

灰色理論 GM における精度改善への新しい提案と評価

New Proposal and Evaluation Based on Grey Theory GM

李 国棟† 山口 大輔† 水谷 晃三† 永井 正武†
Guodong Li† Daisuke Yamaguchi† Kozo Mizutani† Masatake Nagai†

灰色システムは部分情報既知,部分情報未知状態のシステムである。灰色理論に基づく灰色予測モデルは各種システムの予測に対してきわめて重要な意義を持つ。灰色理論による GM はモデルとして既に確立しているが, 数値処理上の精度に問題がある。特に, 多次元と多変量の場合は予測の正確さが大幅に下がる。データマイニング上,現実の適用問題としては問題となる。本論文は, 3 次スプライン関数を導入し, 新しい公式を誘導した,改善型 GM を提案する。さらにテイラー級数法による精度上の改良法を実現する。具体例を挙げて, 各モデルでの精度を検証する。その結果,提案した新しいモデルの予測精度は大幅に高まったことを報告する。

A grey system is a system of partial information known and a partial information strange state. The grey forecasting model based on grey theory is a very important meaning to social system prediction. Although GM by prediction grey theory is proposed as a model, a problem is in the accuracy on numerical processing. In many dimensions and many variables, especially the correctness of prediction falls rapidly. As an actual application problem, it becomes a problem on data mining. This paper introduces the spline function, and a new formula is reasoned, and new improved type GM is proposed, and improvement on the accuracy by the Taylor series method is realized further. Examples are given and the accuracy in each model is analyzed. After all ,the prediction accuracy of the new model increased sharply.

1. はじめに

未知の状態や発生するであろうという不確定的な事象を予測する時に, 予測精度が良くないことは大きな問題である。さらに現実の未知状態変動が大きい場合は, 予測値と真値の誤差が明らかにデータマイニング上問題とされる。灰色理論予測 GM(Grey Model) [1][2] も同様な課題が生じる。

この問題を解決するために, 本論文は GM に 3 次スプライン補間, さらに Taylor 級数による逐次近似方法を導入する。例として, GM(1, 3), GM(2, 1)について, それぞれ3次スプライン関数(以下, これを 3spGM と略記), Taylor 級数法による逐次近似 [6](以下, これを T-3spGM と略記)の各モデルを評価する。各モデルごとに予測精度が異なることは明らかである。提案された GM モデルの精度は, 既存の GM よりも高まったことを報告する。

† 帝京大学大学院理工学研究科

† Graduate school of Science and Engineering, Teikyo University

2. 灰色予測モデルの数学的準備

GM(n,m)は変数 m,n 階微分方程式モデルを表す。

2.1 GM(1,1)

2.1.1 GM(1,1)定義

灰色理論により, GM(1, 1)モデルを次式のように記述する。

$$\frac{dx^{(1)}}{dt} + ax^{(1)} = b \quad (1)$$

式(1)の離散解は,

$$x^{(1)}(i) = (x_0 - b/a)e^{-ai} + b/a, (i=1,2,\dots,n) \quad (2)$$

最小二乗法を利用すると, 式(2)中のパラメータ値 a および b は次式で得られる。

$$\hat{a} = [a \quad b]^T = [A^T A]^{-1} A^T X_n \quad (3)$$

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(x^{(1)}(0) + x^{(1)}(1)) & 1 \\ -\frac{1}{2}(x^{(1)}(1) + x^{(1)}(2)) & 1 \\ \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{2}(x^{(1)}(n-1) + x^{(1)}(n)) & 1 \end{bmatrix}$$

$$X_n = [x^{(0)}(1) \quad x^{(0)}(2) \quad \dots \quad x^{(0)}(n)]^T$$

$$\hat{x}^{(0)}(i) = \hat{x}^{(1)}(i) - \hat{x}^{(1)}(i-1), (i=1,2,\dots,n) \quad (4)$$

ただし, $\hat{x}^{(1)}(0) = x^{(0)}(0)$ 。

$i > n$ の時, 式(4)の計算値は予測値となる。

2.1.2 GM(1,1)の精度検証

モデルの精度検証は, 予測値と真値誤差の百分率を採用する。精度変動±5%以内であれば, そのモデルは使用できる。もし原始数列の変動が小さければ, 精度の変動範囲は±5%より大幅に小さいことになる。実際に, 検証する時には, 関連度および残差による方法を利用する。下記の定義のように表すと,

$$\varepsilon(i) = x^{(1)}(i) - \hat{x}^{(1)}(i), (i=1,2,\dots,n)$$

となる。残差の平均値 ε と平方差 D は次式で得られる。

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varepsilon(i), \quad D = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varepsilon(i) - \varepsilon)^2}$$

原始数列の平均値 $x^{(0)}(0)$ と平方差 D_0 は次式にて得られる。

$$x^{(0)}(0) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(0)}(i), \quad D_0 = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^{(0)}(i) - x^{(0)}(0))^2}$$

上式より, 後検差比 C は, $C = \frac{D}{D_0}$, 小誤差確率 p は,

$$p = p\{|\varepsilon(i) - \varepsilon| < 0.6745D_0\}.$$

後検差比は小さければ小さいほどよい。逆に小誤差確率は大きければ大きいほどよい。そこで, 灰色理論によれば, 表1のように4つのランク標準が設けられている^{[1][2]}。

2.2 GM(1,n)

GM(1,1)と同様に, モデルを下記のように記述する。

$$\frac{dx_1^{(1)}}{dt} + ax_1^{(1)} = b_1x_2^{(1)} + b_2x_3^{(1)} + \dots + b_{n-1}x_n^{(1)} \quad (5)$$

式(5)の離散解は,

$$\hat{x}^{(1)}(j) = \left(x_1^{(0)}(0) - \frac{1}{a} \sum_{i=2}^n b_{i-1}x_i^{(1)}(j) \right) e^{-a(j-1)} + \frac{1}{a} \sum_{i=2}^n b_{i-1}x_i^{(1)}(j) \quad (6)$$

$$(i=2,3,\dots,n; j=1,2,\dots,m)$$

$$\hat{a} = [a \ b_1 \ b_2 \ \dots \ b_{n-1}]^T = [A^T A]^{-1} A^T X_n \quad (7)$$

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(0) + x_1^{(1)}(1)) & x_2^{(1)}(1) & \dots & x_n^{(1)}(1) \\ -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(1) + x_1^{(1)}(2)) & x_2^{(1)}(2) & \dots & x_n^{(1)}(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(n-1) + x_1^{(1)}(n)) & x_2^{(1)}(n) & \dots & x_n^{(1)}(n) \end{bmatrix}$$

$$X_n = [x_1^{(0)}(1) \ x_1^{(0)}(2) \ \dots \ x_1^{(0)}(n)]^T$$

$$\hat{x}_i^{(0)}(j) = \hat{x}^{(1)}(j) - x^{(1)}(j-1) \quad (8)$$

ただし, $(i=1,2,\dots,n; j=1,2,\dots,m)$, $\hat{x}_1^{(1)}(0) = x_1^{(0)}(0)$

表1 GM精度ランク標準

GM精度ランク	p	C
良い(Good)	≥ 0.95	< 0.35
合格(Qualified)	≥ 0.8	< 0.5
やや合格(Just Mark)	≥ 0.7	< 0.65
不合格(Unqualified)	< 0.7	≥ 0.65

2.3 GM(n,m)

ある数列 $[x_k^{(0)}(i)]$ について, 相互的な一次累加数列 $[x_k^{(1)}(i)]$ 及び $[x_k^{(1)}(i)]$ の多次累減数列 $[a^{(j)}x_k^{(1)}(i)]$ を以下に求める $(i=1,2,\dots,n; j=0,1,\dots,m; k=1,2,\dots,n)$ 。

$$\left. \begin{aligned} a^{(j)}(x_k^{(1)}, i) &= a^{(j-1)}(x_k^{(1)}, i) - a^{(j-1)}x_k^{(1)}(i-1) \\ &\vdots \\ a^{(0)}(x_k^{(1)}, i) &= x_k^{(1)}(i) \end{aligned} \right\}$$

これらの式を行列形式で表現すると,

$$A = \begin{bmatrix} -a^{(n-1)}(x_1^{(1)}, 0) & -a^{(n-2)}(x_1^{(1)}, 0) & \dots & -a^{(1)}(x_1^{(1)}, 0) \\ -a^{(n-1)}(x_1^{(1)}, 1) & -a^{(n-2)}(x_1^{(1)}, 1) & \dots & -a^{(1)}(x_1^{(1)}, 1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a^{(n-1)}(x_1^{(1)}, n) & -a^{(n-2)}(x_1^{(1)}, n) & \dots & -a^{(1)}(x_1^{(1)}, n) \end{bmatrix}$$

となり, 上式の中の $a^{(n-1)}(x_1^{(1)}, 1) \dots a^{(n-1)}(x_1^{(1)}, n)$ は $n-1$

階累減数列である。

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(0) + x_1^{(1)}(1)) & x_2^{(1)}(0) & \dots & x_n^{(1)}(0) \\ -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(1) + x_1^{(1)}(2)) & x_2^{(1)}(1) & \dots & x_n^{(1)}(1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{2}(x_1^{(1)}(n-1) + x_1^{(1)}(n)) & x_2^{(1)}(n) & \dots & x_n^{(1)}(n) \end{bmatrix}$$

上式中の $x_k^{(1)}(i)$ は原始数列 $x_k^{(0)}(i)$ の1次累加生成数列である。

$$X_n = [a^{(n)}(x_1^{(n)}, 1) \ a^{(n)}(x_1^{(n)}, 2) \ \dots \ a^{(n)}(x_1^{(n)}, n)]^T$$

上式中の $a^{(n)}(x_1^{(n)}, i)$, $(i=1,2,\dots,n)$ は累減生成した数列である。次に A と B による分割行列 $(A:B)$ を得る。したがって, $(A:B)$ と X_n とともに n 階微分方程式のモデルを次式で表現すると,

$$\frac{d^n x_1^{(1)}}{dt^n} + a_1 \frac{d^{n-1} x_1^{(1)}}{dt^{n-1}} + \dots + a_n x_1^{(1)} = b_1 x_2^{(1)} + b_2 x_3^{(1)} + \dots + b_{n-1} x_n^{(1)} \quad (9)$$

により, 求めたパラメータ \hat{a} 値は次式で得られる。

$$\hat{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n; b_1 \ b_2 \ \dots \ b_{n-1}]^T = [(A:B)^T (A:B)]^{-1} (A:B)^T X_n \quad (10)$$

2.4 GM(2,1)

GM(1, 1)と同様にモデルを次式のように記述する。

$$A = \begin{bmatrix} -a^{(1)}(x_1^{(1)}, 0) \\ -a^{(1)}(x_1^{(1)}, 1) \\ \vdots \\ -a^{(1)}(x_1^{(1)}, n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1^{(0)}(0) \\ -x_1^{(0)}(1) \\ \vdots \\ -x_1^{(0)}(n) \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(x^{(1)}(0) + x^{(1)}(1)) & 1 \\ -\frac{1}{2}(x^{(1)}(1) + x^{(1)}(2)) & 1 \\ \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{2}(x^{(1)}(n-1) + x^{(1)}(n)) & 1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$X_n = \begin{bmatrix} a^{(2)}(x_1^{(1)}, 1) & a^{(2)}(x_1^{(1)}, 2) & \dots & a^{(2)}(x_1^{(1)}, n) \end{bmatrix}^T \\ = \begin{bmatrix} x_1^{(0)}(1) - x_1^{(0)}(0) & x_1^{(0)}(2) - x_1^{(0)}(1) & \dots & x_1^{(0)}(n) - x_1^{(0)}(n-1) \end{bmatrix}^T$$

式(11), (12)の離散解(一般解)は,

$$\hat{x}_1^{(1)}(k+1) = c_1 e^{\lambda_1 k} + c_2 e^{\lambda_2 k} + \frac{b}{a_2} \quad (13)$$

となる。パラメータ $\hat{\alpha}$ 値は次式で得られる。

$$\hat{\alpha} = [a_1 \ a_2 \ b] = \left[[A:B]^T [A:B] \right]^{-1} [A:B]^T$$

GM(2,1)の微分方程式は以下ようになる。

$$\frac{d^2 x_1^{(1)}}{dt^2} + a_1 \frac{dx_1^{(1)}}{dt} + a_2 x_1^{(1)} = b \quad (14)$$

式(14)の特殊解は,

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 &= \text{Re } \lambda_1 + j \text{Im } \lambda_1 \\ \lambda_2 &= \text{Re } \lambda_2 + j \text{Im } \lambda_2 \end{aligned} \right\}$$

$$\text{ただし, } \lambda_i = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2}}{2}, \quad (i=1,2)$$

により,

① $\lambda_1 = \lambda_2$ 時,(重根: $a_1^2 - 4a_2 = 0$ の場合)

$$\hat{x}_1^{(1)}(k) = e^{\lambda_1 k} (c_1 + c_2 k) + \frac{b}{a_2}$$

方程式は単調の特性を示す。

② $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 時, $\text{Im } \lambda_i = 0$ (実根: $a_1^2 - 4a_2 > 0$ の場合)

$$\hat{x}_1^{(1)}(k) = c_1 e^{\lambda_1 k} + c_2 e^{\lambda_2 k} + \frac{b}{a_2}$$

方程式は非単調の特性となる。

③ $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 時, $\text{Im } \lambda_i \neq 0$ (共役複根: $a_1^2 - 4a_2 < 0$ の場合)

$$\lambda_{1,2} = -\frac{a_1}{2} \pm j \frac{\sqrt{4a_2 - a_1^2}}{2} = \alpha \pm j\beta$$

$$\hat{x}_1^{(1)}(k+1) = [c_1 \cos(\beta k) + c_2 \sin(\beta k)] + \frac{b}{a_2}$$

上記の方程式は周期性の特性を示す。

この時の c_1, c_2 は, 次のように求められる。

(1) $\frac{\sqrt{4a_2 - a_1^2}}{2} = 0$ の場合,

$$k=0, \quad x^{(1)}(0) = c_1 + c^* = x^{(0)}(0), \text{ ただし, } c^* = \frac{b}{a_2}$$

$$\frac{dx^{(1)}}{dk} = c_1 \lambda_1 + c_2 \approx x^{(1)}(1) - x^{(1)}(0) = x^{(0)}(1)$$

連立方程式の解が次のように得られる。

$$c_1 = x^{(0)}(0) - \frac{b}{a_2}, c_2 = x^{(0)}(1) - \left(x^{(0)}(0) - \frac{b}{a_2} \right) \lambda_1$$

(2) $\frac{\sqrt{4a_2 - a_1^2}}{2} > 0$ の場合,

$$k=0, \quad x^{(1)}(0) = c_1 + c_2 + c^* = x^{(0)}(0)。$$

$$\frac{dx^{(1)}}{dk} = c_1 \lambda_1 + c_2 \lambda_2 \approx x^{(1)}(1) - x^{(1)}(0) = x^{(0)}(1)$$

連立方程式の解が次のように得られる。

$$c_1 = x^{(0)}(0) - c_2 - \frac{b}{a_2}, c_2 = \frac{x^{(0)}(1) - \left(x^{(0)}(0) - \frac{b}{a_2} \right) \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

(3) $\frac{\sqrt{4a_2 - a_1^2}}{2} < 0$ 場合,

$$k=0, \quad x^{(1)}(0) = c_1 + c^* = x^{(0)}(0)。$$

$$\frac{dx^{(1)}}{dk} = \alpha c_1 + \beta c_2 \approx x^{(1)}(1) - x^{(1)}(0) = x^{(0)}(1)$$

連立方程式の解が次のように得られる。

$$c_1 = x^{(0)}(0) - \frac{b}{a_2}, c_2 = \frac{x^{(0)}(1) - \alpha \left(x^{(0)}(0) - \frac{b}{a_2} \right)}{\beta}$$

3. 3次スプライン GM の誘導^[3]

3.1 3次スプライン関数の定義

もし関数 $S(x)$ が区間 $[a, b]$ で以下の条件を満足すれば, $S(x)$ は区間 $[a, b]$ で $f(x)$ の 3 次スプライン関数とよぶ。

(1) $S(x), S'(x), S''(x)$ は区間 $[a, b]$ で連続であり,

$$S(x) \in C^2[a, b]$$

(2) サブ区間 $[x_k, x_{k+1}]$ ($k=0, 1, \dots, n-1$) は 3 次多項式であり, その中 $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ である。

(3) 節点である関数値 $f(x_i) = y_i$, ($i=1, 2, \dots, n$) にて, もし $S(x)$ は $S(x_i) = y_i$ ($i=1, 2, \dots, n$) である。

関数 $f(x)$ は区間 $[a, b]$ で節点 $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ 及び節点関数値を仮定する。 $f(x)$ の 3 次スプライン関数 $S(x)$ を求めるために, 次の式を満足する必要がある。

$$S(x_i) = y_i, \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (15)$$

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x), & x \in [x_0, x_1] \\ S_1(x), & x \in [x_1, x_2] \\ \vdots & \vdots \\ S_{n-1}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases} \quad (16)$$

式(16)で, $S_k(x)$ はサブ区間 $[x_k, x_{k+1}]$ での 3 次スプライン

ン多項式である。

$$S_k(x_i) = y_i, \quad (i = k, k+1; k = 0, 1, \dots, n-1)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0^+} S^{(p)}(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} S^{(p)}(x) \quad (17)$$

$(p = 0, 1, 2; k = 1, 2, \dots, n-1); (p : \text{導関数の階数})$

3.2 3次スプライン関数の分類

実際の問題において、スプライン関数の端点は存在する。それに対して、境界条件によって以下の3種類に分類される。

①第1類境界条件,

$$\left. \begin{aligned} S'(x_0) &= f'_0 \\ S'(x_n) &= f'_n \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

f'_0, f'_n は既知値であり、 $f'_0 = f'_n = 0$ の時、端点 $S(x)$ の傾斜度はゼロである。そのため、 $S(x)$ は端点の所で水平状態を表す。

②第2類境界条件,

$$\left. \begin{aligned} S''(x_0) &= f''_0 \\ S''(x_n) &= f''_n \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

③第3類境界条件,

もし $f(x)$ が周期関数であれば、 $x_n - x_0$ はその一個周期である。 $S(x)$ は $x_n - x_0$ 区間を周期とすると周期関数である。

$$\lim_{x \rightarrow x_0^+} S^{(p)}(x) = \lim_{x \rightarrow x_n^-} S^{(p)}(x), \quad (p = 0, 1, 2) \quad (20)$$

3.3 3spGM(1,1)~3spGM(1,n)の1次微分公式の誘導

$f(x)$ は区間 $[a, b]$ での関数値 y_j 及び導関数値 y'_j ($j = 1, 2, \dots, n$) である。 $x_{j-1} \leq x \leq x_j; j = 1, 2, \dots, n$ とおける。かつ $h_j = x_j - x_{j-1}$ とおくと3次スプラインの多項式は次の式になる。

$$S(x) = \left[\frac{3}{h_j^2}(x_j - x)^2 - \frac{2}{h_j^3}(x_j - x)^3 \right] y_{j-1} + \left[\frac{3}{h_j^2}(x - x_{j-1})^2 - \frac{2}{h_j^3}(x - x_{j-1})^3 \right] y_j \quad (21)$$

$$+ h_j \left[\frac{1}{h_j^2}(x_j - x)^2 - \frac{1}{h_j^3}(x_j - x)^3 \right] y'_{j-1} - h_j \left[\frac{1}{h_j^2}(x - x_{j-1})^2 - \frac{1}{h_j^3}(x - x_{j-1})^3 \right] y'_j$$

$\lim_{x \rightarrow x_j^-} S''(x) = \lim_{x \rightarrow x_j^+} S''(x)$ により、次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} 2y'_1 - \alpha_1 y'_2 &= \beta_1 - (1 - \alpha_1) y'_0 \\ (1 - \alpha_2) y'_1 + 2y'_2 + \alpha_2 y'_3 &= \beta_2 \\ (1 - \alpha_3) y'_2 + 2y'_3 + \alpha_3 y'_4 &= \beta_3 \\ &\vdots \\ (1 - \alpha_{n-1}) y'_{n-2} + 2y'_{n-1} &= \beta_{n-1} - \alpha_{n-1} y'_n \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

ただし、式(22)の係数は次のように整理できる。

$$\beta_j = 3 \left[\frac{1 - \alpha_j}{h_j} (y_j - y_{j-1}) + \frac{\alpha_j}{h_{j+1}} (y_{j+1} - y_j) \right] \quad (23)$$

$$\alpha_j = \frac{h_j}{h_j + h_{j+1}} \quad (24)$$

$$1 - \alpha_j = \frac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}}, \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (25)$$

3次スプライン第二境界条件は,

$$\left. \begin{aligned} y''_0 &= S''_+(x_0) \\ y''_n &= S''_-(x_n) \end{aligned} \right\}$$

かつ

$$y''_0 = -\frac{4}{h_1} y'_0 - \frac{2}{h_1} y'_1 + \frac{6}{h_1^2} (y_1 - y_0) \quad (26)$$

$$y''_n = \frac{2}{h_n} y''_{n-1} + \frac{4}{h_n} y'_n - \frac{6}{h_n^2} (y_n - y_{n-1}) \quad (27)$$

$$2y'_0 + y'_1 = \frac{3}{h_1} (y_1 - y_0) - \frac{h_1}{2} y''_0 \quad (28)$$

$$y'_{n-1} + 2y'_n = \frac{3}{h_n} (y_n - y_{n-1}) - 2y''_n \quad (29)$$

$$\beta_0 = 3 \frac{y_1 - y_0}{h_1} + \frac{h_1}{2} y''_0 \quad (30)$$

$$\beta_n = 3 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} + \frac{h_n}{2} y''_n \quad (31)$$

ゆえに,

$$AY' = B \quad (32)$$

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 - \alpha_1 & 2 & \alpha_1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 - \alpha_2 & 2 & & \alpha_2 \\ \dots & & \dots & & \dots \\ 0 & \dots & & 1 - \alpha_{n-1} & 2 & \alpha_{n-1} \\ 0 & \dots & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (33)$$

$$B = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{n-1} \\ \beta_n \end{bmatrix}, \quad Y' = \begin{bmatrix} y'_0 \\ y'_1 \\ \vdots \\ y'_{n-1} \\ y'_n \end{bmatrix} \quad (34)$$

$$Y' = A^{-1}B \quad (35)$$

式(35)は1次微分で得られる $\text{GM}(1, 1) \sim \text{GM}(1, n)$ モデルに対して、ただの一次微分方程式である。そのため、式(35)を式(1)、式(5)に代入することで、パラメータ \hat{a} 値を求めすることができる。

3.4 3spGM(2,1)の2次微分公式の誘導

3.3にて述べた1次微分公式により,

$$AY' = B_0 + Y'_0 B_1 + Y'_n B_2 \quad (36)$$

式(36)中の係数について,

$$Y' = A^{-1}B_0 + Y'_0 A^{-1}B_1 + Y'_n A^{-1}B_2 \quad (37)$$

$$A^{-1}B_0 = B_0^*, \quad A^{-1}B_1 = B_1^*, \quad A^{-1}B_2 = B_2^*$$

とおくと、次式を得る。

$$Y' = [B_0^* \ B_1^* \ B_2^*] \begin{bmatrix} 1 \\ Y'_0 \\ Y'_n \end{bmatrix} = B^* Y^* \quad (38)$$

次に, 3次スプラインの2次微分の性質により,

$$\begin{aligned} y_0'' &= S_1''(x_0) \\ y_j'' &= \frac{1}{2}(S_1''(x_j) + S_2''(x_j)), \quad (j=1,2,\dots,n) \\ y_n'' &= S_n''(x_n) \\ Y'' &= CY' + D \end{aligned} \quad (39)$$

ただし,

$$C = \begin{bmatrix} \frac{1}{h_1} & -\frac{2}{h_1} & \dots & & 0 \\ \frac{1}{h_1} & \frac{2(h_2-h_1)}{h_1 h_2} & -\frac{1}{h_2} & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_2} & \frac{2(h_3-h_2)}{h_2 h_3} & -\frac{1}{h_3} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \frac{1}{h_{n-1}} & \frac{2(h_n-h_{n-1})}{h_n h_{n-1}} & -\frac{1}{h_n} \\ 0 & \dots & \dots & \frac{2}{h_n} & \frac{4}{h_n} \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{6}{h_1^2}(y_1 - y_0) \\ 3\left(\frac{y_2 - y_1}{h_2^2} - \frac{y_1 - y_0}{h_1^2}\right) \\ 3\left(\frac{y_3 - y_2}{h_3^2} - \frac{y_2 - y_1}{h_2^2}\right) \\ \vdots \\ 3\left(\frac{y_n - y_{n-1}}{h_n^2} - \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-1}^2}\right) \\ -\frac{6}{h_n^2}(y_n - y_{n-1}) \end{bmatrix} \quad (40)$$

ゆえに,

$$\begin{aligned} Y'' &= CB^*Y' + D = G_0 + y_0'G_1 + y_n'G_2 \\ &= [G_0 \quad G_1 \quad G_2] \begin{bmatrix} 1 \\ y_0' \\ y_n' \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (41)$$

ただし, $G_0 = CB_0^* + D, G_1 = CB_1^*, G_2 = CB_2^*$ と得られる。

式(35)と式(41)を GM(2,1)モデル式(14)に代入することで, パラメータ \hat{a} 値を求めることができる。

3.5 3spGM(n,m)の誘導について

本論文は 3次スプライン関数を用いて GM と結合し, 予測精度向上を行う方法を提案している。ただし, 本論文では 2次微分までしか求めていないため, GM(n,m) と結合するには n 次微分の式も計算する必要がある。多次元スプライン関数については今後の研究課題として, 別途報告する。

4. Taylor 級数法逐次近似による精度改善

4.1 Taylor 級数法逐次近似^[6]

与えられた近似区間 $a \leq \omega \leq b$ において, ω の特性関数 $g(\omega)$ が与えられた場合, 許容誤差特性 $\varepsilon(\omega)$ を満たす近似関数 $f(\omega; x)$ を求めることを考える。ただし, x は近似パラメータベクトルであり, その次元はパラメータの数に等しい。また, x を含む近似関数 $f(\omega; x)$ の形は通常与えられる。したがって, x が求められれば $f(\omega; x)$ が得られたことになる。

Taylor 級数法逐次近似では, $g(\omega)$ および $f(\omega; x)$ はそれぞれ ω の m 個の離散点 $\{\omega_i\}$ の値 $\{g(\omega_i)\}$ および $\{f(\omega_i; x)\}$ によって表されるものとする。ここではこれらをそれぞれ以下のような m 次元列ベクトル G 及び F によって表す。また, 近似パラメータベクトル x は n 次元とする。

$$G = \begin{bmatrix} g(\omega_1) \\ g(\omega_2) \\ \vdots \\ g(\omega_m) \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} f(\omega_1; x) \\ f(\omega_2; x) \\ \vdots \\ f(\omega_m; x) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (42)$$

$$E = G - F \quad (43)$$

とおき, その評価関数

$$Q = E^T E - F \quad (44)$$

を最小にする近似パラメータベクトル x がここでの近似問題の解である。

Taylor 級数法逐次近似では, 近似関数ベクトル F を x に関して Taylor 展開し, それを有限項で打ち切ったものを F の近似関数として用いる。この場合, 1次までで打ち切るか, 2次までにするかによって 2つの方法が考えられる。また, 近似パラメータベクトル x の全ての要素を同時に補正せず, 適当な順序で 1 個ずつ近似する方法もある。この方法はコンピュータの主記憶容量が小さい場合などに有効である。

このような最適化手法に関して一般的にいえることは, 任意に与えられた問題に対してこの方法が必ず成功するとはいえないことである。ここで述べる Taylor 級数逐次近似法は, 適当な初期(近似)パラメータ $x^{(0)}$ から出発して, それを逐次補正して, 近似解パラメータを求めるものである。しかし, 初期パラメータ $x^{(0)}$ が適切でないと評価関数(誤差の 2 乗和) Q が発散したり, 所望の解が得られないことがある。また, 次節以降で示

す偏微分係数の計算精度, 近似関数中のパラメータの決め方, 近似関数の形などにより, 上述と同様の結果となることがある。

本論文の場合では, 前述のパラメータ \hat{a} 値などをそのまま初期値と前提にすることができるので, Taylor 級数法逐次近似による精度改善が十分期待できると推測している。

4.1.1 1次微分による近似

近似関数ベクトル F を初期パラメータ $x^{(0)}$ に関してテイラー展開し, 1 次の項までで近似すると次式が得られる。

$$F = F^{(0)} + \sum_{i=1}^n F_i(x_i - x_i^{(0)}) \quad (45)$$

$$F^{(0)} = F \Big|_{x=x^{(0)}}, F_i = \frac{\partial F^{(0)}}{\partial x_i} \quad (46)$$

$$x^{(0)} = [x_1^{(0)} \dots x_i^{(0)} \dots x_n^{(0)}]$$

ここで $F_D = G - F^{(0)}$ とおくと,

$$Q = (F_D - \sum_{i=1}^n F_i \eta_i)^T (F_D - \sum_{i=1}^n F_i \eta_i) \quad (47)$$

となる。ただし, $\eta_i = x_i - x_i^{(0)}$ である。また,

$$\eta = [\eta_1 \quad \eta_2 \quad \dots \quad \eta_n]^T \quad (48)$$

とする。ここで, Q を極小にするパラメータを求めるために Q を η_i で偏微分して 0 とおく。

$$\frac{\partial Q}{\partial \eta_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (49)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \eta_i} = -2F^T \left[F_D - \sum_{j=1}^n F_j \eta_j \right], \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (50)$$

$$\therefore \sum_{j=1}^n F_j^T F_j \eta_j = F^T F_D \quad (51)$$

全ての i に対して書き下すと,

$$\left. \begin{aligned} F_1^T F_1 \eta_1 + F_1^T F_2 \eta_2 + \dots + F_1^T F_n \eta_n &= F_1^T F_D \\ F_2^T F_1 \eta_1 + F_2^T F_2 \eta_2 + \dots + F_2^T F_n \eta_n &= F_2^T F_D \\ &\vdots \\ F_n^T F_1 \eta_1 + F_n^T F_2 \eta_2 + \dots + F_n^T F_n \eta_n &= F_n^T F_D \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

と得られる。ここで,

$$H = \begin{bmatrix} F_1^T F_1 & F_1^T F_2 & \dots & F_1^T F_n \\ F_2^T F_1 & F_2^T F_2 & \dots & F_2^T F_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_n^T F_1 & F_n^T F_2 & \dots & F_n^T F_n \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} F_1^T F_D \\ F_2^T F_D \\ \vdots \\ F_n^T F_D \end{bmatrix} \quad (53)$$

とおけば, 式(52)はまた,

$$H\eta = d \quad (54)$$

と書くことができる。 H および d を分解すると,

$$H = \begin{bmatrix} F_1^T \\ F_2^T \\ \vdots \\ F_n^T \end{bmatrix} [F_1 \quad F_2 \dots F_n], \quad d = \begin{bmatrix} F_1^T \\ F_2^T \\ \vdots \\ F_n^T \end{bmatrix} F_D \quad (55)$$

となる。上式より, η を求めると,

$$\eta = x - x^{(0)} = H^{-1}d = [A^T A]^{-1} A^T F_D \quad (56)$$

となり,

$$x = x^{(0)} + H^{-1}d = x^{(0)} + [A^T A]^{-1} A^T F_D$$

と得られる。したがって, 繰り返しアルゴリズムは,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + H^{-1}d \Big|_{x=x^{(k)}} = x^{(k)} + [A^T A]^{-1} A^T F_D \Big|_{x=x^{(k)}} \quad (57)$$

となる。

この方法は一個ごとに一個のパラメータのみを補正してゆく場合に変形できる。式(51)において, $j=i$ 以外の j に対して $\eta_j = 0$ とすれば,

$$\eta_i = \frac{F_i^T F_D}{F_i^T F_i} \quad (58)$$

となり, その繰り返しアルゴリズムは,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \frac{F_i^T F_D}{F_i^T F_i} \Big|_{x=x^{(k)}} \quad (59)$$

となる。補正するパラメータの順序については様々な方法が考えられる。しかし, ここではパラメータ番号順とする。

4.1.2 2次微分による近似

1 次微分による近似の場合と同様に, 近似関数ベクトル F を初期パラメータ $x^{(0)}$ に関してテイラー展開し, 2 次の項までで近似すると次式が得られる。

$$F = F^{(0)} + \sum_i F_i \eta_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j F_{ij} \eta_i \eta_j \quad (60)$$

ただし, η_i, F_i は前節と同等の定義のものであり,

$$F_{ij} = \frac{\partial^2 F^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$Q = \left[F_D - \sum_{i=1}^n F_i \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{ij} \eta_i \eta_j \right]^T \left[F_D - \sum_{i=1}^n F_i \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{ij} \eta_i \eta_j \right] \quad (61)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \eta_i} = - \left[F_i + \sum_j F_{ij} \eta_j \right]^T \left[F_D - \sum_{i=1}^n F_i \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{ij} \eta_i \eta_j \right] \left[F_D - \sum_{j=1}^n F_j \eta_j \right] \quad (62)$$

である。 η_i に関する 2 次以上の項を無視すれば,

$$\left[F_i + \sum_j F_{ij} \eta_j \right]^T F_D - \left[F_i^T \sum_j F_j \eta_j \right] = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$\sum F_i^T F_j \eta_j - \sum F_{ij}^T F_D \eta_j = F_i^T F_D$$

$$\therefore \sum_j [F_i^T F_j - F_{ij}^T F_D] \eta_j = F_i^T F_D \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

が得られる。上式は, 前節の式(51)に対応するものであ

る。したがって、式(57)に対応する本方法の繰り返しアルゴリズムは次のようになる。

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + H^{-1}d \Big|_{x=x^{(k)}} \quad (63)$$

$$\text{ただし, } H = (h_{ij}) \quad , \quad h_{ij} = F_i^T F_j - F_{ij}^T F_D$$

d は式(57)と同じである。

また、一回ごとに一個パラメータのみを補正する場合は、 i 番目のパラメータ x_i に対して、

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \frac{F_i^T F_D}{F_i^T F_i - F_{ij}^T F_D} \Big|_{x=x^{(k)}}$$

となる。パラメータ x_i 、 x_k に対する 2 次偏微分係数 F_{ij} は次式の数値微分によって求める。

$$F_{ij} = \frac{F(x_i+h_i, x_k+h_k) - F(x_i+h_i, x_k) - F(x_i, x_k+h_k) + F(x_i, x_k)}{h_i h_k}$$

$$F_{ii} = \frac{F(x_i+h_i) - 2F(x_i) + F(x_i-h_i)}{h_i^2}$$

4.2 GM 及び 3spGM への適用

4.2.1 GM への適用

前述のように GM における \hat{a} はテイラー級数法逐次近似の場合の初期パラメータとする。テイラー級数法逐次近似との結合では、 $g(i)$ および $f(i; \hat{a})$ はそれぞれ i の n 個の離散サンプリング分点の値 $g(i)$ および $f(i; \hat{a})$ によって表されるものとする。ここではこれらをそれぞれ以下のような n 次元列ベクトル G 及び F によって表す。また、近似パラメータベクトル \hat{a} は n 次元とする。

$$G = \begin{bmatrix} x^{(1)}(1) \\ x^{(1)}(2) \\ \vdots \\ x^{(1)}(n) \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} x^{(1)}(1; \hat{a}) \\ x^{(1)}(2; \hat{a}) \\ \vdots \\ x^{(1)}(n; \hat{a}) \end{bmatrix}, \quad \hat{a} = \begin{bmatrix} a \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{bmatrix} \quad (64)$$

$E = G - F$ と置き、 $Q = E^T E - F$ を最小にする近似パラメータベクトル \hat{a} が対象となる近似問題の解である。

4.2.2 3spGM への適用

GM における 3 次スプラインで算出した \hat{a} は同様に、テイラー級数法逐次近似の初期パラメータとすることができる。計算方法は GM の場合と同様である。

5. 実験と評価

5.1 例 1: GM の多変数の予測例

表 2 は、ある工場 1999~2003 年の使用電気量、人員及び機械設備のデータである。これに対し、2004 年の人員=400 人、機械設備=500 台の時の年間使用電気量を予測する。

表 2 原始データ

年度	1999	2000	2001	2002	2003	2004
使用電気量	4384	7625	10500	11316	17818	?
人員	83	131	180	195	306	400
機械設備	146	212	233	259	404	500

(データ出所: 参考文献[4] の pp. 210~213)

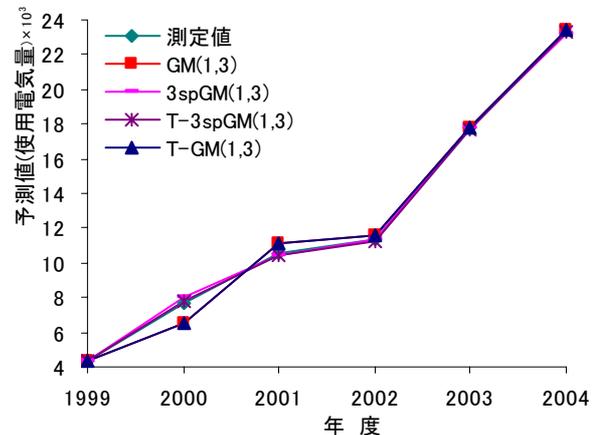


図 1 使用電気量 (10^3) の予測結果

表 3 精度対比

モデル	誤差評価 ($\sum_{i=1}^5 \varepsilon(i)^2$)
GM(1,3)	1,597,526
T-GM(1,3)	1,588,043
3spGM(1,3)	178,777
T-3spGM(1,3)	28,068

5.2 例 2: GM の 2 次微分の予測例

表 4 は、1999~2003 年の収入である。2004 年の場合の年収を予測する。

表 4 原始データ

年度	1999	2000	2001	2002	2003	2004
年収(万円)	1820	1890	1910	2010	2201	?
累加(万円)	1820	3710	5620	7630	9831	?

(データ出所: 参考文献[5] の pp. 42~46)

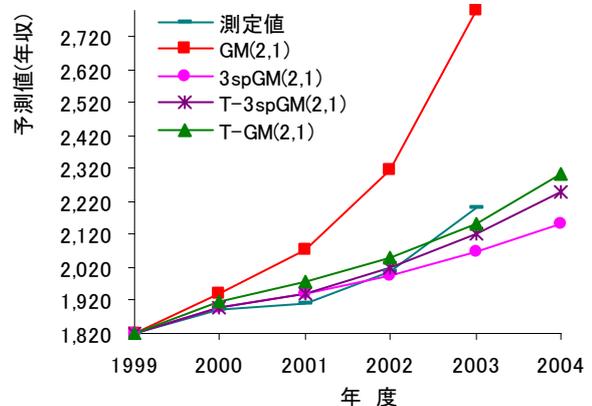


図 2 年収の予測結果

表5 精度対比

モデル	誤差評価 ($\sum_{i=1}^5 \varepsilon(i)^2$)
GM(2,1)	478,289
3spGM(2,1)	18,073
T-GM(2,1)	9,860
T-3spGM(2,1)	6,933

5.3 実験結果

予測は、未知という不確定的な事象を事前に推測することである。基本的な手法は既知データの関係から求め、その未知の状態を予測することである。予測の精度は初期値状態の数値的関連度によって影響される。初期値の与え方は、予測結果値の差に大きく左右する。そのため、初期値状態の設定は近似する計算の際に重要である。

実験の結果を考察する。多変数予測例1から見られるように、2004年度初期値となる使用電気を予測するために、1999～2003年度の既知のデータからGMや3spGM、さらにT-3spGM(1,3)を用いて未知データを予測している。すなわち、1999～2003年度の4年間の実際の測定値から得られた精度で決まることになる。よい精度のパラメータを用いて、2004年度の使用電気を予測すると、より精度が高いことがわかる。

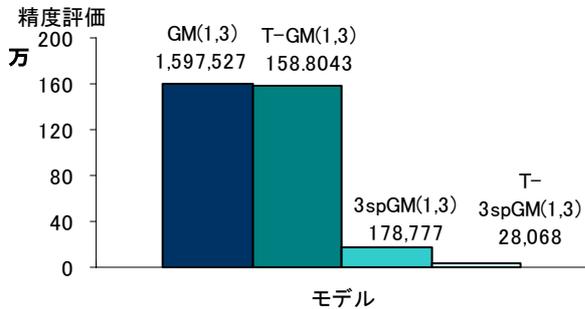


図3 例1モデル精度評価

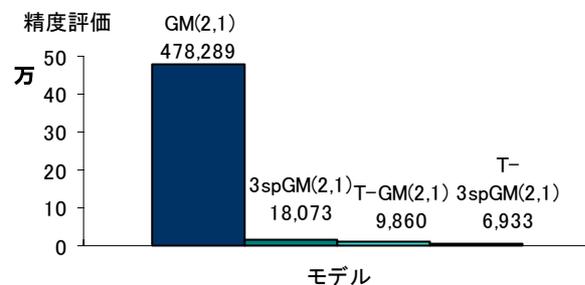


図4 例2モデル精度評価

本論文はGM(1,3),T-GM(1,3),3spGM(1,3),T-3spGM(1,3)の4つモデルで予測したデータを得ている。4つのモデルに対して、精度が順次あがることを図3から確

認することができる。2004年度の使用電気を予測すると、T-3spGM(1,3)モデルが一番予測精度が高いことがわかる。

同様に、例2をみると、T-3spGM(1,3)モデルも予測精度が一番率高いことをわかる。予測精度は与えられた初期値と良く関係する。図4に示すように、各モデルの予測精度が異なることをわかる。

各モデルの精度を更に高めるために、3spGMの式とTaylorの高次微分式による計算することが必要である。高次計算問題についての一般式を求める方法と適用例は今後の研究テーマとする。

6. おわりに

本論文はGMに3次スプライン関数を導入して、3spGMの一般式を誘導した。さらにTaylor級数法逐次近似を灰色理論と結合して、改善されたGM計算問題を行なった。未知という不確定的な事象を予測する時、GMと同等以上の効果が得られた。本提案の新しいアルゴリズムによって、さまざまな分野、例えば環境、医療、生物、気候などを灰色予測と結合して、GM予測に関する問題を解決する場合には良い結果が得られることを期待している。

参考文献

- [1] 鄧聚龍, 灰色制御系統, 華中理工大学大学出版社, 中国, 1985.
- [2] 永井正武, 山口大輔著, 灰色理論と工学応用方法入門 共立出版株式会社, 2004.
- [3] 孫家昶, 插値関数と図形計算, 科技出版社, pp. 42～82, 中国, 1982.
- [4] 李学偉等著, 経済データの分析予測学, pp. 210～213, 中国, 1998.
- [5] 白超英, 灰色GM(2,1)モデルは地震中の長期予報への応用, 西北地震学報, 第11巻, pp. 42～46, 中国, 1989.
- [6] 町田東一, 小島記男, FORTRAN 応用数値計算, pp. 231～262, 東海大学出版社, 1989.