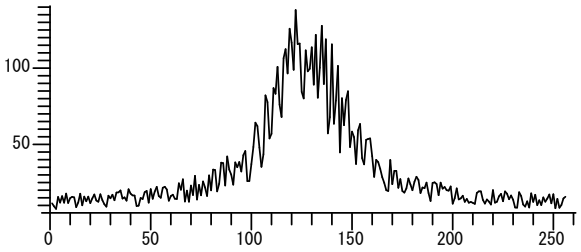
非線形最小二乗法

課題

以下のスクリプトで与えられたデータ

```
> ff:=t->subs({a=10,b=40000,c=380,d=128},a+b/(c+(t-d)^2)):
  T:=[seq(ff(i)*(0.6+0.8*evalf(rand()/10^12)),i=1..256)]:
  with(plots):listplot(T);
```



を，ローレンツ型関数

```
> f(x)=a+b/(c+(x-d)^2);
```

$$f(x) = a + \frac{b}{c + (x-d)^2} \qquad (1.1.1)$$

にカーブフィッティングするプログラムを作成し，そのパラメータを決定せよ．ここで a はバックグラウンドの強度， b はローレンツ関数の強度， c は線幅， d はピーク位置を表す．

課題の背景

(1.1.1)式の特徴は，パラメータが線形関係にないこと．非線形の最小二乗法を用いてデータフィットをしてくれる関数はdefaultではMapleには用意されていない（ようだ）．そこで，実際に非線形最小二乗法のプログラムを作成し，実際のデータへのフィッティングを試みよう．

参照

公式のサポートではないが，世界中の科学者，技術者がMapleで開発したlibraryを公開している
The Maple Application Center(http://www.mapleapps.com/)のData Analysisのカテゴリーに，後述するLevenberg-Marguqrdt法を用いたData fittingの汎用プログラムGeneralized Weighted Non-Linear Regression Using the Levenberg-Marquardt Method by David Holmgren (http://www.mapleapps.com/categories/data_analysis_stats/data/html/genfit_6.html)がある．

パラメータの初期値を $(a_0 + \Delta a, b_0 + \Delta b, c_0 + \Delta c, d_0 + \Delta d)$ とする
このとき関数fを真値 (a_0, b_0, c_0, d_0)
のまわりでテイラー展開し，高次項を無視すると

$$\Delta f = f(a_0 + \Delta a_1, b_0 + \Delta b_1, c_0 + \Delta c_1, d_0 + \Delta d_1) - f(a_0, b_0, c_0, d_0)$$
$$= \left(\frac{\partial}{\partial a} f\right)_0 \Delta a_1 + \left(\frac{\partial}{\partial b} f\right)_0 \Delta b_1 + \left(\frac{\partial}{\partial c} f\right)_0 \Delta c_1 + \left(\frac{\partial}{\partial d} f\right)_0 \Delta d_1 \qquad (1.2.1)$$

となる．
課題でつくったデータはt=1からt=256までの時刻に対応したデータ点
$f_1, f_2, \cdots f_{256}$とする．各測定値とモデル関数から予想される値との差$\Delta f_1, \Delta f_2, \cdots$, Δf_{256}は，

$$\begin{bmatrix} \Delta f_1 \\ \Delta f_2 \\ \vdots \\ \Delta f_{256} \end{bmatrix} = J \begin{bmatrix} \Delta a_1 \\ \Delta b_1 \\ \Delta c_1 \\ \Delta d_1 \end{bmatrix} \qquad (1.2.2)$$

となる．ここでJはヤコビ行列と呼ばれる行列で，4行256列

$$J = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial a} f\right)_1 & \left(\frac{\partial}{\partial b} f\right)_1 & \left(\frac{\partial}{\partial c} f\right)_1 & \left(\frac{\partial}{\partial d} f\right)_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \left(\frac{\partial}{\partial a} f\right)_{256} & \left(\frac{\partial}{\partial b} f\right)_{256} & \left(\frac{\partial}{\partial c} f\right)_{256} & \left(\frac{\partial}{\partial d} f\right)_{256} \end{bmatrix} \qquad (1.2.3)$$

である．このような矩形行列の逆行列は転置行列J^Tを用いて，

$$J^{-1} = (J^T J)^{-1} J^T \qquad (1.2.4)$$

と表わされる．したがって，真値からのずれは

$$\begin{bmatrix} \Delta a_2 \\ \Delta b_2 \\ \Delta c_2 \\ \Delta d_2 \end{bmatrix} = (J^T J)^{-1} J^T \begin{bmatrix} \Delta f_1 \\ \Delta f_2 \\ \vdots \\ \Delta f_{256} \end{bmatrix} \qquad (1.2.5)$$

理想的にはパラメータの初期値を $(\Delta a_2, \Delta b_2, \Delta c_2, \Delta d_2)$ は
パラメータの初期値を $(\Delta a, \Delta b, \Delta c, \Delta d)$ に一致するはずだが，測定誤差と高次項のた

めに一致しない．初期値に比べ，より真値に近づくだけ．そこで，新たに得られたパラメータの組を新たな初期値に用いて，より良いパラメータに近付けていくという操作を繰り返す．新たに得られたパラメータと前のパラメータとの差がある誤差以下になったところで計算を打ち切り，フィッティングの終了となる．

Mapleによる解法の指針

線形代数計算のためにサブパッケージとしてLinearAlgebraを呼びだしておく．

```
> with(LinearAlgebra):
```

データを読み込む．

```
> datapoint:=[seq([i,T[i]],i=1..256)]:
```

ローレンツ型の関数を仮定し，関数として定義．

```
> f:=a+b/(c+(x-d)^2):
  f1:=unapply(f,x);
```

$$f1 := x \rightarrow a + \frac{b}{c + (x-d)^2} \qquad (1.3.1)$$

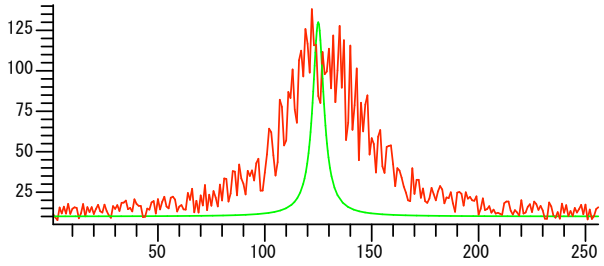
ヤコビアンの中の微分を新たな関数として定義．

```
> dfda:=unapply(diff(f,a),x):
  dfdb:=unapply(diff(f,b),x):
  dfdc:=unapply(diff(f,c),x):
  dfdd:=unapply(diff(f,d),x):
```

初期値を仮定して，データとともに関数を表示．

```
> guess1:={a=10,b=1200,c=10,d=125};
  plot([datapoint,subs(guess1,f1(x))],x=1..256);
```

$$guess1 := \{a = 10, b = 1200, d = 125, c = 10\}$$



解法のヒントと手順

1 (1.2.2)式のΔf_iを求めよ．T[i]-f1(i)を1..imaxまで求め，Vectorに入れる．
2 (1.2.3)式のヤコビ行列を求めよ．
3 (1.2.4)式にしたがってヤコビ行列の逆行列を求めよ．また，(1.2.5)式にしたがって新たなパラメータの組を求めよ．
4 求めたパラメータを用いたモデル関数と，データをプロットしてみよ．前回より近づいてい□□□□
5 上の操作を適当に繰り返し，パラメータを収束させよ．その値とプロットを示せ．

非線形最小二乗法に関するメモ

前述のフィッティング法の説明では，テイラー展開を用いた説明であり，どこが最小二乗法かわからないかもしれません．しかしこれは，最小二乗法のχ^2関数にNewton-Raphson 法を適用し，二次微分を無視した方法と考えられる．

このGauss-Newton法と呼ばれる非線形最小二乗法は線形問題から拡張した方法として論理的に簡明であり，広く使われている．しかし，収束性は高くなく，むしろ発散しやすいので注意が必要．2 次の項を無視するのでなく，うまく見積もる方法を用いたのがLevenberg-Marquardt 法である．明快な解説がNumerical Recipes in C(C 言語による数値計算のレシピ）WilliamH.Press 他著，技術評論社1993にある．