

シヨートノート

有理関数によるデータのあてはめ法†

伊藤直人** 北原紀之***

実験データに有理関数をあてはめる特別の方法を考案した。

1. ま え が き

理論式 $y=f(\alpha, x)$ が既知のとき、実験データ (x_j, y_j) , $(j=1, 2, \dots, n)$ から未知パラメータ α を推定することが重要な場合がある。

$f(\alpha, x)$ が未知パラメータ α に関して非線形である場合には、非線形最小2乗法により α を推定することができる。最近、最小2乗法標準プログラム SALS^{1)~3)} が公開された。SALS には種々の非線形最小2乗法が組み込まれていて、利用者の要求する条件に従って解を与えるようになっている。現在それは東京大学大型計算機センターの応用プログラムライブラリに登録されており、多くの利用が期待されるが、どの計算機にも利用できるプログラムとなると記憶容量、処理速度などに対する制限が生じ、それなりの工夫が必要である。

$f(\alpha, x)$ が特殊な関数である場合には、それに最も適したアルゴリズムを与えて処理する方が能率的である。ここでは $f(\alpha, x)$ が有理関数の場合の推定法について述べる。

この計算法は超音波の吸収に関するデータの解析で望ましい結果を得た⁴⁾。また実験例で示すように、理論式が未知のとき、実験データに適した有理関数をあてはめる問題にも応用できる。

2. 計 算 法

与えられたデータ (x_j, y_j) , $(j=1, 2, \dots, n)$ を

$$\begin{cases} y = \frac{A(\mathbf{a}, x)}{B(\mathbf{b}, x)} = \frac{a_1 + a_2x + \dots + a_{s+1}x^s}{b_1 + b_2x + \dots + b_{t+1}x^t} & (1) \\ b_1 = 1 & (2) \end{cases}$$

にあてはめることを考える。 x_j は誤差を含まないデ

ータ、 y_j は誤差を含む測定データであるとする。推定すべき未知パラメータは

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_{s+1}), \quad (3)$$

$$\mathbf{b} = (1, b_2, \dots, b_{t+1}) \quad (4)$$

である。式(1)の分母を払うと

$$yB(\mathbf{b}, x) = A(\mathbf{a}, x) \quad (5)$$

となる。任意の初期ベクトル

$$\mathbf{b}^* = (1, b_2^*, \dots, b_{t+1}^*) \quad (6)$$

に対し $B(\mathbf{b}^*, x) \neq 0$ である場合には式(5)は

$$\frac{yB(\mathbf{b}, x)}{B(\mathbf{b}^*, x)} = \frac{A(\mathbf{a}, x)}{B(\mathbf{b}^*, x)} \quad (7)$$

と変形できる。もし $\mathbf{b}^* = \mathbf{b}$ であれば式(7)は式(1)に等しい。このことから \mathbf{b}^* が \mathbf{b} に近いとき式(7)は式(1)に近いと言える。残差 ε_j を

$$\begin{aligned} \varepsilon_j &= \frac{A(\mathbf{a}, x_j)}{B(\mathbf{b}^*, x_j)} - \frac{y_j B(\mathbf{b}, x_j)}{B(\mathbf{b}^*, x_j)} \\ &= \sum_{k=1}^{s+1} \frac{x_j^{k-1}}{q_j} a_k - \frac{y_j}{q_j} - \sum_{l=2}^{t+1} \frac{x_j^{l-1} y_j}{q_j} b_l, \end{aligned} \quad (8)$$

$$q_j = B(\mathbf{b}^*, x_j) \quad (9)$$

とすれば ε_j は未知パラメータ $a_1, a_2, \dots, a_{s+1}, b_2, \dots, b_{t+1}$ に対して線形となる。

$$J(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{j=1}^n \varepsilon_j^2 \quad (10)$$

を最小にするために、 J を未知パラメータで偏微分して、それらを0とおけば次の正規方程式を得る。

$$\begin{pmatrix} \sum q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^t q_j^{-2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_j^t q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{2t} q_j^{-2} \\ \sum x_j y_j q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{t+1} y_j q_j^{-2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_j^t y_j q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{t+t} y_j q_j^{-2} \\ \sum x_j y_j q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^t y_j q_j^{-2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_j^{t+1} y_j q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{t+t} y_j q_j^{-2} \\ \sum x_j^2 y_j^2 q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{t+1} y_j^2 q_j^{-2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_j^{t+1} y_j^2 q_j^{-2} & \dots & \sum x_j^{2t} y_j^2 q_j^{-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{s+1} \\ -b_2 \\ \vdots \\ -b_{t+1} \end{pmatrix}$$

† Curve Fitting by Rational Functions by NAOTO ITO and NORIYUKI KITAHARA (Maizuru Technical College).

** 舞鶴工業高等専門学校自然科学科

*** 舞鶴工業高等専門学校電気工学科

$$= \begin{pmatrix} \sum y_j q_j^{-2} \\ \vdots \\ \sum x_j^t y_j q_j^{-2} \\ \vdots \\ \sum x_j^t y_j^2 q_j^{-2} \end{pmatrix} \quad (11)$$

3. 計算上の注意

初期ベクトル \mathbf{b}^* の選び方によって式(9)の q_j が決まり, 正規方程式(11)が決まる. したがって解ベクトル \mathbf{b} は初期ベクトル \mathbf{b}^* に影響される. 計算に際しては初期ベクトル \mathbf{b}^* として $(1, 0, \dots, 0)$ を選んだ. これは

$$\sum_{j=1}^n \{A(\mathbf{a}, x_j) - y_j B(\mathbf{b}, x_j)\}^2 \quad (12)$$

を最小にするパラメータ \mathbf{a}, \mathbf{b} を求めていることになり, 第一近似として適当なものである. このようにして得られた解ベクトル \mathbf{b} を改めて初期ベクトルと見なし計算を反復させた. 反復の収束性や反復の打ち切りについては検討中であるが, 数回の反復であてはめ曲線を発見できることが多い.

測定誤差 δ_j が $y_j - A(\mathbf{a}, x_j)/B(\mathbf{b}, x_j)$ で与えられ, 正規分布に従うと仮定すれば, 残差 ε_j は式(8)でよい.

推定区間内の一点で極をもつような有理式を考える場合などで, 測定データ y_j の絶対値が大きく異なり, δ_j が正規分布に従うと仮定するより, δ_j/y_j が正規分布に従うと仮定した方がよいことがある. このときは正規方程式の各項を y_j で割ればよい.

あてはめるべき有理関数が知られている場合には, 特定の係数が0でなければならないときがある. また $x=0$ で発散するデータで $b_1=0$ でなければならないときもある. このときにも正規方程式を少し変形すればよい.

測定データを滑らかな曲線にあてはめる方法としてスプライン関数⁵⁾がよく知られているが, それは局所的なあてはめ法であり, 本手法の大域的なあてはめ法とは異なる. 測定データによくあてはまる有理関数が見い出されるときは, 同じ個数の未知パラメータを含む多項式よりも振動が少なく安定している. 補間や補外の問題に関しては多項式によるあてはめよりよいといえる.

あてはまり方を表わす量として AIC⁶⁾ がある. 有理関数の場合 s, t を必要以上に大きくとると, A, B が,

$$A(\mathbf{a}, x) = (x - \xi - h)A_1(x) \quad (13)$$

$$B(\mathbf{b}, x) = (x - \xi)B_1(x) \quad (14)$$

のように因数分解される多項式となる傾向が強くなる. ξ が推定区間外の点であれば何ら問題はないが, ξ が区間内の点であり, h が微小である場合には, 与えられたデータ x_j では y_j によく合うが, $x = \xi$ の近傍では発散する危険性がある. このことに関してはデータ点のみを用いて計算される AIC からは判断できない. 有理関数の適合度を表現する量について検討する必要がある.

4. 実験例

表1は水銀, カドミウム, アルゴンの輝線がネガフィルムに撮影された距離 x (mm) と, その波長 y (nm) との関係を示す 32 個のデータ⁷⁾ を有理関数にあてはめた場合の情報量規準 AIC を示したものである.

計算は舞鶴工業高等専門学校電子計算機センターの TOSBAC 3400-31 で行った. プログラムは FORT-RAN で書かれており単精度演算で4回反復させた. 反復回数を増したとき AIC が変動することもあるが, このときは有理関数の型がデータに合わないときであり, 表1で*印をつけた型の場合には式(13), (14)の現象が起っている. 曲線のあてはめとしては, 反復

表1 あてはめ有理関数の次数に対する AIC
Table 1 AIC versus degrees of fitting rational functions.

分子の次数 \ 分母の次数	0	1	2	3	4	5
0	283	186	102	18	-52	-93
1	138	-98	-96	-93	18*	
2	11	-97	-45	-19		
3	-89	-33	70*			
4	-92	-42				
5	-68					

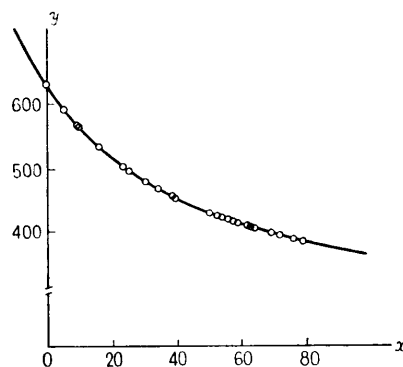


図1 データ点とあてはめた曲線
Fig. 1 Data Points and fitted curve.

表 2 本手法による推定値と従来の結果

Table 2 Estimated values by the present method and previous results.

距離 (mm)	波長 (nm)		
	本手法	高橋 ⁷⁾	Herzberg ⁷⁾
-1.50	655.67	655.9±0.4	656.28
32.85	486.32	486.5±0.2	486.13
54.90	433.93	434.0±0.1	434.05
69.15	410.06	410.0±0.1	410.17
78.55	397.13	397.2±0.1	397.01
85.20	389.03	388.6±0.3	388.91

4 回程度で十分といえる。

(1 次式)/(1 次式) のとき AIC が最小となるので、このデータについては、この型が最適と言えるだろう。計算の結果、係数の推定値は $a_1=643.770$, $a_2=4.22060$, $b_1=1$, $b_2=0.018535$ となった。係数決定までの計算時間は 4 回の反復で 0.02 秒であった。そのときのデータ (○印) と推定された曲線を図 1 に示す。

文献⁷⁾ では水素の輝線がネガフィルムに撮影された距離 (mm) を測定し、分散曲線 (図 1 に相当するもの) から波長 (nm) を決定しているのので、本手法による波長の推定値を表 2 に示す。

参 考 文 献

- 1) 中川, 小柳: 最小二乗法標準プログラム SALS (第 2 版) 利用の手引き (第 1 部基礎篇), 東大大型計算機センター (1979).
- 2) 中川, 小柳, 戸川: 最小二乗法標準プログラム SALS (第 2 版) 利用の手引き (第 2 部制御・解法篇), 東大大型計算機センター (1979).
- 3) 中川 徹: 最小二乗法標準プログラム SALS の紹介, 阪大大型計算機センター・ニュース, No. 33, pp. 35-41 (1979).
- 4) Ito, N., Kitahara, N. and Harada, Y.: A New Algorithm for Relaxation Spectra in Ultrasonic Spectroscopy, J. Acoust. Soc. Am., Vol. 67, No. 5 (May 1980).
- 5) 市田, 吉本: スプライン関数とその応用, p. 220, 教育出版, 東京 (1979).
- 6) 赤池弘次: 情報量規準 AIC とは何か, 数理科学 No. 153, pp. 5-11 (1976).
- 7) 高野穆一郎: 水素原子スペクトルから Rydberg 定数を求める実験, 化学教育, Vol. 27, No. 5, pp. 85-88 (1979).
- 8) 伊藤, 北原: 有理関数によるデータのあてはめ, 舞鶴高専紀要, No. 15, pp. 43-47 (1980).

(昭和 54 年 10 月 31 日受付)

(昭和 55 年 4 月 22 日採録)