数理解析研究所講究録
10 巻 1966 年 26-33

数値解析における二三の問題

京大数理解析研
富山大　文理　田　中　専一郎

1. 最小自乗法における例とその一般化.

次の様な例を考える。

$t_1 < t_2 < \cdots < t_m$ （t_i は一般に不等間隔）の各 t_i におけるデータ y_i が与えられている。さらに函数

$$y = Ae^{-Bt}\sin Ct$$

を与えたとき，

$$\min \sum_{i=1}^{m} (Ae^{-Bt_i}\sin Ct_i - y_i)^2$$

となるA，B，Cを決定する。

これは最小自乗法の問題であるが，次のようにいいかえることが出来る。即ち

$$f_i(A, B, C) = Ae^{-Bt_i}\sin Ct_i - y_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, m)$$

とおけば，

$$\min \sum_{i=1}^{m} (f_i(A, B, C))^2$$

となるA，B，Cを決定する。

これを一般化して次の問題を考える。

R^k でk次元Euclid　空間を表わす。

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in R^n,$$

$$f(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x)) \in R^m \quad (m \geqq n)$$

とし，$f(x)$ は与えられているものとする。そのとき，ある適当な近傍Uをとって，

$$\min_{x \in U} \; | \; f(x) \; |^2$$

となるxを決定する。ここに $|f(x)|$ はm次元Euclid 空間における原点から点 $f(x)$ までの距離 $|f(x)| = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}(f_i(x))^2}$ を表わす。

2. 方　法

$$S(x) = | \; f(x) \; |^2$$

とおく，$|h|$ が十分小さいとすれば

$$f_i(x+h) \fallingdotseq f_i(x) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} h_j$$

であるから

$$S(x+h) \fallingdotseq \sum_{i=1}^{m} (f_i(x) + \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} h_j)^2 .$$

よって，この右辺を

$$S(x,h) = \sum_{i=1}^{m} (f_i(x) + \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} h_j)^2$$

とおく。xを固定したvector とするとき，S（x，h）を最小にするhをきめる。即ち

$$\frac{1}{2} \frac{\partial S(x,h)}{\partial h_k} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} (f_i(x) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} h_j) = 0$$

$$(k = 1, 2, \cdots, n)$$

とすれば，hに関する連立一次方程式は

$$\sum_{j=1}^{n} (\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}) h_j = -\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} f_i(x) \quad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{2.1}$$

となる。

$$
A(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1(x)}{\partial x^2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial f_2(x)}{\partial x_n} \\ & \cdots\cdots\cdots\cdots & & \\ \dfrac{\partial f_m(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_m(x)}{\partial x_2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial f_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{2.2}
$$

とおき，$A^*(x)$ を $A(x)$ の転置行列とすれば，（2．1）は行列Aを用いて

$$
A^*(x)\,A(x)\,h = -A^*(x)\,f(x) \tag{2.3}
$$

と書くことが出来る。$\det(A^*(x)A(x)) \neq 0$ のとき求めるhは

$$
h = -(A^*(x)\,A(x))^{-1}\,A^*(x)\,f(x)\ . \tag{2.4}
$$

以上の結果をまとめれば，

xが固定されたvectorのとき，$A^*(x)\,A(x)$ の逆行列が存在すれば，$S(x, h)$を最小にするhは（2.4）によって与えられる。

ここで次のAlgorithm によって点列 $\{x^{(k)}\}$ をきめる。

適当な初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。$k=0, 1, \cdots$ について

(α) $x^{(k)}$ に対して

$$
h^{(k)} = -(A^*(x^{(k)})\,A(x^{(k)}))^{-1}\,A^*(x^{(k)})\,f(x^{(k)}) \tag{2.5}
$$

によって $h^{(k)}$ をきめる。

(β) $x^{(k+1)} = x^{(k)} + h^{(k)}$ とおく。

(α) における $h^{(k)}$ は，連立一次方程式

$$
A^*(x^{(k)})\,A(x^{(k)})\,h^{(k)} = -A^*(x^{(k)})\,f(x^{(k)}) \tag{2.6}
$$

によって求めることに注意する。また(α)，(β)は

(γ) $$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (A^*(x^{(k)})A(x^{(k)}))^{-1} A^*(x^{(k)}) f(x^{(k)})$$

と書くことも出来る。

この Algorithmによって最小自乗法を解くのであるが，それらの意義は次の節で説明する。

3. 収束の条件

定理をのべる前に，定理の中で用いられるnotation の定義を与える。

DをE^n における有界閉領域，その内包をD° とする

$$H = \{h \mid |h| = 1, \quad h \in E^n\},$$

$$G = D \times H$$

とおく。

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (i=1,2,\cdots m; \quad j=1,2,\cdots,n)$$

及び

$$\sum_{i=1}^{m} f_i(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k} \qquad (j, k=1,2,\cdots,n)$$

を要素とするm×n，n×n行列をそれぞれA(x) 及び C(x) とし，

(α) $$M = \min_{(x,h)\in G} |A(x)h|^2,$$

(β) $$m = \max_{(x,h)\in G} |C(x)h|$$

とおく。

定 理 (1)，(2)，(3)を仮定する。

(1) $f(x) \in C^3(D)$.

(2) $\dfrac{\partial S(x)}{\partial x} = 0$ をみたす$x=\bar{x}$ がD° の中に存在する。

(3)　$m+\delta<M$ をみたす正数 δ が存在する。

この仮定のもとに，2.でのべた algorithm によってきまる点列 $\{x^{(s)}\}$ 及び $\{h^{(s)}\}$ に対して，次の性質(I)，(II)，(III) 及び (IV)が成り立つ。

(I)　初期値 $x^{(0)}$ を $|x^{(0)}-\bar{x}|<\varepsilon$ にとれば，

$$|h^{(s+1)}|\leq r\,|h^{(s)}| \qquad (s=0,1,2,\cdots,)\ ,$$

ここに $r<1$ で，ε，r の値は証明の途中でのべられる。

(II)　$\rho^{(s)}=x^{(s)}-\bar{x}$ とおくとき

$$|\rho^{(s+1)}|\leq r_1\,|\rho^{(s)}| \qquad (s=0,1,2,\cdots)\ ,$$

ここに $r_1<1$ で，この値は証明の途中でのべられる。

(III)　U を D^0 に含まれる x_0 の任意の球近傍とすれば，$S(\bar{x})$ は U における $S(x)$ の最小値である。

(IV)　$S(x^{(s+1)})\leq S(x^{(s)}) \qquad (s=0,1,2,\cdots)$.

この定理の仮定の妥当性及び定理の証明は別の京都大学数理解析研究所講究録（数値解析セミナー）にのべられる。ここでは定理の (I) のみについて簡単に証明する。

(I) の 証 明　(2.5) より

$$-A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)})h^{(s+1)}=A^*(x^{(s+1)})f(x^{(s+1)})\ . \qquad (3.1)$$

この右辺を各成分について計算すれば

$$\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j}f_i(x^{(s+1)})=\sum_{p=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m}f_i(x^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\partial x_p}\right)h_p+0(h^2)\ .$$

よって (3.1) は行列 $C(x)$ を用いて

$$A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)})h^{(s+1)}=-C(x^{(s)})h^{(s)}+g(x^{(s)},h^{(s)}) \qquad (3.2)$$

とも書かれる。ここに $g(x,h)$ は δ' が十分小さいとき，$|h|<\delta'$ のすべての h に対して

$$|g(x,h)|\leq L|h|^2$$

が成り立つようなベクトルである。$h^{(s+1)}=0$ のときは，(I)は明らかに成り立つから，$h^{(s+1)}\neq 0$ として (3.2) と $h^{(s+1)}$ との内積を考え，両辺の絶対値について計算すれば

$$M|h^{(s+1)}| \leqq (m+L|h^{(s)}|)\,|h^{(s)}| \quad .$$

ここで

$$|h^{(0)}| < \mu = \min(\delta/L,\ \delta_1)$$

となるよう，初期値 $x^{(0)}$が選べることを示す。

$$A^*(x^{(0)})\,A(x^{(0)})\,h^{(0)} = -A^*(x^{(0)})\ f(x^{(0)}) \quad ,$$

従って

$$|h^{(0)}| \leq |A^*(x^0)\ f(x^0)|/m = \left|\frac{\partial S(x^{(0)})}{\partial x}\right|/2m$$

かつ

$$\frac{\partial S(\bar{x})}{\partial x} = 0$$

であるから，$|x^{(0)}-\bar{x}| < \varepsilon$ なるように適当に ε をとれば連続函数の性質によって

$$|h^{(0)}| < \mu$$

と出来る。よって

$$|h^{(1)}| \leqq \frac{m+\delta}{M}|h^{(0)}| \quad .$$

$r=(m+\delta)/M$ とおけば $r<1$ であるから帰納法によって，すべての s に対して(I) が成り立つことが証明出来る。　　　　証　明　終

(III) の証明には，$\bar{x}+h\in U$ のすべての h に対して

$$\sum_{j,k=1}^{n}\frac{\partial^2 S(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k}h_j h_k > 0 \qquad (h\neq 0)$$

を示すことが必要である。

4. 計 算 例

函数

$$y = Ae^{-Bt}\sin Ct$$

に，この方法を応用した計算結界をのべる。これは，富山大学計算センターの電子計算機を用いて計算した。

TEST DATA

X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
0.05	0.4874	0.45	3.4732	0.85	4.9116	1.25	5.0795
0.10	0.9496	0.50	3.7337	0.90	4.9947	1.30	5.0302
0.15	1.3864	0.55	3.9701	0.95	5.0585	1.35	4.9679
0.25	2.1833	0.65	4.3726	1.05	5.1312	1.45	4.8079
0.30	2.5435	0.70	4.5397	1.10	5.1418	1.50	4.7118
0.35	2.8784	0.75	4.6848	1.15	5.1361	1.55	4.6060

FUNCTION　　Y = A* exp (B* X)* sin(C* X) ;

INITIAL DATA　(A , B , C) = (9.0 , −0.4 , 0.9) .

A		B		C		HA		HB		HC	
9.00000	0	−4.00000	−1	9.00000	−1	1.30688	0	−1.30110	−1	8.18102	−2
1.03608	1	−5.30110	−1	9.81810	−1	−3.16668	−1	3.02661	−2	1.84345	−2
9.99021	0	−4.99843	−1	1.00024	0	8.99688	−3	−1.13738	−4	−1.99477	−4
9.99921	0	−4.99957	−1	1.00004	0	8.49214	−7	6.92275	−8	9.80011	−8

INITIAL DATA　(A , B , C) = (8.0 , −0.3 , 0.8) .

A		B		C		HA		HB		HC	
8.00000	0	−3.00000	−1	8.00000	−1	3.51975	0	−3.39510	−1	1.03052	−1
1.15197	1	−6.39510	−1	9.03052	−1	−1.82240	0	1.44338	−1	1.05636	−1
9.69734	0	−4.95172	−1	1.00868	0	3.00345	−1	−4.87450	−3	−8.75768	−3
9.99769	0	−5.00046	−1	9.99930	−1	1.52019	−3	8.92428	−5	1.14690	−4
9.99921	0	−4.99957	−1	1.00004	0	3.17982	−7	−2.98242	−8	−4.68879	−8
9.99921	0	−4.99957	−1	1.00004	0	2.61310	−10	6.86959	−12	1.67600	−10

INITIAL DATA (A, B, C) = (7.0, −0.2, 1.3).

A	B	C	HA	HB	HC
7.00000 0	−2.00000 −1	1.30000 0	1.73115 0	−2.63970 −1	−2.13554 −1
8.73115 0	−4.63970 −1	1.08664 0	1.15567 0	−3.71120 −2	−8.51162 −2
9.88682 0	−5.01082 −1	1.00132 0	1.12416 −1	1.13549 −3	−1.80135 −3
9.99924 0	−4.99947 −1	1.00002 0	−3.34445 −5	−1.02962 −5	1.77325 −5
9.99921 0	−4.99957 −1	1.00004 0	−4.34406 −9	4.13339−10	9.20305−10
9.99921 0	−4.99957 −1	1.00004 0	5.28491−10	−4.43787−11	8.76591−10

INITIAL DATA (A, B, C) = (16.0, −0.2, 1.6).

A	B	C	HA	HB	HC
1.60000 1	−2.00000 −1	1.60000 0	−8.24611 0	−9.95685 −2	−1.54574 −1
7.75388 0	−2.99568 −1	1.44542 0	7.26020 −1	−1.61587 −1	−2.94442 −1
8.47990 0	−4.61156 −1	1.15098 0	1.27297 0	−4.05384 −2	−1.44098 −1
9.75287 0	−5.01694 −1	1.00688 0	2.46235 −1	1.75194 −3	−6.99723 −3
9.99911 0	−4.99942 −1	9.99887 −1	1.00923 −4	−1.48113 −5	1.57937 −4
9.99921 0	−4.99957 −1	1.00004 0	1.71220 −7	9.09163 −9	−2.05993 −8