論文

パラメータの埋め込みと一般化逆行列による非線形パラメータ推定*

大久保 英 嗣** 津 田 孝 夫***

Abstract

This paper discusses nonlinear parameter estimation as a problem of solving simultaneous nonlinear equations where the number of equations is equal to or greater than that of unknown variables. By real one-parameter imbedding, the originally given equations are recast to an initial-value problem of ordinary differential equations. Furthermore, in each iteration for solving the initial-value problem, a pseudo-inverse matrix is used because the original equations are an overdetermined system.

1. 序　論

パラメータ推定は，関数の近似や曲線のあてはめ(curve fitting) と関連して，工学・物理学等の種々の分野で現われる．ここではとくにデータに誤差がないとし，観測値がパラメータに関して非線形な依存性をもつ場合を扱う．

問題は，k 個の独立変数 z_i $(i=1, 2, \cdots, k)$ と 1 個の従属変数 y の間に

$$y=f(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}),$$
$$\boldsymbol{z}=(z_1, z_2, \cdots, z_k),$$
$$\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

という関数関係があることが分かっていて，この関数が与えられた m 個のデータの組 $(\boldsymbol{z}^{(i)}, y^{(i)})$ $(i=1, 2, \cdots, m)$ と最も良い一致を与える n 個の未知パラメータ x_i $(i=1, 2, \cdots, n)$ の値を見出すことである．但しデータは誤差を含んでいないとし，$m \geq n$ とする．

一般に，パラメータ $\boldsymbol{x}$ の最適値を見出すために，

$$\sum_{i=1}^{m} w_i[y^{(i)}-f(\boldsymbol{z}^{(i)}, \boldsymbol{x})]^2$$

の形の 2 乗和を作って（但し w_i は正の重みの係数），これを最小にする $\boldsymbol{x}$ の値を求める問題に帰着させることが行われるが，ここでは

$$F_i(\boldsymbol{x}) \triangleq y^{(i)}-f(\boldsymbol{z}^{(i)}, \boldsymbol{x})=0$$

あるいはベクトル表現で

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0} \tag{1.1}$$

但し，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \triangleq (F_1(\boldsymbol{x}), F_2(\boldsymbol{x}), \cdots, F_m(\boldsymbol{x}))^T$

の形の過剰決定系 (overdetermined system) として問題を扱うことにする．

未知パラメータの個数 n と方程式の個数 m が一致する場合は，通常の連立方程式となるが，この場合の解法として，とくに興味のあるのは Meyer[1]，Boggs[2] らによる方法と Freudenstein[3]，Broyden[4] らによる方法である．前者は，非線形な連立方程式を常微分方程式の初期値問題に帰着させる“パラメータの埋め込み (parameter imbedding)” による方法である．後者はニュートン法を代表とする反復法において，方程式にパラメータをうめ込むことによって既知の解をもつ方程式を問題とする方程式に近づけて行く方法である．何れの場合も，非線形方程式を解く際の反復の初期値への依存を緩和するための考え方であることが分かる．

本論文では，これらの方法を拡張して，より一般的な $m \geq n$ の場合を取り扱いうるようにし，過剰決定系 **(1.1)** に適用してその解としてパラメータ推定を行うことを目的とする．

* Nonlinear Parameter Estimation by Parameter Imbedding and Pseudo-Inverse Matrix by Eiji OKUBO (Graduate School of Information Engineering, Hokkaido University) and Takao TSUDA (Faculty of Engineering, Hokkaido University).

** 北海道大学大学院工学研究科情報工学専攻
*** 北海道大学工学部電気工学科

2. パラメータの埋め込み

初期値問題を導出するために，実パラメータ t を方程式(1.1)に埋め込み，新しく方程式

$$\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x}) \triangleq a(t)\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+b(t)\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0} \tag{2.1}$$

を作る．さらに未知パラメータ $\boldsymbol{x}$ の解の探索領域を n 次元ユークリッド空間の開集合 D として

$$\boldsymbol{H}(t_0, \boldsymbol{x}_0)=\boldsymbol{0} \tag{2.2.a}$$

$$\boldsymbol{H}(t_1, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \tag{2.2.b}$$

となるように関数 $a(t), b(t), \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})$ を決定する．但し $\boldsymbol{x}_0 \in D$ である．区間 $I_t=[t_0, t_1]$ において $a(t), b(t)$ が定義されていて，$a(t), b(t)$ は I_t において連続であるとする．ここで I_t は有限区間である必要はない．$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ は任意の形でよいが，方程式(2.1)が解を持つ領域すなわち探索領域 D で実根をもつとする．

方程式(2.1)の具体例を以下にあげておく．

(i) $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+(t-1)\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)$

(ii) $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=t\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+(1-t)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$

(iii) $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=t\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+(1-t)\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}_0)=\boldsymbol{0}$

(iv) $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-e^{-t}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)$

明らかに(i)，(ii)，(iii)に関しては

$$\boldsymbol{H}(0, \boldsymbol{x}_0)=\boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{H}(1, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$$

であり，(iv)に関しては

$$\boldsymbol{H}(0, \boldsymbol{x}_0)=\boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \quad (t \to \infty)$$

となって，(2.2.a)及び(2.2.b)が満足されている．

次に，これらのパラメータを埋め込んだ方程式に対して，解 $\boldsymbol{x}(t)$ の存在定理を示すが，定理の内容は Kantorovich[5] の定理と対応しているので証明は省略する．

定理. 次の(1)から(5)の条件を満足すると仮定する．

(1) $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})$ は $N_0=\{(t, \boldsymbol{x});\ |t-t_0| \leq R,\ \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\| \leq r\}$ において連続である．

(2) $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t, \boldsymbol{x})\ (=\partial \boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})/\partial \boldsymbol{x})$ は N_0 において連続である．とくに，$(t, \boldsymbol{x}) \in N_0$ に関して

$$\|\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t, \boldsymbol{x})-\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t_0, \boldsymbol{x}_0)\| \leq L\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|$$

とする（L はリプシッツ定数である）．

(3) $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t_0, \boldsymbol{x}_0)^{-1}$ が存在する．

(4) $\|\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t_0, \boldsymbol{x}_0)^{-1}\| \leq M$.

(5) $\|\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t_0, \boldsymbol{x}_0)^{-1}\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x}_0)\| \leq \eta$.

このとき，

(i) $h=M\eta L \leq 1/4$,

(ii) $r \geq r_0=(1-\sqrt{1-4h})\eta/2h$

ならば，方程式 $\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ は球 $S_0=\{\boldsymbol{x};\ \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\| \leq r_0\}$ において連続な一意解 $\boldsymbol{x}(t)$ を持つ．

さて，方程式(2.1)が，$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t, \boldsymbol{x}(t))$ がすべての $t \in I_t$ に関して正則であるような解をもてば，$(d\boldsymbol{H}/dt)=0$ であるから，(2.1)は

$$d\boldsymbol{x}(t)/dt=-\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(t, \boldsymbol{x})^{-1}\boldsymbol{H}_t(t, \boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{2.3}$$

と同値になる．これはパラメータ $\boldsymbol{x}$ に関する初期値問題であり，原理的には任意に初期値 $\boldsymbol{x}_0$ を指定できる．

(2.3)はさらに，前に述べたパラメータの埋め込みの例(iv)を使用すると

$$d\boldsymbol{x}(t)/dt=-J_F^{+}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{2.4}$$

となる．$J_F^{+}(\boldsymbol{x})$ は関数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ のヤコビアン行列の一般化逆行列である．$J_F^{+}(\boldsymbol{x})$ が普通の正方行列の逆行列でないことは $m \geq n$ によるが，本論文の基本的な考えは，この一般化逆行列を使用することにある．序論で述べたように，2乗和の最小化問題に関する多くの反復法では2次の導関数が必要である．これに対し，一般化逆行列を用いる本論文の方法では，1次の導関数が与えられれば十分であるということであって，重要な利点の1つとなっている．

3. 初期値問題の数値解法

初期値問題の解法に関しては数多くの手法があるが，ここでは方程式(2.4)を代表的な1段法 (one-step method) であるルンゲ－クッタ法によって解く．

独立変数 t の増分（キザミ幅）を h とすれば，良く知られているようにルンゲ－クッタ法の誤差は $O(h^2)$（h の2乗のオーダー）である．初期値問題(2.4)を解くにはこれで十分である．高精度の方法($O(h^p)$, $p \gg 1$)を使用することは，独立変数 t の定義域が有限ででないことを考えれば，効率が良くないことが分かる．

さて，パラメータの埋め込み(iv)を使用して初期値問題(2.4)を導いたが，さらに一般的な形である

$$\boldsymbol{H}(t, \boldsymbol{x})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-e^{-\alpha t}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0) \tag{3.1}$$

を使用して（但し α は正の数），これから導出される初期値問題

$$d\boldsymbol{x}(t)/dt=-\alpha J_F^{+}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{3.2}$$

を考えていくことにする．これに1段法を適用してできる反復列を

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{x}_n-\alpha h\boldsymbol{k}, \quad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{3.3}$$

とする．ルンゲ－クッタ法においては

$$\boldsymbol{k}_1=J_F^{+}(\boldsymbol{x}_n)\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n),$$

$$\boldsymbol{k}_2=J_F^{+}(\boldsymbol{x}_n+h\boldsymbol{k}_1)\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n+h\boldsymbol{k}_1)$$

とすれば

$$\boldsymbol{k}=(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2)/2$$

となっている．

ここで，反復列(3.3)に現われるキザミ幅 h と α の値について考えておく．但し h, α は固定せずに反復の各段階で値が変わるとし，その値を $h_i, \alpha_i\ (i=1, 2, \cdots)$ とする．方程式(3.1)により，その任意の解 $\boldsymbol{x}$ は

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=e^{-\alpha t}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)$$

を満足しなければならない．従って，反復の各段階で解曲線 $\boldsymbol{x}(t)$ の誤差と関数値 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n)$ を計算するときの誤差を合わせて $\varepsilon_i\ (i=1, 2, \cdots)$ とすれば，かなり粗い評価であるが，各 i に関して

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_{i+1})\|=e^{-\alpha_{i+1}h_{i+1}}\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_i)\|(1+\varepsilon_i)$$

が言える．但し

$$|\varepsilon_i|\leq 10^{-s}\ (s\text{ は整数}),\quad \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_i)\|=\max_{1\leq j\leq m}|F_j(\boldsymbol{x}_i)|$$

とする．そうすると明らかに

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n)\|&=\exp\left(-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i h_i\right)\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)\|\prod_{i=1}^{n}(1+\varepsilon_i)\\&=\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)\|\prod_{i=1}^{n}(1+\varepsilon_i)/e^{\alpha_i h_i}\\&\leq\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0)\|\prod_{i=1}^{n}(1+10^{-s})/e^{\alpha_i h_i}\end{aligned}$$

ゆえに，すべての i に関して

$$e^{\alpha_i h_i}>1+10^{-s}\quad\text{すなわち}\quad \alpha_i h_i>\ln(1+10^{-s}) \tag{3.4}$$

であるならば

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\|\to 0\quad (n\to\infty\text{ のとき})$$

となり，列 $\{\boldsymbol{x}_n\}$ は $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ の解に収束する．

(3.4)は $\alpha_i h_i$ の下限を与えるものであって，上限を与えるものではないが，ここでは，単純に

$$0<\alpha_i h_i\leq 1\quad (i=1, 2, \cdots) \tag{3.5}$$

とした．実際これで十分であることが後の計算結果で分かるであろう．

反復列 $\{\boldsymbol{x}_n\}$ の解への収束の速度は，今述べた α, h の両方に依存するが，h を固定して α を変化させることによって調整する．何故ならルンゲークッタ法においては，ヤコビアン行列と関数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ の中にキザミ幅 h が入っていて，その最適値を見出すときに，逆行列や関数の評価回数が h を固定する場合よりも増えるからである．

さて，(3.5)において，すべての i に関して $h=h^*$ として h を固定すると α_i は区間 $(0, 1/h^*]$ の値をとることになる．数値的には，その区間を等間隔に分割し，その分点 $0<c_1<c_2<\cdots<c_N=1/h^*$ の値をとるものとする．そのとき α_i の最適値として，$j=1, 2, \cdots, N$ に関して

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n-c_j h\boldsymbol{k})\|$$

を最小にする c_j をとる．ここで注意しなければならないのは，Nをあまり大きくとると，逆に収束を遅くする原因となることである．

4. 一般化逆行列の計算

ここでは，**2.**で述べたヤコビアン行列の一般化逆行列をハウスホルダー変換を利用した Golub[6] による方法で求めることにする．しかも反復の各段階で逆行列を計算し直し (update)，その誤差が指定した規準以下になるまで逆行列の精度を上げるための計算を繰り返し行う．

さて，Aをその (i, j) 要素を a_{ij} とする $m\times n$ 行列 (但し，$m\geq n$，$\mathrm{rank}(A)=n$)，$\boldsymbol{b}$ を m 次元ベクトルとして，方程式

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{4.1}$$

を考える*．

これはさらに

$$\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|\quad(\text{ユークリッド・ノルム}) \tag{4.2}$$

を最小にする $\boldsymbol{x}$ を決定する線形最小2乗問題になる．そこでユークリッド・ノルムはユニタリ不変であるから，

$$\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{c}-QA\boldsymbol{x}\|$$

$$\boldsymbol{c}=Q\boldsymbol{b},\quad Q^TQ=I\quad (I\text{: 単位行列})$$

で，しかも

$$QA=R=\begin{pmatrix}\tilde{R}\\ \cdots\\ \boldsymbol{0}\end{pmatrix} \tag{4.3}$$

となる $m\times m$ 行列Qを求めることができる．但し $\tilde{R}$ は $n\times n$ 上三角行列である．このとき明らかに (4.2) を最小にするのは

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\tilde{R}^{-1}\tilde{\boldsymbol{c}}$$

である．$\tilde{\boldsymbol{c}}$ はm次元ベクトル $\boldsymbol{c}$ の最初の n 個の成分である．

この分解 (4.3) はハウスホルダー変換を使用して実現できる．それは

$$A^{(1)}=A,\quad A^{(k+1)}=P^{(k)}A^{(k)}\quad (k=1, 2, \cdots, n)$$

において，$m\times m$ 行列 $P^{(k)}$ を対称で

$$P^{(k)}=I-\beta_k\boldsymbol{u}^{(k)}\boldsymbol{u}^{(k)T},\quad \boldsymbol{u}^{(k)T}\boldsymbol{u}^{(k)}=1$$

の形の直交行列とするものである．但し $\boldsymbol{u}^{(k)}$ は m 次元ベクトルである．そのとき明らかに

$$R=A^{(n+1)},\quad Q=P^{(n)}\cdots P^{(2)}P^{(1)}$$

である．

一旦，方程式(4.1)に対する解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ が得られると，単

* 記述を一般的にするために，ヤコビアン行列 $J_F(\boldsymbol{x})$ を A，前章における $\boldsymbol{k}$ を $\boldsymbol{x}$ としてある．

純な反復法によって解の精度を上げることができる．$\bar{x}$ を最初に得られる解とし，$\hat{x}=\bar{x}+e$ とすると

$$\|b-A\hat{x}\|=\|r-Ae\| \quad 但し,\ r=b-Ax$$

となる．従って修正ベクトル e はそれ自身線形最小2乗問題に対する解である．

次に，Aの階数 (rank) が真に n より小さくなる場合を考える．この場合は方程式(4.1) を直接解くことはできないので，次のような $n\times n$ 行列 B を導入する．すなわち，方程式(4.1)を

$$\begin{pmatrix} A \\ \cdots \\ B \end{pmatrix} x=\begin{pmatrix} b \\ \cdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

として，この場合の行列の階数が n になるように行列 Bを決定する．Bの自然な定義として

$$B=\nu I,\quad \nu>o$$

が考えられる．実際 (4.4) においてこれを使用すれば $\nu\to 0$ のとき方程式(4.1)になる．しかし数値計算では $\nu\to 0$ とすることはできないので ν の適切な値を選択しなければならない．ここでは，次のように ν の値を決定する．ν の初期値を

$$\nu_0=\gamma(|\min_{i,j} a_{ij}|+|\max_{i,j} a_{ij}|),\quad \gamma>o$$

として，初期値問題を解くときの反復の各段階で

$$\nu_{n+1}\fallingdotseq\gamma_1\nu_n \quad (\|F(x_n)\|\le\|F(x_{n-1})\| のとき)$$
$$\nu_{n+1}=\gamma_2\nu_n \quad (\|F(x_n)\|>\|F(x_{n-1})\| のとき)$$

とする．但し $0<\gamma_1<1$, $1<\gamma_2<+\infty$ である．

5. アルゴリズム

以上述べてきたアルゴリズムを要約すると以下のようになる．但しヤコビアン行列が特異性 (singularity) を持つ場合を示す．

（1） 反復の初期値 $x_0=x(0)$ と独立変数 t の増分 h を設定する．

（2） 初期値 x_0 において，関数 $F(x)$ のヤコビアン行列を評価する．

（3） ν の初期値 ν_0 を計算する．

（4） $k_1=J_F^+(x_n)F(x_n)$ 及び $k_2=J_F^+(x_n+hk_1)F(x_n+hk_1)$ を 4. で述べた方法により求め $k=(k_1+k_2)/2$ とする．

（5） 最適の α_{n+1} を決定し，$x_{n+1}=x_n-\alpha_{n+1}hk$ を計算する．

（6） $\|x_{n+1}-x_n\|$ あるいは $\|F(x_n)\|$ が指定した規準以下になれば反復を終了し(8)へ行く．

（7） ν_{n+1} を決定し再び(4)へ行く．

（8） 計算を終了する．

ルンゲ-クッタ法の2次の公式を使用したが，4次の公式を使用しても多少反復の各段階での精度が良くなるだけで，計算時間に関しては逆に悪くなる．

6. 数値実験

例 1. $y=x_1t+x_2t^2+x_3t^3+x_4\exp(-x_5t)+x_6\exp(-x_7(t-x_8)^2)$

この関数はパラメータ x_1, x_2, x_3, x_4, x_6 に関しては線形であるが x_5, x_7, x_8 に関しては非線形である．

使用したデータを **Table 1** に示す．各 t に対する y の値が指数関数的に増加しているので，反復の各段階に現われるヤコビアン行列の各要素の値の間に数オーダーの差がある．**Table 2** に計算結果を示してある．但し α は常に 1.0 とし $h=0.2$ とした．

Table 1 11 data for Example 1.

t	y
0.0	2.3237
0.5	3.3200
1.0	5.6025
1.5	10.4096
2.0	19.0935
2.5	32.9258
3.0	53.0383
3.5	80.4906
4.0	116.3712
4.5	161.7627
5.0	217.7866

Table 2 Computed results for Example 1.

parameter	initial value	exact solution	computed result
x_1	3.0	1.0	0.997917
x_2	3.0	1.0	1.000657
x_3	3.0	1.5	1.500084
x_4	3.0	1.0	1.001651
x_5	1.0	0.25	0.248223
x_6	3.0	1.5	1.498805
x_7	1.0	0.5	0.500329
x_8	1.0	0.5	0.500572

number of iterations	sum of squares
38	0.812703×10^{-8}

例 2. $y=x_1\sin(x_2t)+x_3\cos(x_4t)$

周期関数のあてはめの例として掲げる．この場合，次の2通りの方法で計算した．

（i） $h=0.2$, $\alpha=1.0$

（ii） $h=0.2$, $\alpha=1.0, 2.0, \cdots, 5.0$ の何れか．

使用したデータを **Table 3**(次頁参照) に，(i)，(ii) の計算結果を **Table 4** (次頁参照) に示してある．Table 4 を見ると明らかなように(i)の場合は 48 回の反復で収束条件 $\|x_{n+1}-x_n\|\le 0.001$ (但し一様ノル

ム）を満たすが，（ii）の場合は 12 回で同じ収束条件を満たす．従って α を反復の各段階で変える方が収束は速くなる．

さらに，この例に関して次の方法と比較してみた．

（iii） 2乗和に関するニュートン法

（iv） 一般化逆行列を使用したニュートン法

（i），（ii）の場合と同じ初期値を使用したが何れの場合も真の解に収束しなかった．

Table 3 11 data for Example 2.

t	y
0.0	1.0000
0.2	1.1937
0.4	1.3695
0.6	1.5200
0.8	1.6384
1.0	1.7191
1.2	1.7574
1.4	1.7503
1.6	1.6963
1.8	1.5955
2.0	1.4496

Table 4 Computed results for Example 2.

parameter	initial value	exact solution	computed result for fixed α	computed result for variable α
x_1	3.0	1.0	1.003228	1.000047
x_2	3.0	1.0	0.997063	0.999943
x_3	3.0	1.0	0.999928	1.000000
x_4	3.0	0.5	0.503561	0.500058

	number of iterations	sum of squares
fixed α	48	0.370735×10^{-6}
variable α	12	0.234923×10^{-8}

例 3. $y=x_1\exp(-t/x_2)+x_3\exp(-t/x_4)$

この例は関数の形を見ると明らかなように，第1項と第2項が同じ形をしているので，変数の数は4であるがヤコビアン行列の階数は2となってしまう．従って **4.** で述べた行列 B を導入しなければならないが，そのときに現われる $\gamma, \gamma_1, \gamma_2$ としてここでは

$$\gamma=0.5, \quad \gamma_1=0.8, \quad \gamma_2=1.2$$

を使用した．

この場合も例2の（i），（ii）と同様に2通りで計算した．データは **Table 5** の $t=0.0\sim2.0$ を使用し，結果を **Table 6** に示してある．この例に関しても例2と同様のことが言える．

例 4.

Table 5 のデータと最も良く一致する関数を次の（1）から（6）までの中から選ぶことを考える．すなわちパラメータだけでなく最適な項の数までも推定しようというのである．

Table 5 data for Examples 3 and 4.

t	y	t	y
0.0	2.5000	2.2	0.1743
0.2	1.8004	2.4	0.1441
0.4	1.3288	2.6	0.1195
0.6	1.0034	2.8	0.0992
0.8	0.7732	3.0	0.0824
1.0	0.6062	3.2	0.0686
1.2	0.4821	3.4	0.0571
1.4	0.3878	3.6	0.0475
1.6	0.3148	3.8	0.0396
1.8	0.2572	4.0	0.0330
2.0	0.2113		

Table 6 Computed results for Example 3.

parameter	initial value	exact solution	computed result for fixed α	computed result for variable α
x_1	10.0	1.25	1.252871	1.249890
x_2	10.0	0.40	0.400530	0.399980
x_3	10.0	1.25	1.247213	1.250110
x_4	10.0	1.10	1.103420	1.099949

	number of iterations	sum of squares
fixed α	39	0.635251×10^{-5}
variable α	17	0.202611×10^{-10}

（1） $x_1\exp(-t/x_2)$

（2） $x_1\exp(-t/x_2)+x_3\exp(-t/x_4)$

（3） $\sum_{i=1}^{3} x_{2i-1}\exp(-t/x_{2i})$

（4） $\sum_{i=1}^{4} x_{2i-1}\exp(-t/x_{2i})$

（5） $\sum_{i=1}^{5} x_{2i-1}\exp(-t/x_{2i})$

（6） $\sum_{i=1}^{6} x_{2i-1}\exp(-t/x_{2i})$

但し，（1）から（5）までは Table 5 の $t=0.0\sim2.0$ を使用し，（6）は $t=0.0\sim2.4$ を使用した．さらに収束条件は何れも $\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n)\|^2\leq0.1\times10^{-6}$（但しユークリッド・ノルム）とする．

例3と同じデータを使用するのであるから，明らかに解は例3の関数と同じ形の（2）の場合となる．すなわち最適な項の数は2である．

それぞれの場合の結果が **Table 7**（次頁参照）に示されている．Table 5 の $t=0.0$ に対する y の値 2.5 は指数関数の係数となっているパラメータの値の和すなわち奇数番目の係数の和の正解を表わしている．Table 7 の各値を使って計算した結果を **Table 8**（次頁参照）に示す．さらに Table 5 の $t=2.2\sim4.0$ に関して2乗和を計算した結果も示しておく．明らかに

Table 7 Computed results for Example 4 (initial value $x_i=3.0$).

	computed result	number of iterations	sum of squares
(1)	2.429888 0.718193	14	0.260291×10^{-1}
(2)	1.248148 0.399687 1.251754 1.099117	16	0.373849×10^{-7}
(3)	1.247028 1.101191 0.604923 0.396939 0.648028 0.403994	24	0.257431×10^{-7}
(4)	0.601095 1.096596 0.599650 1.137595 0.711053 0.396981 0.588241 0.464189	24	0.951936×10^{-7}
(5)	0.777911 1.170128 0.694663 0.394943 0.483848 0.394943 0.187256 0.735951 0.356355 1.033160	49	0.781069×10^{-7}
(6)	0.595083 1.170567 0.357728 1.078836 0.402936 0.397993 0.416594 0.398004 0.411996 0.398000 0.315685 0.960826	35	0.528767×10^{-7}

Table 8 Computed results for optimization.

	sum of parameter		sum of squares
(1)	x_1	=2.429888	0.197649×10^{-1}
(2)	x_1+x_3	=2.499902	0.412856×10^{-7}
(3)	$\sum_{i=1}^{3} x_{2i-1}$	=2.499971	0.258038×10^{-7}
(4)	$\sum_{i=1}^{4} x_{2i-1}$	=2.500039	0.299371×10^{-5}
(5)	$\sum_{i=1}^{5} x_{2i-1}$	=2.500033	0.331823×10^{-5}
(6)	$\sum_{i=1}^{6} x_{2i-1}$	=2.500022	0.360672×10^{-6}

各場合とも係数の和は2.5に非常に近く，2乗和に関しては(1)の場合を除いて数オーダーの差しかない．従ってこれだけからは最適な項の数を推定することはできない．そこで Table 7 に再び着目すると近似的にではあるが以下のことが分かる．

(3)　$x_1=1.25,\ x_2=1.1,\ x_3+x_5=1.25,$
　$x_4=x_6=0.4$

(4)　$x_1+x_3=1.25,\ x_2=x_4=1.1,$
　$x_5+x_7=1.25,\ x_6+x_8=0.4$

(5)　$x_1+x_9=1.25,\ x_2=x_{10}=1.1,$
　$x_3+x_5=1.25,\ x_4=x_6=0.4,\ x_7=0.0$

(6)　$x_1+x_3+x_{11}=1.25,\ x_2=x_4=x_{12}=1.1,$
　$x_5+x_7+x_9=1.25,\ x_6=x_8=x_{10}=0.4$

すなわち(3)から(6)は(2)の場合に帰着するのである．さらに(1)の場合は Table 7, 8 の2乗和が他の場合と比較して大きくなっているので無視してよい．結局，以上のことから(2)の場合すなわち項数2の場合が最適であることが分かる．

7. 結　論

前章の結果からも分かるように，この方法はニュートン法よりも初期値依存に対する度合が小さい．しかもパラメータ推定に関しては，初期値に関する何らかの理論的あるいは経験的な情報があるはずで，この方法で十分であると言えよう．

本論文の特徴は，一般化逆行列とパラメータの埋め込みを結びつけ行列が特異性を持つ場合にまで拡張した点である．とくに指数型の関数のあてはめには非常に良いことが数値実験で分かった．

この方法は，多変数関数の近似や積分にも使用できる．多変数関数の近似においては，一意的な解がないが実際上は逆に前章のようにパラメータ推定を利用することによって解決される場合がある．また積分においても被積分関数を都合の良い関数系で近似的に展開し，係数すなわちパラメータを推定することによって計算できよう．

本論文は，大久保が北大情報工学専攻津田研究室において修士論文として行った研究をとりまとめたものである．さらに，数値計算は同専攻の ECLIPSE S/200 を利用させて頂いた．貴重な御意見を頂いた各位に感謝の意を表する次第である．

参　考　文　献

1) G.H. Meyer: On Solving Nonlinear Equations with a One Parameter Operator Imbedding, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 15, pp. 739～752 (1968).

2) P.T. Boggs: The Solution of Nonlinear Systems of Equations by A-stable Integration Techniques, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 8, pp. 767～785 (1971).

3) F. Freudenstein and B. Roth: Numerical Solutions of Systems of Nonlinear Equations,

J. Assoc. Comp. Math., Vol. 10, pp. 550~556 (1963).
4) C. G. Broyden: A New Method of Solving Nonlinear Simultaneous Equations, Computer J., Vol. 12, pp. 94~97 (1969).
5) L. V. Kantorovich and G. P. Akilov: Functional Analysis in Normed Spaces, pp. 695~749, Pergamon, London (1964).
6) G. H. Golub: Numerical Methods for Solving Linear Least Squares Problem, Number. Math., Vol. 7, pp. 206~216 (1965).

(昭和 52 年 3 月 14 日受付)