数値計算：非線形最小二乗法

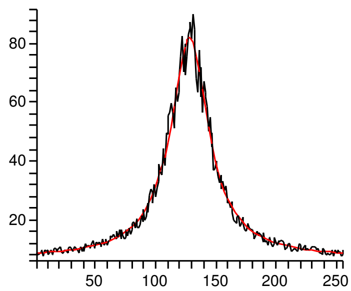
関西学院大学・理工学部・情報科学科　西谷滋人

2005.12.2

1　原理

前回の授業では，データに近似的にフィットする最小二乗法を紹介した．今回は，フィット式が多項式のような線形関係にない関数の最小二乗法を紹介する．

図のようなデータにフィットする場合を考えよう．



このデータにあてはめるのはローレンツ関数,

$$F(x) = a_1 + \frac{a_2}{a_3 + (x - a_4)^2} \tag{1}$$

である．この関数は今まで見てきたようなパラメータが線形関係になっていない．χ^2 関数は，いままでと同様に

$$\chi^2 = \sum_i^N (d_i)^2 = \sum_i^N (F(x_i) - y_i)^2 \tag{2}$$

で，$a_0, a_1, \cdots$ をパラメータとして変えた時に最小となる値を求める点もかわらない．しかし，線形の最小二乗法のように，連立方程式を単に解くだけでは求まらない．

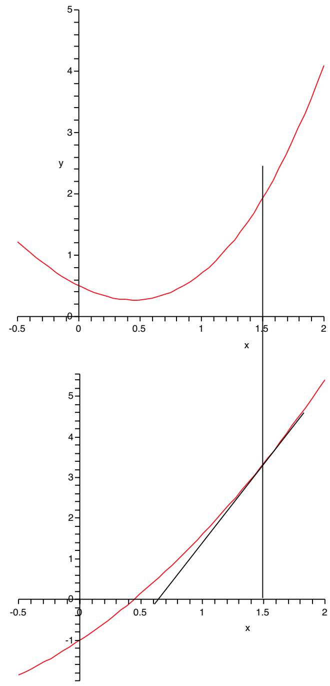
図のような 2 次関数の最小値を求める場合を考える．最小値の点 x_0 のまわりで，Taylor 展開すると

$$y = y_0 - d(x - x_0) + \frac{1}{2}D(x - x_0)^2 \tag{3}$$

であるから，最小の点 x_0 は

$$x_0 = x + D^{-1}(-d) \tag{4}$$

と予測される．図を参照して上の式を導け．またその意味を考察せよ．



課題

1. 非線形最小二乗法 (ローレンツピークフィット)
   以下の 256 個のデータ

   ```
   ndata:=256;
   f1:=t->subs({a1=10,a2=40000,a3=380,a4=128},a1+a2/(a3+(t-a4)^2) );
   T:=[seq(f1(i)*(0.6+0.8*evalf(rand()/10^12)),i=1..ndata)]:
   ```

   を

   ```
   f:=t->a1+a2/(a3+(t-a4)^2);
   ```

   で近似したときのパラメータ{a1,a2,a3,a4}を求めよ．ただし，パラメータの初期値は，ある程度近い値にしないと収束しない．

2. 非線形最小二乗法 (二山ピークのフィット)
   以下のように作成したデータ

   ```
   ndata:=256;
   f1:=t->subs({a=10,b=40000,c=380,d=128},a+b/(c+(t-d)^2) );
   f2:=t->subs({a=10,b=40000,c=380,e=90},a+b/(c+(t-e)^2) );
   T:=[seq((f1(i)+f2(i))*(0.6+0.2*evalf(rand()/10^12)),i=1..ndata)]:
   ```

   を

   ```
   f:=t->a1+a2/(a3+(t-a4)^2)+a2/(a3+(t-a5)^2);
   nparam:=5;
   ```

   で近似したときのパラメータを求めよ．