこの確率法則である。これまで λ_{ij} (あるいは λ_{ij}^2) の分布としていくつかの分布が提案されているが、現在のところ絶対に正しいと考えられている分布は存在しない。(それどころか λ_{ij} の分布は非類似性データの集め方と無縁でないことが最近わかつてきた。) そこでさまざまな状況でもっともだと考えられる誤差分布をなるべく網羅的に採り入れ、モデルを異なった誤差分布のもとで実際のデータに当てはめ、適合度の良さを比較することによって最も妥当な分布を選択することが考えられる。特定の状況で得られた同種のデータが一貫してある特定の誤差分布のもとで良い当てはまりを示すならば、それを経験法則として受け入れ、以後同じ状況でとられたデータについてはそのつど異なった誤差分布を比較する必要がなくなる。妥当な誤差分布を選択する問題は、データの表現モデルを選択する（データ解析の関心は多くの場合ここにある）のと同じ位、経験的 (empirical) な意味内容をもち、ここに一つ MDS におけるモデル選択の必要性が存在する。

現在、可能な誤差分布としてさまざまなモデルが考えられているが、ここでは説明の便宜上誤差モデルを次の二つに限定することにしよう。

$$\lambda_{ij} = d_{ij} + e_{ij}, \quad e_{ij} \sim N(0, \sigma^2) \quad (3)$$

$$\lambda_{ij} = d_{ij} \cdot e_{ij}, \quad \ln e_{ij} \sim N(0, \sigma^2) \quad (4)$$

(3)を正規誤差モデル、(4)を対数正規誤差モデルと呼ぶ。ただしには各変数の分布を示す。

反応モデル

非類似性データを集める方法はさまざまである。調査などで直接被験者に非類似性判断を求める場合もあれば、二つの対象間の混同率や同異判断（二つの対象が同じか否かを判断する）における反応時間などから間接的に（非）類似性を推定する場合もある。また非類似性を直接判断する場合でもカテゴリー数の多い評定尺度を用いる場合、カテゴリー数のあまり多くない評定尺度を用いる場合（極端な場合には同異判断のように 2 カテゴリー判断の場合もある）、あるいは非類似性を対

にしてその大小判断を求めたり、いくつかの非類似性を大小関係によって順位づけてもらうなどの方法が考えられる。

異なったデータ収集の方法は非類似性を判断する側に異なった心理操作 (mental operation) を要求するはずである。人間はどのようにして非類似性をカテゴリライズし、評定尺度に反応するのか。人間はどのようにして非類似性を比較し、順位づけを行うのか。対象間の混同はどのような心理過程を経て生じるのか。この場合、データがとられた特定の判断状況、すなわち特定の課題によって生じる判断者側の心理過程を組み込んだ形で非類似性データの表現を求めて行く必要がある。ランダム誤差を含んだ距離 (λ_{ij}) が特定の形式を備えた非類似性データとして顕在化して行く過程を情報変換機構と呼び、そのモデルを反応モデルという。

尤度関数

反応モデルは非類似性データの種類によって異なる。ここでは紙面の都合もあり、非類似性を少数の観測カテゴリーを持つ評定尺度で評定した場合 (Takane, in press) を例にとって反応モデルを構成してみることにしよう。それ以外の場合については Ramsay (1977, 1978, 1980), Takane (1978), Takane & Carroll (1980)などを参照されたい。

非類似性が少数のカテゴリーを持つ評定尺度 (たとえば「非常によく似ている」から「全く似ていない」までの間を 7 段階に分けた尺度) で測定されている場合、各カテゴリーが一つの点 (数値) を代表していると考えるより、一つの連続した区間を表わしていると考えた方が当を得ている。またどの非類似性も必ずどこかのカテゴリーに分類されるから、カテゴリーの表わす区間は全体として非類似性の変域全体をおおっていると考えて差しつかえない。いま評定尺度が M 個のカテゴリーを持つものと仮定し、第 m 番目のカテゴリーと $m+1$ 番目のカテゴリーの境界値 (より正確にはこれら二つの隣接したカテゴリーの表わす区間の境界値) を b_m で表わす。一般性を失うことなく $b_0 = -\infty$, $b_M = \infty$ とすることができる。い

ま λ_{ij} が b_{m-1} と b_m の間の値をとるととき、対象 i, j 間の非類似性 (δ_{ij}) が m 番目のカテゴリー (C_m) に分類されるものとすると、そのような事象 (これを $\delta_{ij} \in C_m$ と表わす) の確率は

$$\Pr(\delta_{ij} \in C_m) = \Pr(b_{m-1} < \lambda_{ij} \leq b_m)$$

$$= \int_{a_{ij(m-1)}}^{a_{ijm}} \phi(z) dz \equiv p_{ijm} \quad (5)$$

と表わされる。ここで ϕ は標準正規分布の密度関数、また

$$z = (\lambda_{ij} - d_{ij})/\sigma$$

$$a_{ij(m-1)} = (b_{m-1} - d_{ij})/\sigma \quad (\text{正規誤差} \quad (6))$$

$$a_{ijm} = (b_m - d_{ij})/\sigma \quad (\text{モデルの場合})$$

である。対数正規誤差モデルの場合は (5) は依然として有効であるが、(6) の $\lambda_{ij}, d_{ij}, b_{m-1}, b_m$ をそれぞれ $\ln \lambda_{ij}, \ln d_{ij}, \ln b_{m-1}, \ln b_m$ で置き換えるければならない。

いま、データに繰返し (r) がある場合を考えて、

$$Y_{ijmr} = \begin{cases} 1, & \delta_{ijr} \in C_m \text{ のとき} \\ 0, & \text{その他の場合} \end{cases} \quad (7)$$

と定義すると、 Y_{ijmr} ($m=1, \dots, M$) で表わされる一つの評定判断の尤度は

$$p_{ijr} = \prod_{m=1}^M (p_{ijm})^{Y_{ijmr}} \quad (8)$$

で与えられる。これより多数の評定判断より成るデータ全体の尤度は

$$L = \prod_{i,j,r} p_{ijr} = \prod_{i,j,m} (p_{ijm})^{Z_{ijk}} \quad (9)$$

で与えられる。ここで $Z_{ijk} = \sum_r Y_{ijk}$ である。こ

れより、この L を最大にするようモデルのパラメータ $\{x_{ia}, \sigma^2, b_m\}$ を定めればよい。 L を最大化するには何らかの数値最適化法が用いられる。なお (9) 式において非類似性の判断は i, j のすべての組合せについて求められている必要はなく、また繰返し数もすべての i, j につき一定である必要はない。

モデル選択の基準

すでに何度か述べたようにモデル選択は MDS において重要な役割を果す。表現モデルにおいて空間の次元数を決定したり、特定の仮説構造がデータによく当てはまるかどうかを検討したり、反応モデルにおいてカテゴリー幅を一定とみなしてよいかなどを吟味することは多くの研究において

不可欠である。また経験的に妥当な誤差モデルを選ぶことはパラメータの推定結果全体の成否を左右するものとして重要である。さらにモデル選択の考え方は二つ以上の競合する表現モデル（たとえば距離モデルと樹状構造）、あるいは反応モデルがあったとき、その中からより適切なモデルを選ぶ場合にも成り立たなければならない。

モデル選択の基準はこのように多様なモデル比較の要請に応えるものでなければならぬ。Akaike (1973, 1974; 赤池ほか, 1976) によって考案された AIC 規準はこのような広汎な要請を満たすものとして便利である。AIC は n を推定されるべきモデルのパラメータ数として

$$AIC = -2 \ln L + 2n \quad (10)$$

と定義される。ここで $\ln L$ はパラメータについて最大化された対数尤度である。AIC は値が小さい程当てはまりがよいことを示す。したがって AIC の一番小さい値を与えるモデルを選択すればよい。

解析例

それではすべてのお膳だけが整ったところで具体的な解析例を見て行くことにしよう。

対象は物理的な高さ (H) と幅 (W) によって規定される17個の長方形である。これらの長方形は $\log H$ と $\log W$ を軸とする平面座標上に図1のような（物理的）布置を持つ。長方形の面積 (A) を $H \times W$ 、形 (S) を W/H と定義すると、 $\log A = \log H + \log W$ 、 $\log S = \log W - \log H$ だから、ちょうど $\log H$ と $\log W$ の軸を $\pm 45^\circ$ 傾けると $\log A$ と $\log S$ の軸が得られる。したがって長方形は物理的に面積と形によっても記述することができる。Krantz と Tversky (1975) はこれらの長方形を用いて、長方形の非類似性判断が物理的な高さと幅、あるいは面積と形の加算関数として表現し得るかどうかを検討した。ここでは彼等とは若干異なった方法によって、すなわち統計的なモデル選択の観点から、彼等の二つの仮説を検討してみることにしよう。

データは一人の被験者から7点評定尺度によって求められた。AIC が漸近理論に基づいているため、ほぼ一日の間隔で同じ被験者から六回繰

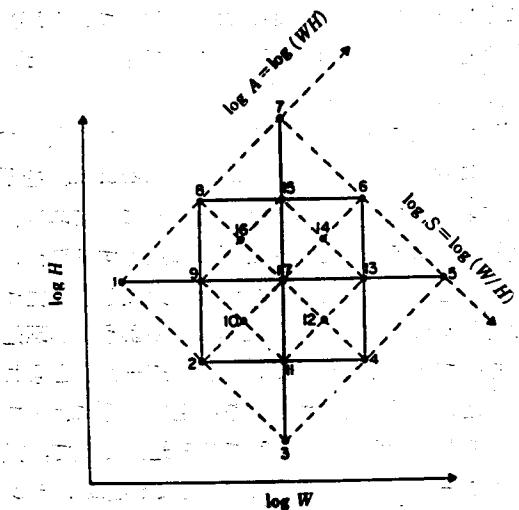


図 1

表 1

誤差モデル	対数正規モデル	正規モデル	
反応モデル (カテゴリー境界値)	制約なし	ベキ関数 (対数線形)	制約なし
表現モデル			
①制約なし			
三次元解	45.1	142.0	106.2
二次元解	45.7	155.6	128.3
②制約つき			
高さ×幅の加算モデル	346.8		
面積×形の加算モデル	465.2		
Schönemann のモデル	137.2	269.1	223.6

返し観測が求められた。被験者を一人に限ったのは個人差があると考えられたからである。

結果をまとめて表1に示した。表中の数値は特定の条件のもとで得られた AIC の値を示す。まず誤差モデルを選択するために二つの可能な誤差モデルのもとで二次元および三次元の解を求めた。どちらの次元数の場合も対数正規誤差モデルの方が AIC の値が小さい。したがって対数正規モデルの方が当てはまりがよいと結論づけることができる。（我々の経験からすると、評定尺度の場合は一貫して対数正規モデルの方が当てはまりがよい。ただし、対比較法や順位法のように非類似性同士を直接比較する場合には逆に正規モデルの方がよい当てはまりを示すという結果が出ている。）

対数正規誤差モデルが妥当であるとして、次に

カテゴリーの境界値がベキ関数 ($b_m = am^c$) によって表現し得るかどうかを検討してみよう。表1の二列目はこの仮説のもとでモデルを当てはめた結果である。二次元の場合も三次元の場合もこの仮説のもとで得られた AIC は $b_m (m=1, \dots, 6)$ を独立に推定したときの AIC よりも大きな値を示している！したがってカテゴリーの境界はベキ関数によっては表現できないという結論に達する。

誤差モデル、反応モデルが定まったところで、次に問題となるのは空間の次元数である。対数正規誤差モデル、カテゴリーの境界値に関する制約なしの条件で求められた二次元解と三次元解を比べると（表1の第一列）、わずかながら三次元解の AIC の方が小さい。このままでは二次元解を採用すべきか、三次元解を採用すべきか迷うところであるが、三次元目の座標を調べてみると、この次元が実質的な意味を持つことがわかる。そこで AIC の指示通り、三次元解を採用する。図2にこの三次元解の最初の二つの次元によって規定される対象の布置を示した。三次元の布置はこの二次元の布置が三次元目に関してわずかに湾曲している姿を想像して欲しい。（何故このように布置が湾曲し、三次元目が有意になったかについては定かでないが、空間が非ユークリッド的であるためとも考えられる。）図中の線分は面積の等しい長方形同士、形の等しい長方形同士を結んだものである。

非類似性判断から求められた布置が予想外に二次元でなく三次元になったため Krantz と Tversky

の仮説はそのままでは意味を持たなくなるが、三次元解の最初の二つの次元について彼等の仮説が成り立っているかどうかを見ることはできる。図3と図4はそれぞれ高さ×幅、面積×形がそのまま長方形の非類似性を規定する心理的な次元を表わすという仮説のもとで求められた布置を示している。（同じ高さや幅、あるいは面積や形を持った長方形がそれらの属性に対応した次元で同じ座標値を持つよう拘束されていることに注意）。表1でこれらの布置に対応する AIC をみると、いずれも拘束条件を課さないときの AIC の値よりも大きいことがわかる。したがって、高さ×幅の組合せも、面積×形の組合せも非類似性を説明する次元としては適当でないことがわかる。

Schönemann (1977) は Krantz と Tversky が得た布置から、長方形の形の違いが長方形が大きくなるにつれて非類似性により大きく貢献する事実に注目し、図5に示すような仮説構造を導き出

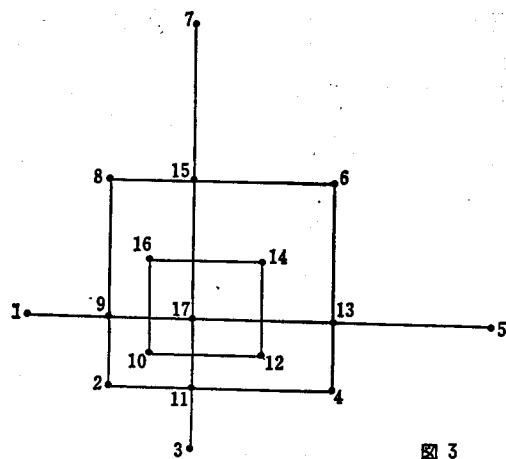


図3

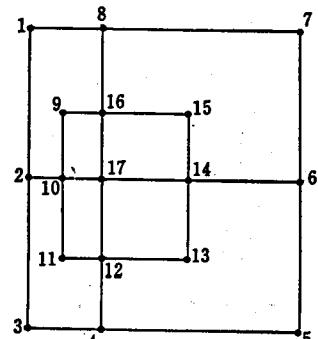


図4

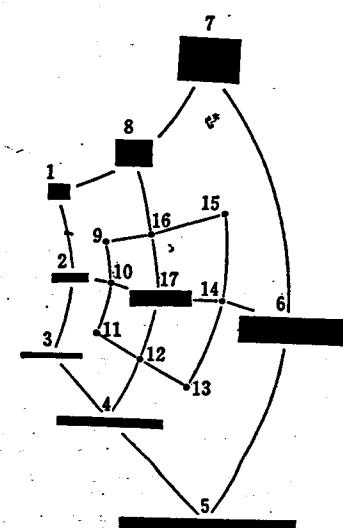


図2

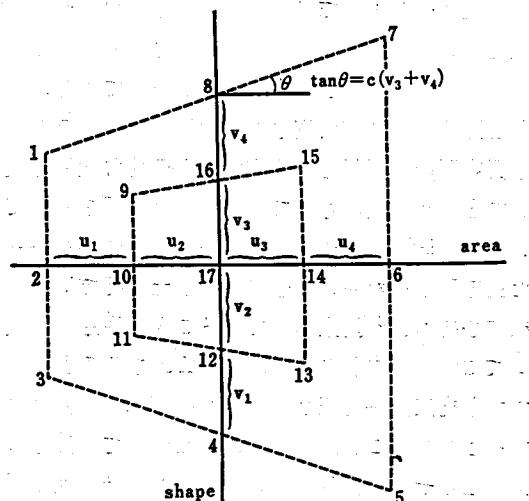
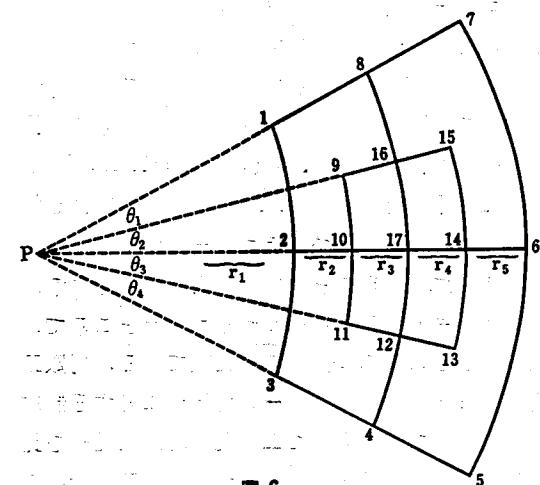


图 5



2

した。この仮説は面積と形の水準間の差を示すパラメータと、形の水準が大きさの関数として広がって行く度合を示すパラメータによって記述できる。この仮説のもとで得られた AIC を見ると、Krantz と Tversky の二つの仮説よりは大部当てはまりがよくなっているものの、それでも座標に全く拘束条件を置かないで解いた布置（図 2）と比べると当てはまりがよくない。したがって Schönemann のモデルも非類似性のモデルとしては適当でないことがわかる。

Schönemann の仮説に代るモデルとして筆者が考えたのは図 6 に示されるような布置である。図 2 を見ると、Schönemann が考えたように面積の水準はまっすぐではなく、一定の方向に曲がっていることがわかる。いま、面積の次元を小さい方に向かって進み、形の差がなくなる点を P とする。(恐らくこの点は面積がゼロ——少なくとも知覚的に——の点に対応するものと考えられる。) 同じ面積を持つ長方形が点 P から等距離にあると考えたのが図 6 である。残念ながら図 6 の仮説を当てはめることのできる MDS のプログラムは現在のところ存在しない。

面白いのは図6の布置と両眼視空間の類似性である。両眼視空間ではPに視点を置くとPから一定以上の距離にあってPと対面している(Pと対象6を結ぶ線に直交している)線上にある物体

は、図6のように湾曲して見える。また、図6における形の次元の拡がりは点Pを原点にとったときの視野(perspective)の拡がりに酷似している。両眼視空間は一般に双曲線空間(hyperbolic space; 負の曲率を持つ定曲率リーマン空間)を成すことが知られているが、想像力を一層たくましくするならば長方形の認知空間も双曲線空間を成すのではないかと思われる。Indow(1979)によるシミュレーション実験によると、双曲線空間における距離をユークリッド距離で近似しようとすると、図6の布置が図2のように歪められて表現されることが確かめられている。また、三次元目の方向にわずかな湾曲を示す布置も（すなわち三次元目が有意になった理由も）双曲線空間を無理やりユークリッド空間に押し込めようとしたためではないかと考えられる。ただしこれはいまだ筆者の想像の域を出ていないことを断わっておく。重要なことはこうした想像が具体的モデル選択の過程の中で生まれてきたという事実である。

結語

以上、MDSにおけるモデル選択の論理と実際を大急ぎで概観した。もちろんデータの解析におけるモデル選択の重要性は（その分野を心理学に限ってみても）MDS（非類似性データの距離モデルによる表現）に尽きるものではない。心理測定法に真に統計的なモデルが導入されるようになってまだ日も浅く、モデル選択の考え方もまだ十分

行き渡っているとは言い難いが、このような事態が今後急速に改善されることを期待してやまない。

参考文献

- Akaike, H. Information theory and an extention of the maximum likelihood principle. In B. N. Petrov and F. Csáki (Eds.), *The second international symposium on information theory*. Budapest: Akadémiai kiado, 1973.
- Akaike, H. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on automatic control*, 1974, AC-19, 716-723.
- 赤池弘次ほか「情報量規準」数理科学 1976, No. 153, サイエンス社。
- 印東太郎ほか「多次元尺度構成」数理科学 1976, No. 152, サイエンス社。
- Indow, T. An approach to geometry of visual space with no *a priori* mapping functions: Multidimensional mapping according to Riemannian metrics. *Social Sciences Report* 25, University of California, Irvine, 1979.
- Krantz, D. H., and Tversky, A. Similarity of rectangles: An analysis of subjective dimensions. *Journal of Mathematical Psychology*, 1975, 12, 4-34.
- Kruskal, J. B., and Wish, M. *Multidimensional scaling*. Beverly Hills, Calif.: Sage Publications, 1978. [高根芳雄(訳)『多次元尺度法』朝倉書店, 1980]
- Ramsay, J. O. Maximum likelihood estimation in multidimensional scaling. *Psychometrika*, 1977, 42, 241-266.
- Ramsay, J. O. Confidence regions for multidimensional scaling analysis. *Psychometrika*, 1978, 43, 145-160.
- Ramsay, J. O. Joint analysis of direct ratings, pairwise preferences and dissimilarities. *Psychometrika*, 1980, 45, 149-165.
- Schöenemann, P. H. Similarity of rectangles. *Journal of Mathematical Psychology*, 1977, 16, 161-165.
- Takane, Y. A maximum likelihood method for nonmetric multidimensional scaling: I. The case in which all empirical pairwise orderings are independent—theory and evaluations. *Japanese Psychological Research*, 1978, 20, 7-17 and 105-114.
- 高根芳雄『多次元尺度法』東京大学出版会, 1980.
- Takane, Y. Multidimensional successive categories scaling: A maximum likelihood method. *Psychometrika*, 1981, (in press).
- Takane, Y., and Carroll, J. D. Maximum likelihood multidimensional scaling from directional rankings of similarities. Paper submitted for publication, 1980.

(たかね・よしお, マッギル大学・心理学部)



講座・数理計画法 全11巻

2. 線形計画法入門

古林 隆著 A5 定価2,200円

線形計画法の理論と解法を、わかり易く解説した入門書。一般的な手順が理解しやすいように簡単な例題が豊富にとり入れられている。

[主要目次] 線形計画モデル／シンプレックス法／改訂シンプレックス法／双対シンプレックス法／再最適化問題と感度分析／他

4. 非線形最適化の理論

福島雅夫著 A5 定価2,200円

最適性・双対性理論を中心に、安定性や微分不可能関数の理論などの類書にはみられない興味あるトピックスの最新成果を凸解析の方法を用いて統一的にかつきわかり易く解説した現代非線形最適化理論の恰好の入門書。

[主要目次] 序論／凸解析／最適性の条件／安定性の理論／微分不可能な最適化問題／他

9. 相補性と不動点

—アルゴリズムによるアプローチ
小島政和著 A5 予価 2800円 近刊

数理計画法、数値解析、経済的均衡、ゲームの理論等に幅広い応用をもつてある線形相補性問題と不動点を求める問題に対して最近開発された計算手法に対する統一的な解説書。

[主要目次] 数学的準備／相補性問題／微分を用いた連続変形法／区分的線形化(単位近似)手法／Merrill法/Eaves-Saigal法／他

(以下続刊)

1 数理計画法概論 伊理正夫・今野 浩

3 線形計画法の実際 反町・岡本 玉井

5 非線形最適化のアルゴリズム 山下 浩

6 整数計画法 今野 浩

7 グラフ・ネットワーク・マトリオード 伊理・藤重・大山

8 組合せ最適化と分枝限定法 萩木俊秀

10 数理計画法の応用(理論編) 伊理・今野(編)

11 数理計画法の応用(実際論) 鈴木・高井(編)

東京都千代田区外神田1-4-21
TEL. 253-7821(代)／振替 東京2-27724