数理解析研究所講究録
42巻 1968年 37-52

最小自乗法における Algorithm について

富山大文理　　田中 専一郎

§1. 序論.

パラメータ $a=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$ を含む函数 $y=y(a,t)$ の $t=t_i$ $(i=1,2,\cdots,m\ ;\ m\geqq n)$ における実験値を y_i とする。いま

$$S(a)=\sum_{i=1}^{m}\omega(t_i)(y(a,t)-y_i)^2$$

の値を最小にする a を求める問題としよう。こゝに $\omega(t)$ は $\omega(t_i)>0$ $(i=1,2,\cdots,m)$ となる函数で weight function と呼ばれる。

さて、初めに $b=(b_1, b_2, b_3)$, $c=(c_1, c_2, c_3)$ を与えたとき、二函数 $y=b_1e^{-b_2t}\sin b_3t$, $y=c_1e^{-c_2t}\sin c_3t$ のグラフの交点を (t_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,m)$ としよう。いま (t_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,m\ ;\ m\geqq 3)$ と函数の型 $y(a,t)=a_1e^{-a_2t}\sin a_3t$ を与えたとき、$S(a)$ を最小にする a と

して，$b=(b_1, b_2, b_3)$，$c=(c_1, c_2, c_3)$ などをとることが出来る。このように $S(a)$ を最小にする a はただ一つとは限らない。また D を n 次元 Euclid 空間 R^n の有界閉集合とし，D 全体での $S(a)$ の最小値を求めることは特別な場合を除き極めてむづかしい。この理由でわれわれは local な問題即ち極小問題を扱う。そのとき

$$f_i(a)=\sqrt{w(t_i)}\,(y(a,t_i)-y_i)$$

とおくことにより，つぎのように一般化出来る。

$$x\in R^n,\quad h\in R^n,\quad f(x)\in R^m\quad (m\geqq n)$$

とし，
$$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n),\quad h=(h_1, h_2, \cdots, h_n),$$
$$f(x)=(f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x)),$$
$$S(x)=|f(x)|^2\quad \left(\equiv \sum_{i=1}^{m}(f_i(x))^2\right)$$

とする。そのとき (A1)，(A2)，(A3) を仮定する。

(A1)　R^n の領域 D において $f\in C^2(D)$，

(A2)　$\operatorname{grad} S(x)=0$ をみたす $x=\bar{x}$ が D の中に存在する。

(A3)　$m\times n$ 行列 $A(x)$，$n\times n$ 行列 $C(x)$ は

(1)　$$A(x)=\left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right)\quad \begin{pmatrix} i=1, 2, \cdots, m \\ j=1, 2, \cdots, n\end{pmatrix},$$

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

$\|C(x)\|$ を $C(x)$ の norm とするとき

$$\min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|.$$

この仮定のもとに $\bar{x}\in U\subset D$ を満たす近傍 U をとり，$\min_U S(x)$ となる x を決定する。この目的のため Jacobi の algorithm および Newton-Jacobi の algorithm を設定した。さきに Newton-Jacobi の algorithm の意味付けを行ったとき $f\in C^3(D)$ を仮定したが，今回は $f\in C^2(D)$ で同じ結果が成立することを示す。

§2. 最小自乗法における Algorithm.

Jacobi の algorithm の基礎はつぎの補助定理1である。

補助定理 1. "x は固定されたベクトルとする。$m\times n$ 行列 $A(x)$ の階数が n $(m\geqq n)$ ならば

$$|A(x)h+f(x)|^2$$

の値を最小にする $h=\bar{h}$ は $A^*(x)$ を $A(x)$ の転置行列として連立一次方程式

$$A^*(x)A(x)h=-A^*(x)f(x)$$

を満たす。"

さて，絶対値の十分小さいhに対して

$$f(x+h) \fallingdotseq f(x) + A(x)h$$

が成立つ。ここにxは一応固定されたベクトル，$A(x)$は$m \times n$ $(m \geqq n)$のJacobi行列

$$A(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right) \quad \begin{pmatrix} i=1,2,\cdots,m \\ j=1,2,\cdots,n \end{pmatrix}$$

である。xのある近傍で$A(x)$の階数はnであると仮定しよう。$S(x)=|f(x)|^2$の最小値を求めるため，適当な初期値$x^{(0)}$を選ぶ。$|f(x^{(0)}+h)|$の最小値をとるhを直接求めることは一般に簡単ではない。そこで$|f(x^{(0)}+h)| \fallingdotseq |f(x^{(0)})+A(x^{(0)})h|$であることと$|f(x^{(0)})+A(x^{(0)})h|^2$の最小値をとる$h=h^{(0)}$は補助定理1より

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

の根として求まるから，この$h^{(0)}$をもって$|f(x^{(0)}+h)|^2$の最小値を与えるhの近似と考える。換言すれば$x=x^{(0)}+h^{(0)}$をもって$|f(x)|^2$の最小値をとるxの第1近似と考える。この意味から$x^{(1)}=x^{(0)}+h^{(0)}$とおく。

帰納法により点列$\{x^{(s)}\}$，$\{h^{(s)}\}$が得られる。この点列の求め方をAlgorithmの形に書けば次のようになる。

Jacobi の Algorithm　適当に初期値$x^{(0)}$を選ぶ。

$x^{(s)}$についての連立一次方程式

$$A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (s=0,1,2,\cdots)$$

により $h^{(s)}$ をきめる。 $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

この algorithm を最小自乗法における Jacobi の algorithm という。

さて、最小自乗法において $S(x) = \sum (f_i(x))^2$ の値を最小にする x は $\mathrm{grad}\, S(x) = 0$ を満たす。この方程式

$$g_j(x) = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} f_i(x) = 0 \qquad (j = 1, 2, \cdots, n)$$

の根を Newton 法で求めるとき、最小自乗法における Newton 法という。そのとき $g(x)$ の Jacobi 行列の (j,k) 要素は

$$\frac{\partial g_j(x)}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} + f_i(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k} \right)$$

であるから $h^{(s)}$ に関する一次方程式は

$$(3) \qquad \left(A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}) + C(x^{(s)})\right)h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

と書かれる。こゝに $A(x)$, $C(x)$ はそれぞれ (1), (2) によって定義された行列である。よって最小自乗法における Newton の algorithm は次のようになる。

Newton の Algorithm　初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適

当に選ぶ。 $x^{(s)}$ を既知とし，(3)をみたす $h^{(s)}$ に対して
$x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

ここで Jacobi と Newton の algorithm を同時に含む algorithm を考える。

Newton-Jacobi の Algorithm

λ は $0 \leqq \lambda \leqq 1$ の定数とする。

$x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適当に選ぶ。

(4) $$B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (s = 0, 1, 2, \cdots)$$

ここに

$$B_\lambda(x) = A^*(x)A(x) + (1-\lambda)C(x)$$

この $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

この algorithm を最小自乗法における Newton-Jacobi の algorithm といい，これによって $S(x)$ の最小値をとる x を求める方法を Newton-Jacobi の方法という。

§3. 補助定理.

ここでは Main Theorem の証明に必要な補助定理を列挙する。§1 での仮定 (A1), (A2), (A3) は これらの補助定理で断りなしに仮定する。

$$H = \{ h \mid |h| = 1,\ h \in R^n \}$$ とおく。

補助定理2. "$\min_H |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|$ ならば $0\leqq\lambda\leqq 1$ の任意の λ に対して

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda\|C(\bar{x})\|.\text{"}$$

証明 C を任意の $n\times n$ 行列とする. $^\forall h\in H$ に対して

$$\|C\| \geqq |(Ch, h)|.$$

よって明らかに

$$((\|C\|I + C)h, h) \geqq 0 \quad \text{for } ^\forall h\in H.$$

一方

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) = (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h})$$

を満たす $\hat{h}\in H$ が存在する。

$$\begin{aligned}
\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) &= (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) \\
&= ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\|I)\hat{h}, \hat{h}) \\
&\quad - (1-\lambda)((\|C(\bar{x})\|I + C(\bar{x}))\hat{h}, \hat{h}) \\
&\geqq ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\|I)\hat{h}, \hat{h}) \\
&\geqq \min_H (A^*(\bar{x})A(\bar{x})h, h) - \|C(\bar{x})\| + \lambda\|C(\bar{x})\| \\
&> \lambda\|C(\bar{x})\|.
\end{aligned}$$

補助定理3. "任意の正数 ε に対して, 適当な $\bar{x}$ の閉近傍 V_λ を選べば

$$0 \leqq \min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) - \min_{V_\lambda\times H} (B_\lambda(x)h, h) \leqq \varepsilon,$$

$$0 \leqq \max_{V_\lambda} \|C(x)\| - \|C(\bar{x})\| \leqq \varepsilon.\text{"}$$

この補助定理の証明は $B_\lambda(x)$, $C(x)$ の要素が D で連続であることから殆ど明らかである。

補助定理4. "$\bar{x}$ の δ_λ 閉近傍 V_λ と正数 μ_λ を適当に選べば

$$\min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h) > \lambda \max_{V_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda."$$

証明. 補助定理2より

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \max \|C(\bar{x})\| + \mu_\lambda$$

を満たす μ_λ が存在する。この両辺の差を 3ε とおき、補助定理3を用いる.

註. 補助定理2の証明をみれば

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) - \lambda \|C(\bar{x})\|$$

$$\geq \min_H |A(\bar{x})h|^2 - \|C(\bar{x})\|$$

であるから μ_λ は λ に無関係に選ぶことが出来る。

補助定理5. "任意の正数 ε に対して, $\bar{x}$ の $\delta_{\lambda 1}$ 近傍 $V_{\lambda 1}$ をとれば任意の $x^{(1)} \in V_{\lambda 1}$ に対して $|h^{(1)}| \leqq \varepsilon$."

証明 $A^*(\bar{x}) f(\bar{x}) = 0$ かつ $|A^*(x) f(x)|$ は x について連続であるから $|x^{(1)} - \bar{x}| \leq \delta_{\lambda 1}$ の中の任意の $x^{(1)}$ に対して

$$|A^*(x^{(1)}) f(x^{(1)})| / \mu_\lambda \leqq \varepsilon$$

が成立つ。ところが $h^{(1)} \neq 0$ として $x^{(1)} \in \delta_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(1)}$ に対して

$$\mu_\lambda |h^{(0)}|^2 \leqq (B_\lambda(x^{(0)})h^{(0)}, h^{(0)})$$
$$= -(A^*(x^{(0)})f(x^{(0)}), h^{(0)})$$
$$\leqq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})|\,|h^{(0)}|$$
$$\therefore \quad |h^{(0)}| \leqq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})|/\mu_\lambda \leqq \varepsilon.$$

注 μ_λはλに無関係に選べるから V_λはλに無関係に選べる。

§4. Main Theorem.

定理を述べる前にそこで用いられる記号について述べる

$$M(x) = \min_{H} |A(x)h|^2, \quad M = \min_{V\times H} |A(x)h|^2;$$

$$K_\lambda = (\max_{V_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda)/M_\lambda < 1.$$

Main Theorem. (A1) R^nの領域Dで$f(x)\in C^2(D)$.

(A2) grad $S(x)=0$ を満たす $x=\bar{x}$ がDの中に存在する.

(A3) $\|C(\bar{x})\| < \min_{H} |A(\bar{x})h|^2$

仮定(A1), (A2), (A3) のもとに適当な正数$\delta_{0\lambda}$を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}| \leqq \delta_{0\lambda}$ を満たす初期値 $x^{(0)}$ と Newton-Jacobi の algorithm (4) によってきまる系列$\{x^{(s)}\}$, $\{h^{(s)}\}$に対して (I), (II), (III) および (IV) が成立つ。

(I) $\bar{x}$の適当な近傍をとると, $x=\bar{x}$はその近傍で$S(x)$の最小値を与える。

(II) $|x^{(s+1)}-\bar{x}| \leqq K_\lambda |x^{(s)}-\bar{x}|$ $(s=0,1,2,\cdots)$,

(III) $\quad |h^{(s+1)}| \leqq K_\lambda |h^{(s)}| \quad (s=0,1,2,\cdots)$

(IV) $\quad S(x^{(s+1)}) \leqq S(x^{(s)}) \quad (s=0,1,2,\cdots)$"

(I)の証明. $\mathrm{grad}\, S(\bar{x})=0$ であるから補助定理2の直接の結果である。即ち補助定理2で $\lambda=0$ とすればよい。

(II)の証明. $p^{(s)} = x^{(s)} - \bar{x} \quad (s=0,1,2,\cdots)$ とおく。$h^{(s)} = x^{(s+1)} - x^{(s)} = p^{(s+1)} - p^{(s)}$ であるから(4)の中に代入

(5) $$B_\lambda(x^{(s)})(p^{(s+1)} - p^{(s)}) = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)}).$$

故に

$$B_\lambda(x^{(s)}) p^{(s+1)} = B_\lambda(x^{(s)}) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

をうる。$x^{(s)} = \bar{x} + p^{(s)}$ に注意して

(6) $$g_\lambda(p^{(s)}) = (B_\lambda(x^{(s)}) + \lambda C(\bar{x}))\, p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

とおく。補助定理4の μ_λ に対して適当な正数 δ_λ をとれば $|x^{(s)} - \bar{x}| \leqq \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_\lambda(p^{(s)})| \leqq \mu_\lambda |p^{(s)}|$$

が成立つことを示す。そのため(6)を成分について書けば

$g_{\lambda j}(p^{(s)})$

$$= \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} \Bigg(\frac{\partial f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_k}$$

$$+ (1-\lambda) f_i(\bar{x}+\rho^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} + \lambda f_i(\bar{x}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} \Bigg) \rho_k^{(s)}$$

$$- \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_j} f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} f_i(\bar{x}) \Bigg\{ \left(\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\theta_j \rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right)$$

$$+ \lambda \left(\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) \Bigg\} \rho_k^{(s)} + O(\rho^2)$$

$$(0 < \theta_j < 1)$$

$f \in C^2(D)$ であるから適当な正数 δ_λ をとれば $|x^{(s)} - \bar{x}| = |\rho^{(s)}| \leqq \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_\lambda(\rho^{(s)})| \leqq \mu_\lambda |\rho^{(s)}|.$$

よって (4) と (6) を用いて

$$B_\lambda(x^{(s)}) \rho^{(s+1)} = -\lambda C(\bar{x}) \rho^{(s)} + g_\lambda(\rho^{(s)})$$

と書けば $|x^{(s)} - \bar{x}| \leqq \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|\rho^{(s+1)}| \leqq \frac{\lambda \| C(\bar{x}) \| + \mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s)})} |\rho^{(s)}|$$

をうる。

$$\frac{\lambda \| C(\bar{x}) \| + \mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s)})} \leqq \frac{\lambda \| C(\bar{x}) \| + \mu_\lambda}{M_\lambda} \leqq K_\lambda < 1$$

より 初期値 $x^{(0)}$ を $|x^{(0)} - \bar{x}| \leqq \delta_\lambda$ の範囲にとれば

$$|\rho^{(1)}| \leqq K_\lambda |\rho^{(0)}|,$$

帰納法を用いれば

$$|x^{(s+1)} - \bar{x}| \leqq K_\lambda |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s=0,1,2,\cdots).$$

(II)の証明　$h^{(s+1)} = 0$ の場合(II)は明らかに成立つから $h^{(s+1)} \neq 0$ とする。$|h^{(s)}|$, $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く。

(4)より

$$(*) \quad -\left(A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)}) + (1-\lambda)C(x^{(s+1)})\right)h^{(s+1)} = A^*(x^{(s+1)})f(x^{(s+1)})$$

が成立す，この右辺を成分について計算すれば

$$\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s+1)})$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x^{(s)}+h^{(s)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s)}+h^{(s)})$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)} \right)$$

$$\cdot \left(f_i(x^{(s)}) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_k^{(s)} + o(h^2) \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s)}) + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} + f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_k^{(s)} \right)$$

$$+ o(h^2)$$

$$= \lambda \sum_{k=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{m} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_k^{(s)} - g_j(x^{(s)}, h^{(s)})$$

こゝに $g_j(x^{(s)}; h^{(s)})$ は

$$g_j(x^{(s)}; h^{(s)}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} f_i(x^{(s)}) \left\{ \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right\} h_k^{(s)}$$
$$+ o(h^2)$$

$f \in C^2(D)$ であるから，適当な正数 α_1 をとれば $x^{(s)} \in D$, $|h^{(s)}| \leqq \alpha$ に対して

$$|g(x^{(s)}; h^{(s)})| \leqq \mu_\lambda |h^{(s)}|.$$

が成立つ　そして（＊）は

(7)　$B_\lambda(x^{(s+1)})\, h^{(s+1)} = \lambda\, C(x^{(s)})\, h^{(s)} + g(x^{(s)}; h^{(s)})$.

$h^{(s+1)} \neq 0$ であるから (7) と $h^{(s+1)}$ との内積を考えれば

$$(B_\lambda(x^{(s+1)}) h^{(s+1)}, h^{(s+1)}) = -\lambda\,(C(x^{(s+1)}) h^{(s)}, h^{(s+1)})$$
$$+ (g(x^{(s)}; h^{(s)}), h^{(s+1)})$$

そして

$$M_\lambda(x) = \min_{H} (B_\lambda(x) h, h)$$

とおけば　$h^{(s+1)} \neq 0$ より　$|h^{(s)}| \leqq \alpha$ のときに

(8)　$|h^{(s+1)}| \leqq \dfrac{\lambda \| C(x^{(s)}) \| + \mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s+1)})} |h^{(s)}|$

が成立つ。　$M_\lambda = \min_{D \times H} (B_\lambda(x) h, h)$ とおけば

$M_\lambda \leqq M_\lambda(x^{(s+1)})$ であるから

(9)　$|h^{(s+1)}| \leqq (\| C(x^{(s)}) \| + \mu_\lambda) / M_\lambda \cdot |h^{(s)}|$.

(8) および (9) は $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式関係である。つぎに $\{h^{(s)}\}$ が $|h^{(s)}|$ の意味で単調に減少して 0 に近づくことを示すため帰納法を用いる。補助定理5より適当な δ_1 を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}| \leqq \delta_2$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|h^{(0)}| \leqq \alpha$$

が成立つ。よって $h^{(0)}$ は ( ) の範囲にある。従って

$$|h^{(1)}| \leqq K_\lambda |h^{(0)}| \qquad (K<1)$$

従って $|h^{(1)}| \leqq \alpha$, 帰納法により

$$|h^{(s+1)}| \leqq K_\lambda |h^{(s)}| \qquad (s=0,1,2,\cdots).$$

(10) の証明

$$S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)}) = \sum_{i=1}^{m} \{ (f_i(x^{(s)}+h^{(s)}))^2 - f_i(x^{(s)})^2 \}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \Big[\Big(f_i(x^{(s)}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)} \Big)^2 - \big(f_i(x^{(s)})\big)^2 \Big]$$

$$= 2 \sum_{i,j} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + \sum_{i,j,k} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)}$$

$$+ \sum_{i,j,k} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)}$$

$$= \lambda \big(C(x^{(s)}) h^{(s)}, h^{(s)} \big) - \big(B_\lambda(x^{(s)}) h^{(s)}, h^{(s)} \big)$$

$$+\sum_{i,j,k} p_i(x^{(s)})\left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k}\right)h_j^{(s)}h_k^{(s)}$$

$f\in C^2(D)$ であるから適当な正数 δ_2, α_2 を選べば

$$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_2,\qquad |h^{(s)}|\leqq\alpha_2$$

における $x^{(s)}, h^{(s)}$ に対して

$$\left|\sum_{i,j,k} p_i(x^{(s)})\left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k}\right)h_j^{(s)}h_k^{(s)}\right|\leqq\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

さらに $\delta_3(\leqq\delta_2)$ を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_3$ の $x^{(0)}$ に対し $|h^{(0)}|\leqq\alpha_2$ よって $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_3$ を $x^{(0)}$ の出発値として選ぶとき $|p^{(s)}|=|x^{(s)}-\bar{x}|$, $|h^{(s)}|$ の単調減少性より

$$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_3,\qquad |h^{(s)}|\leqq\alpha_2$$

またこの範囲の $x^{(s)}, h^{(s)}$ に対して

$$S(x^{(s+1)})-S(x^{(s)})=-\left(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}\right)+\lambda\left(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}\right)+\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

である。δ_3 を補助定理4の δ_λ より小さく選べば、補助定理4を用いて

$$S(x^{(s+1)})\leqq S(x^{(s)})\quad(s=0,1,2\cdots)$$

が証明される。