

単調性をもつ場合には第3項を無視する. 行列 T は非負, 単調増加, 凸性を表すときにはそれぞれ

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & \cdot \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 1 & 1 & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ n & n-1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

の形をしている. 凹関数, 減少から増加へ転じる関数等行列 T によってかなり自在に表現することができる.

関数 f の平滑化として3次の離散スプラインを用いると(1)の回帰関数 g を推定する問題は,

$$R^2(f) = \|y - Eg(f)\|^2 + \alpha^2 \|Df\|^2$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} : (n-2) \times n \text{ 行列}$$

とおけば, $\text{Min}_f R^2(f)$ となる f^* を求める非線形最小2乗問題となる. 従ってこれを Gauss-Newton 法によって解き, $\text{ABIC}(\alpha)$ を定義することにより最適な関数を得る.

下に掲げた図1, 2は凸性のあるデータに α を固定して非負条件だけをつけた時と凸性を構造に組み込んだ場合, 図3, 4は正規分布より上部にある関数を推定した時の最適な関数と α が小さい場合との相違を示す.

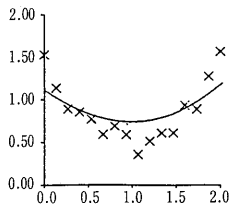


図1. data=16
mesh=155
 $\alpha=400$

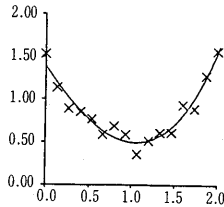


図2. data=16
mesh=155
 $\alpha=400$

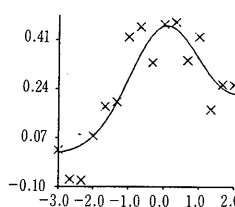


図3. data=16
mesh=155
 $\alpha=396.8$

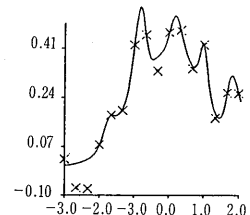


図4. data=16
mesh=155
 $\alpha=0.1$

非線形方程式系の数値解の精度推定について

土 谷 隆

伊理によって提案された“高速微分法” ([1]) は, 従来数値微分に頼らざるを得なかったような大規模な方程式の Jacobi 行列や関数の勾配, Hesse 行列を高速にしかも正確に計算し, 同時に関数値の丸め誤差推定値を得るための手法であり, 非線形方程式系, 非線形最適化問題や常微分方程式系の解法などに役立つことが期待されている.

Newton 法系統の算法によって n 変数の非線形方程式系 $f_i(x)=0$ ($i=1, \dots, n$) の解を求める際にも, この手法は (1) 反復に際して正確な Jacobi 行列を利用でき, (2) 関数値の丸め誤差の大きさのシャープな上からの評価 $\overline{\Delta f}$ を利用して, “ $|f_i(x)| \leq \overline{\Delta f}_i(x)$ ($i=1, \dots, n$) が成立した時に反復を停止する” といった, 数値解析的に見て合理的な停止条件を採用できる, 等の利点をもたすことが, 実用的な問題

への適用を通じて実証されている ([2]).

ところで、方程式を解く際には、得られた近似解 \hat{x} の精度を知りたいことも多い。解を x^* としたとき、近似解に含まれる誤差 $\Delta x (= \hat{x} - x^*)$ は、Newton法が2次収束するような x^* の近傍では、残差に含まれる丸め誤差 $\Delta f (= (f \text{ の計算値}) - (f \text{ の正確な値}))$ の影響によるものがほとんどである。そのような近傍では f の線形近似が有効であり、 $\Delta f \approx -J(x)\Delta x$ (J は f の Jacobi 行列) が成立すると考えてよい。そこで、 $\Delta x_i \approx -\sum_j [J^{-1}]_{ij} \Delta f_j$ ($i=1, \dots, n$) も成立することに注意すると、各 Δx_i の大きさは $|\Delta x_i| \leq \sum_j |[J^{-1}]_{ij}| |\Delta f_j|$ と評価できる。ところが、各 $|\Delta f_j|$ が $|\Delta f_i|$ の高々十倍程度の過大評価で済むような“良い評価”であるにもかかわらず、上記の近似解の誤差評価が数百倍の過大評価を与えることがある。これは、各関数の丸め誤差 Δf_i の間に関係があることを無視したためである。 Δf の各要素に関係があることまで考慮した評価は、高速微分法の“ベクトル関数と定数ベクトルの内積の勾配を計算する算法”を利用して実現できる ([3])。この方法に要する手間はNewton法の反復回数分程度で、他にも“Jacobi行列のUL分解(LU分解ではない)を利用する”などの特徴も持っている。実際に適用してみると、近似解の誤差に関しても残差の場合と同様、十倍程度の過大評価で済む評価が得られることが分かった。

参 考 文 献

- [1] Iri, M. (1984). Simultaneous Computation of Functions, Partial Derivatives and Estimates of Rounding Errors — Complexity and Practicality, *Japan Journal of Applied Mathematics*, Vol. 1, No. 2, 223-252.
- [2] 伊理正夫, 土谷 隆, 星 守(1985). 偏導関数計算と丸め誤差推定の自動化の大規模非線形方程式系への応用, *情報処理*, Vol. 26, No. 11, 1411-1420.
- [3] 土谷 隆, 笹山晋一(1987). 非線形方程式系の解法に対する高速微分法の応用, *グラフ理論の数値計算への応用*, 統計数理研究所 共同研究レポート, 4, 96-116.

一次元ランダムパッキングと角谷の線分分割モデル

伊 藤 栄 明

一次元ランダムパッキングは路上駐車の問題として知られている。長さ x の区間 $[0, x]$ に長さ 1 の区間をランダムにつめて行く。最初の区間 I_1 の左端は $[0, x-1]$ 上の一様分布により定められる。 I_1, I_2, \dots, I_k の区間がすでにつめられていたとすれば I_{k+1} はすでにつめられた区間にかさならない位置から等確率でえらばれるものとし、長さ 1 以上のすきまがなくなるまでこれを続けるものとする。長さ $1 (\geq d)$ 以上のすきまがあるときに限り d の長さの区間をつめることができるというようにモデルを拡張する。このようなモデルを考えると Rényi (1958) によって議論された場合、 $d=1$ 、を特別な場合として含むことになる。

$d=0$ の場合は次の Kakutani (1975) の線分分割モデルと関連している。長さ x の線分が k 個に分割されたとする。 k 個のうちの長さ最大な線分を一様分布によりランダムに分割し $k+1$ 個の線分を得る。このような分割を $k=1$ から始めて、長さ 1 以上の線分がなくなるまで続けるものとする。このモデルより得られる線分の個数の期待値は上記ランダムパッキングにおける $d=0$ の場合に得られる区間の数の期待値に等しい。 $d=0$ の場合のランダムパッキングは 2 進探索木の連続モデルと考えられ、これについての自然な解析ができる。また $d=0$ の場合は一次元脆性破壊の確率モデルと考えることもできる。上記の拡張されたランダムパッキングにより生成されるすきまの最小値 $L(x)$ が h 以上である確率 $\Pr(L(x) \geq h)$ を $f(h, x)$ とおくと $1-d \leq x$ において

$$f(h, x+d) = \frac{1}{x} \int_0^x f(h, x-y) f(h, y) dy,$$