

最小自乗法における Algorithm

富山大文理

京大 数研

田中 卑一郎

§1. 最小自乗法と algorithm

函数

$$(1.1) \quad y = y(a, t) = y(a_1, a_2, \dots, a_n, t)$$

の t_i における実験値を y_i とする. ここに t_i は

$$t_1 < t_2 < \dots < t_m \quad (m \geq n)$$

とし, $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ は t に無関係とする. 実験値 y_i には一般には誤差を含む. このとき,

$$(1.2) \quad S(a) = \sum_{i=1}^m \omega(t_i) (y(a, t_i) - y_i)^2$$

の値を最小にするという a を求めることを 一般的な最小自乗法の問題である. ここで“一般的な”という意味は (1.1) の $y(a, t)$ が a に関して *nonlinear* でもよく, t_i も一般には不等同隔でよいからである. (1.2) における $\omega(t)$ は $\omega(t_i) > 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) とする函数で *weight function* と呼ばれる.

$D \subset n$ 次元 Euclid 空間 R^n における有界な閉集合とし, 例えは a について, $y(a, t_i) \in C^\infty(D)$ と仮定しても, D 全体における $S(a)$ の最

小値を求めることは、特別な場合を除き、極めて厄ずかしい。そこでわれわれの問題を *local* な問題、即ち $U \subset D$ の適当な近傍 U をとって、 U における最小値 (もしあれば) とその最小値をとる a を求める問題としよう、そのとき

$$f_i(a) = \sqrt{\omega(t_i)} (y(a, t_i) - y_i) \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

と考えることにより上の問題は次のように一般化する：と出来る

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

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

$$S(x) = |f(x)|^2 \quad (\equiv \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2)$$

とおく。 R^n の領域 D において

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

$$(A.2) \quad \text{grad } S(x) = 0 \text{ となる } x = \bar{x} \text{ が } D \text{ の中に存在する}$$

$$(A.3) \quad \text{この条件については §2. で詳しく述べられる。}$$

の仮定のもとに、 $\bar{x} \in U \subset D$ なる適当な近傍 U をとり、 $\min_{x \in U} S(x)$ とする x を決定する。

特に (1.1) の a に関して *linear*, 即ち

$$y(a, t) = \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(t)$$

の型の場合は、いわゆる最小自乗法として知られているが、われわれの準備としてそれに對する $f(x) = Ax + b$ の場合を考へよう。

補助定理 1 A は rank n の $m \times n$ 行列, x は 任意の n 次元ベクトル とし、

$$f(x) = Ax + b$$

とすると $S(x) = |f(x)|^2$ の値を最小にする $\bar{x}$ は連立一次方程式

$$A^* A x + A^* b = 0$$

の根であり、 $\bar{x} = -(A^* A)^{-1} A^* b$ と表ける。ここに A^* は A の転置行である。また、任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$S(x) = S(\bar{x}) + |A(x - \bar{x})|^2$$

が成り立ち、従って $x \neq \bar{x}$ の任意の x に対して

$$S(x) > S(\bar{x})$$

である。

つまり $\bar{x}$ は固定されたベクトルとし

$$S(x) = |f(x)|^2, \quad S(x, h) = |A(x)h + f(x)|^2$$

と置き、この h を補助定理1の x と考えれば、直ちに次の補助定理2を得る。

補助定理2 x は固定されたベクトルとする $m \times n$ 行列 $A(x)$ の rank が n ならば

$$S(x, h) = |A(x)h + f(x)|^2$$

を最小にする $\bar{h}$ は

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

または $\bar{h} = -(A^*(x)A(x))^{-1}A^*(x)f(x)$ で与えられる。さらに $h \in \mathbb{R}^n$ の任意の h に対して

$$S(x, h) - S(x, \bar{h}) = |A(x)(h - \bar{h})|^2$$

が成り立ち、特に $h = 0$ とすれば

$$S(x) - S(x, \bar{h}) = |A(x)\bar{h}|^2.$$

この準備のもとに、われわれの問題に戻ろう。 $f(x) \in C^1$ より絶対値の十分小さい h に対して

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

が成り立つ。ここに x は一定固定されたベクトル、 $A(x)$ は $m \times n$ ($m \geq n$) の Jacoby 行列

$$(1.3) \quad A(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \right) \quad (i=1, 2, \dots, m, j=1, 2, \dots, n)$$

である。元のある近傍で $A(x)$ の rank は n である仮定しよう。 $S(x) = |f(x)|^2$ 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は簡単ではない。そこで

$$|f(x^{(0)}+h)| \approx |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|$$

であることと、 $S(x^{(0)}; h) = |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|^2$ の最小値をとる $h = h^{(0)}$ は補助定理 2 より容易に求まるから、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。言い換えれば、 $x = x^{(0)} + h^{(0)}$ 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。

帰納法により次の系列 $\{x^{(s)}\}, \{h^{(s)}\}$ が得られる。即ち適当に $x^{(0)}$ を初期値にとれば、 $s=0, 1, 2, \dots$ なるすべての s に対して $x^{(s)}$ に対して

$$S(x^{(s)}; h) = |A(x^{(s)})h + f(x^{(s)})|^2$$

を最小にする $h = h^{(s)}$ を選ぶ。つまり $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。この系列の求め方を algorithm の型に書けば次のようになる。

Algorithm (Jacobi) 適当に初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ $s=0, 1, 2, \dots$ に対して $x^{(s)}$ に対して連立一次方程式

であり、 y_i のとり方から optimum solution $x = \bar{x}$ に於ける $|f(x)|$ は一般には小さい。そこで $|f(\bar{x})|$ がいかに小さい不等式

$$\min_{1 \leq i=1}^m |A(\bar{x})e_i|^2 > |f(\bar{x})| \sqrt{\sum_{i=1}^m \|C(\bar{x})\|^2}$$

を満たすならば (A.3) が成り立つ。このような意味で (A.3) を仮定する。仮定 (A.3) に関する補助定理を述べよう。

$$H = \{e_i \mid \|e_i\| = 1, e_i \in R^n\}, \quad M(x) = \min_H |A(x)e_i|^2$$

と置く。

補助定理3. $m \times n$ 行列 $A(x)$ の要素は領域 D で連続とする。任意の正数 ε に対して $\bar{x}$ の適当な δ 近傍 V_δ を D の中にとれば

$$0 \leq \min_H |A(\bar{x})e_i|^2 - \min_{V_\delta \cap H} |A(x)e_i|^2 < \varepsilon.$$

補助定理4. $A(x), C(x)$ の要素は D で連続、かつ仮定 (A.3) を満たす。そのとき、不等式

$$\gamma = \|C(\bar{x})\| / M(\bar{x}) + \varepsilon_0 < 1$$

を満たす任意の ε_0 も固定した正数 ε_0 を選ぶ。それに対して

$$0 < \mu < \varepsilon = \frac{\varepsilon_0 M(\bar{x})^2}{(1 + \varepsilon_0) M(\bar{x}) + \|C(\bar{x})\|}$$

を満たす μ を選ぶ。そのとき $\bar{x}$ の適当な δ 近傍 V_δ を D の中にとれば

$$\frac{\max_{V_\delta} \|C(x)\| + \mu}{\min_{V_\delta \cap H} |A(x)e_i|^2} < \frac{\|C(\bar{x})\|}{M(\bar{x})} + \varepsilon_0$$

補助定理4の系. $A(x), C(x)$ の要素は D で連続かつ仮定 (A.3) を満たす。そのとき、次の命題 (A.3) と (A.4) は同値である。

$$(A.3) \quad \|C(\bar{x})\| < \min_H |A(\bar{x})e_i|^2,$$

$$(A.4) \quad \max_D \|C(x)\| + \mu < \min_H |A(x)h|^2$$

と満足する正数 μ と $\bar{x}$ の近傍 V が存在する。

これらの補助定理の証明は数研講究録数値解析セミナー II に述べられる。

ここで最小自乗法における Jacobi の algorithm に関する定理を述べよう。

定理 1. (A.1) R^n の領域 D で $f(x) \in C^1(D)$,

(A.2) $\text{grad } S(x) = 0$ を満たす $x = \bar{x}$ が D の中に存在する,

$$(A.3) \quad \|C(\bar{x})\| < \min_H |A(\bar{x})h|^2$$

次に (A.1), (A.2), および (A.3) の仮定のもとに、適当な正数 δ_0 を選べば

$|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_0$ を満たす出発値 $x^{(0)}$ と Jacobi の algorithm (1.4) によ

り得る系列 $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III), (IV) が成り立つ

(I) $x = \bar{x}$ は V_{δ_0} における $S(x)$ の最小値を与える

$$(II) \quad |x^{(s+1)} - \bar{x}| \leq r |x^{(s)} - \bar{x}|, \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

$$(III) \quad |h^{(s+1)}| \leq r |h^{(s)}|, \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

$$(IV) \quad S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}), \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

ここに r は補助定理 3 の r 即ち

$$r = \frac{\|C(\bar{x})\|}{\min_H |A(\bar{x})h|^2} + \varepsilon_0 < 1.$$

この定理の証明も前巻数値解析セミナー II に述べられ、また定理 2 (後述) に殆んど含まれるので省略する。

§3. Newton-Jacobi の algorithm

方程式 $g(x) = 0$ の根を数値的に求める方法のうち、Newton 法は極めて有力である。いま

(1) $g(x) = 0$ とみたす $x = \bar{x}$ が存在する

(2) $\bar{x}$ の近傍で $g(x)$ の Jacobi 行列 $J(x)$ は正則である.

この二条件のもとで Newton の procedure は次のように書くことが出来る.

(α) 初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中から適当に選ぶ.

(β) 任意の non-negative integer s に対して

$$(3.1) \quad J(x^{(s)}) h^{(s)} = -g(x^{(s)})$$

を満たす $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく

さて、最小自乗法において $S(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ の値を最小にする x は $\text{grad } S(x) = 0$ と満たす. $\text{grad } S(x) = 0$ となる

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

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 $J(x)$ の j 行要素は

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

であるから (3.1) に対応する h に関する一次方程式は

$$(3.2) \quad (A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}) + C(x^{(s)})) h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

と書かれる. ここで $A(x)$, $C(x)$ はそれぞれ (1.3), (2.1) により定義される行列である.

よって最小自乗法における Newton の procedure は次のようにする.

(α) 初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中から適当に選ぶ.

(β) 任意の non-negative integer s に対して $x^{(s)}$ が既知ならば (3.2) と満たす $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく.

ここで Newton の procedure を一般化して procedure を考へる。そのため、
Jacobi の procedure と Newton の procedure とを比較する。これらの
procedure で異なるのは h を求める連立一次方程式

$$(1.4) \quad A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) h^{(s)} = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)}) \quad (\text{Jacobi})$$

$$(3.2) \quad (A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) + C(x^{(s)})) h^{(s)} = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)}) \quad (\text{Newton})$$

であり、 $C(x)$ があるだけしかの違いのみである。よって h を求める方程式
を、 λ を $0 \leq \lambda \leq 1$ の定数として

$$(3.3) \quad B_\lambda(x^{(s)}) h^{(s)} = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

$$\text{ここに} \quad B_\lambda(x^{(s)}) = A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) + (1-\lambda) C(x^{(s)})$$

とする procedure を考へれば、Jacobi と Newton の procedure と同時に扱
ることが出来る。よって新しい procedure を次のように定義しよう。

(a) $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中から適当に選ぶ。

(b) 任意の non-negative integer s に対して

$$B_\lambda(x^{(s)}) h^{(s)} = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)}) \quad (0 \leq \lambda \leq 1)$$

を解いて $h^{(s)}$ を求める。 $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

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

補助定理 5. $\min_H |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|$ ならば $0 \leq \lambda \leq 1$ の任意の λ に
対して $\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \|C(\bar{x})\|$.

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

$$\|C\| \geq |(Ch, h)|$$

よって I を単位行列とすると 任意の $h \in H$ に対して

$$((\|C\|I + C)h, h) \geq 0$$

$$\text{よって} \quad \min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) = (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h})$$

ε 洞に $\hat{h} \in H$ を存在する。よって

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

補題 1. 任意の正数 ε に対して、適当な $\bar{x}$ の近傍 V_λ を選べば

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

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

証明. 仮定より 任意の正数 ε に対して、適当な $\bar{x}$ の近傍 V_λ を選べば、 $x \in V_\lambda$ の任意の x に対して

$$\|B_\lambda(x) - B_\lambda(\bar{x})\| \leq \varepsilon, \quad \|C(x) - C(\bar{x})\| \leq \varepsilon$$

が成り立つ。従って

$$0 \leq \max_{V_\lambda} \|C(x)\| - \|C(\bar{x})\| \leq \varepsilon,$$

$$\text{一方} \quad (B_\lambda(\bar{x})\bar{h}, \bar{h}) = \min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h),$$

$$(B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) = \min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h)$$

とすれば、 $\hat{x} \in V_\lambda$, $\bar{h}, \hat{h} \in H$ であるから

$$\begin{aligned} 0 &\leq (B_\lambda(\bar{x})\bar{h}, \bar{h}) - (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) \\ &\leq (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) - (B_\lambda(\hat{x})\hat{h}, \hat{h}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= ((B_\lambda(\bar{x}) - B_\lambda(\bar{x}')) \hat{h}, \hat{h}) \\
 &\leq \|B_\lambda(\bar{x}) - B_\lambda(\bar{x}')\| \leq \varepsilon. \quad (\text{証明終})
 \end{aligned}$$

補助定理6の系. $\bar{x}$ の δ_λ 近傍 V_λ と正数 μ_λ を適当に選べば,

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

証明. 補助定理5より

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

を満たす正数 μ_λ が存在する.^(註1) この両辺の差は 3ε とおき、補助定理6を用いる.

補助定理7. 任意の正数 ε に対して、 $\bar{x}$ の $\delta_{\lambda 1}$ 近傍 $V_{\lambda 1}$ とし、^(註2)
 $x^{(0)} \in V_{\lambda 1}$ と満たす任意の $x^{(0)}$ に対して $|\hat{h}^{(0)}| \leq \varepsilon$.

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

$$|A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})|/\mu_\lambda \leq \varepsilon$$

が成り立つ. ところが $\hat{h}^{(0)} \neq 0$ として $x^{(0)} \in V_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$\begin{aligned}
 \mu_\lambda |\hat{h}^{(0)}|^2 &\leq (B_\lambda(x^{(0)}) \hat{h}^{(0)}, \hat{h}^{(0)}) = -(A^*(x^{(0)})f(x^{(0)}), \hat{h}^{(0)}) \\
 &\leq |A(x^{(0)})f(x^{(0)})| |\hat{h}^{(0)}|
 \end{aligned}$$

従って $|\hat{h}^{(0)}| \leq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})|/\mu_\lambda \leq \varepsilon$. (証明終)

(註1) 補助定理5の証明をみれば

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

であるから、 μ_λ は λ に無関係に選べるようになる。

(註2) 補助定理7の証明をみれば、註1の注意により μ_λ は λ に無関係に選べるから $V_{\lambda 1}$ は λ に無関係に選べるようになる。

定理2 を述べる前に 定理で用いられる記号について述べる

$$M_{\lambda}(x^{(s)}) = \min_H (B_{\lambda}(x^{(s)})h, h),$$

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

$$K = \frac{\max_{x \in H} \|C(x)\| + M_{\lambda}}{M_{\lambda}} < 1$$

定理2. 定理1 と同じ仮定のもとに 適当な正数 $\delta_{\lambda 0}$ を選べば

$|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_{\lambda 0}$ を満たす任意の始値と Newton-Jacobi の algorithm に付て
 生ずる $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III), (IV) が成り立つ.

(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.

$$(II) \quad |x^{(s+1)} - \bar{x}| \leq r_{\lambda 1}^{(s)} |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

$\leq K \quad r_{\lambda 1}^{(s)}$ は

$$r_{\lambda 1}^{(s)} = \frac{\lambda \|C(\bar{x})\| + L_{\lambda} |x^{(s)} - \bar{x}|}{M_{\lambda}(x^{(s)})} \leq K (< 1),$$

$$(III) \quad |h^{(s+1)}| \leq r_{\lambda}^{(s)} |h^{(s)}| \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

$\leq K \quad r_{\lambda}^{(s)}$ は

$$r_{\lambda}^{(s)} = \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_{\lambda} |h^{(s)}|}{M_{\lambda}} \leq K.$$

$$(IV) \quad S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}) \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

(I) の証明. $\text{grad } S(\bar{x}) = 0$ であるから 補助定理5 の直接の結果である. 即ち 補助定理5 で $\lambda = 0$ とおけばよい.

(II) の証明. $p^{(s)} = x^{(s)} - \bar{x} \quad (s=0, 1, 2, \dots)$ とおく. $h^{(s)} = x^{(s+1)} - x^{(s)} = p^{(s+1)} - p^{(s)}$ であるから (3.3) の中 K 代入すると.

$$(3.4) \quad B_{\lambda}(x^{(s)}) p^{(s+1)} = B_{\lambda}(x^{(s)}) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

をみる. $x^{(s)} = \bar{x} + p^{(s)}$ に注意して

$$(3.5) \quad g_{\lambda}(p^{(s)}) = (B_{\lambda}(x^{(s)}) + \lambda C(\bar{x})) p^{(s)} - A(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

とおく。 $g_{\lambda}(p^{(s)})$ はベクトルで、ある適当な正数 δ_{λ} があるとき、 $|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_{\lambda}$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g(p^{(s)})| \leq L_{\lambda} |p^{(s)}|^2$$

が成立することを示す。そのために (3.5) を成分について書けば、

$$\begin{aligned} g_{\lambda_j}(p^{(s)}) &= \sum_{i,k} \left(\frac{\partial f_i(\bar{x} + p^{(s)})}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial f_i(\bar{x} + p^{(s)})}{\partial x_k} + (1-\lambda) f_i(\bar{x} + p^{(s)}) \cdot \frac{\partial^2 f_i(\bar{x} + p^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right. \\ &\quad \left. + \lambda f_i(\bar{x}) \cdot \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} \right) p_k^{(s)} - \sum_i \frac{\partial f_i(\bar{x} + p^{(s)})}{\partial x_j} \cdot f_i(\bar{x} + p^{(s)}) \\ &= \sum_{i,k} \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k} + f_i(\bar{x}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} + o(p) \right) p_k^{(s)} \\ &\quad - \sum_i \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_k \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} p_k^{(s)} \right) \left(f_i(\bar{x}) + \sum_k \frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k} p_k^{(s)} \right) \end{aligned}$$

この式で p について一次の項まで計算すれば、 $\frac{1}{2} g_{\text{quad}} S(\bar{x}) = \sum_i \frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} f_i(\bar{x}) = 0$ を用いて 0 となる。従って適当な正数 L_{λ} と δ_{λ} があるとき、 $|x^{(s)} - \bar{x}| = |p^{(s)}| \leq \delta_{\lambda}$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_{\lambda}(p^{(s)})| \leq L_{\lambda} |p^{(s)}|^2.$$

(3.4) と (3.5) を用いて

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

この両辺と $p^{(s+1)}$ との内積をとる

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

とすると、 $M_{\lambda}(x) = \min_H (B_{\lambda}(x) h, h)$ であるから

$$\begin{aligned} M_{\lambda}(x^{(s)}) |p^{(s+1)}|^2 &\leq (B_{\lambda}(x^{(s)}) p^{(s+1)}, p^{(s+1)}) \\ &\leq \lambda \|C(\bar{x})\| |p^{(s)}| |p^{(s+1)}| + L_{\lambda} |p^{(s)}|^2 |p^{(s+1)}| \end{aligned}$$

従って $|\chi^{(s)} - \bar{\chi}| \leq \delta_\lambda$ の任意の $\chi^{(s)}$ に対して

$$|p^{(s+1)}| \leq \frac{\lambda \|C(\bar{\chi})\| + L_\lambda |p^{(s)}|}{M_\lambda(\chi^{(s)})} \cdot |p^{(s)}|$$

とる. 正数 $\delta_{0\lambda}$ とし

$$\delta_{0\lambda} = \min(\mu_\lambda / M_\lambda, \delta_\lambda)$$

とすれば, $|\chi^{(s)} - \bar{\chi}| \leq \delta_{0\lambda}$ の任意の $\chi^{(s)}$ に対して

$$\frac{\lambda \|C(\bar{\chi})\| + L_\lambda |p^{(s)}|}{M_\lambda(\chi^{(s)})} \leq \frac{\lambda \|C(\bar{\chi})\| + \mu_\lambda}{M_\lambda} = K (< 1)$$

よって 初期値 ε $|\chi^{(0)} - \bar{\chi}| \leq \delta_{0\lambda}$ の範囲にとれば

$$|p^{(1)}| \leq \gamma_{\lambda 1}^{(0)} |p^{(0)}|$$

が成立する. ことに

$$\gamma_{\lambda 1}^{(s)} = \frac{\lambda \|C(\bar{\chi})\| + L_\lambda |p^{(s)}|}{M_\lambda(\chi^{(s)})}$$

よって帰納法を用いれば

$$|\chi^{(s+1)} - \bar{\chi}| \leq \frac{\lambda \|C(\bar{\chi})\| + L_\lambda |\chi^{(s)} - \bar{\chi}|}{M_\lambda(\chi^{(s)})} |\chi^{(s)} - \bar{\chi}|$$

(Ⅲ) の証明. $h^{(s+1)} = 0$ のとき (Ⅲ) は明らかに成立つから, $h^{(s+1)} \neq 0$ とする. また $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く. (3.2) より

$$(3.6) \quad -[A^*(\chi^{(s+1)})A(\chi^{(s+1)}) + (1-\lambda)C(\chi^{(s+1)})]h^{(s+1)} = A^*(\chi^{(s+1)})f(\chi^{(s+1)})$$

が成立し, この右辺を各成分について計算すれば $j=1, 2, \dots, n$ に対して

$$\begin{aligned} (3.7) \quad & \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_i(\chi^{(s+1)})}{\partial x_j} \cdot f_i(\chi^{(s+1)}) \\ &= \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_i(\chi^{(s)} + h^{(s)})}{\partial x_j} \cdot f_i(\chi^{(s)} + h^{(s)}) \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{p=1}^n \frac{\partial^2 f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} h_p^{(s)} + \dots \right) \left(f_i(\chi^{(s)}) + \sum_{p=1}^n \frac{\partial f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_p} h_p^{(s)} + \dots \right) \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_j} f_i(\chi^{(s)}) + \sum_{p=1}^n \left(\frac{\partial f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_p} + f_i(\chi^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(\chi^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} \right) h_p^{(s)} \right. \\ & \quad \left. + \dots \right) \end{aligned}$$

一方 $h^{(s)}$ の3方向から

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_p} + (1-\lambda) f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} \right) h_p^{(s)} = - \sum_i \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s)})$$

から (3.7) は

$$\sum_{i=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s+1)}) = \lambda \sum_{i=1}^n \left(\sum_{i=1}^m f_i(x^{(s)}) \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} \right) h_p^{(s)} - g_j(x^{(s)}, h^{(s)})$$

と表われる. $\therefore$ $g_j(x, h)$ は十分小さい h に対して

$$|g_j(x, h)| \leq k_j |h|^2 \quad (j=1, 2, \dots, n)$$

が成立し, 従って (3.7) は

$$(3.8) \quad B_\lambda(x^{(s+1)}) h^{(s+1)} = -\lambda C(x^{(s)}) h^{(s)} + g(x^{(s)}, h^{(s)})$$

と書かれる. $\therefore$ $g(x, h)$ は $g_j(x, h)$ を成分にもつベクトルで

$$(3.9) \quad |x - \bar{x}| < \delta, \quad |h| < \alpha$$

の (x, h) に対して不等式

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

を満たす正数 L_λ が存在する. 仮定より $h^{(s+1)} \neq 0$ であるから $h^{(s+1)}$ と

(3.8) の内積を考へれば (II) の場合と強いて同様にして

$$(3.10) \quad |h^{(s+1)}| \leq \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_\lambda |h^{(s)}|}{M_\lambda(x^{(s+1)})} \cdot |h^{(s)}|$$

が成立つ. $M_\lambda = \min_{x \in H} (B_\lambda(x) h, h)$ とおけば $M_\lambda \leq M_\lambda(x^{(s+1)})$ であるから

$$(3.11) \quad |h^{(s+1)}| \leq \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_\lambda |h^{(s)}|}{M_\lambda} \cdot |h^{(s)}|$$

をうる. (3.10) および (3.11) は $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ との間の不等式関係である.

次に $\{h^{(s)}\}$ 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7より適当に δ_λ 近傍 ($\delta_{\lambda 1} \leq \delta_{\lambda 0}$) を選べば $|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|h^{(0)}| \leq \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha)$$

従って

$$L|h^{(0)}| \leq \mu_\lambda, \quad |h^{(0)}| \leq \alpha$$

が成立つ。よって $h^{(0)}$ は (3.9) の範囲にある。従って

$$K = \frac{\lambda \max_{\bar{V}_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda}{\min_{\bar{V}_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h)} < 1$$

とあるとす

$$r_\lambda^{(0)} = \frac{\lambda \|C(x^{(0)})\| + L_\lambda |h^{(0)}|}{M_\lambda} \leq K$$

$$|h^{(1)}| \leq r_\lambda^{(0)} |h^{(0)}|$$

帰納法によつて

$$|h^{(s+1)}| \leq r_\lambda^{(s)} |h^{(s)}|$$

$$r_\lambda^{(s)} = \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_\lambda |h^{(s)}|}{M_\lambda} \leq K < 1.$$

(IV) の証明.

$$S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)})$$

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

$$= \sum_{i=1}^m \left\{ \left(f_i(x^{(s)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^n \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)} + \dots \right)^2 - (f_i(x^{(s)}))^2 \right\}$$

$$= 2 \sum_{i,j} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + ((A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}) + C(x^{(s)}))h^{(s)}, h^{(s)}) + \dots$$

$$= -2 (B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + (B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \lambda (C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \dots$$

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

右辺の $\dots$ は $h^{(s)}$ に關し 三次以上の項をあらわす適当な正数 $L_\lambda, \delta_\lambda, \alpha_\lambda$ を選べば、

$$|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_\lambda', \quad |h^{(s)}| \leq \alpha_\lambda' \quad (2)$$

に於て

$$S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)}) \leq -(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + L_\lambda|h^{(s)}|^3$$

が成立つ。さらに適当な正数 δ_λ'' を選べし ($\delta_\lambda'' \leq \delta_\lambda'$) $|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_\lambda''$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|h^{(s)}| \leq \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha_\lambda')$$

が成立つ。よつて $|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_\lambda''$ をみたす $x^{(s)}$ を出発値として選ぶとき、

$|p^{(s)}| = |x^{(s)} - \bar{x}|$, $|h^{(s)}|$ の広義単調減少性から

$$|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_\lambda'', \quad |h^{(s)}| \leq \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha_\lambda')$$

が成立つ。またこの範囲の任意の $x^{(s)}$, $h^{(s)}$ に対して

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

である。 δ_λ'' を補助定理6の系の δ_λ より小さく選ぶとき、補助定理6の系を用いて

$$(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) \geq \lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

が証明される。よつて

$$S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)})$$

参考文献

- (1) Ushibe, Minoru, Error Estimation in Numerical Solution of Equations By Iteration Process, J. Sci. Hiroshima Univ., Ser. A, 26 (1962) 77-91.

- (2) Urabe, Minoru, Galerkin's Procedure for Nonlinear Periodic Systems, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 20 (1965) 120-152.
- (3) 占部 実, Numerical Method for Solving a system of Non-linear Equations. 数値解析セミナー (講究録)
- (4) 田中 専一郎, 数値解析におけるニミの問題, 流体力学と数値計算シンポジウム (講究録)