

補足 1-6 式(1.17)の最小化

誤差の 2 乗和

$$SSE = \sum_{i \neq j} \left(\frac{n_{ij}}{n_{ij} + n_{ji}} - p_{ij} \right)^2 \quad (1.17)$$

の最小化を、共役勾配法（付録 E 参照）で行う。勾配を与える偏導関数は、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial SSE}{\partial \mu_i} &= \sum_{i \neq j} 2 \left(\frac{n_{ij}}{n_{ij} + n_{ji}} - p_{ij} \right) \cdot \left(-\frac{\partial p_{ij}}{\partial \mu_i} \right) \\ &\quad + \sum_{i \neq j} 2 \left(\frac{n_{ji}}{n_{ji} + n_{ij}} - p_{ji} \right) \cdot \left(-\frac{\partial p_{ji}}{\partial \mu_i} \right) \end{aligned}$$

ここで、

$$\frac{\partial p_{ij}}{\partial \mu_i} = \phi_0 \left(\frac{\mu_i - \mu_j}{\sqrt{2}} \right) \times \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial p_{ji}}{\partial \mu_i} = \phi_0 \left(\frac{\mu_j - \mu_i}{\sqrt{2}} \right) \times \frac{-1}{\sqrt{2}}$$

である。