

なるような書き方をしよう。¹⁾

吾々の $\pi^p \rightarrow \pi^n$ に対する χ^2 は、300点の t_k ($k = 1, \dots, 300$) に対して、実験誤差も含めて与えられている(素粒子反応のこのような実験は、Counter 実験と呼ばれるもので、実験の統計誤差は、例えばFeynman Lecture, Vol.1, 第6章確率 (Addison-Wesley, 1969) の方法で与えられる)。

理論式は複雑であるから省略させていただく。この式は $n = 14$ 々のパラメーターによって規定される。これらのパラメーターに対する出発値として各々に対して $n(n+1) = 14 \times 15$ 個の一樣の擬似乱数 ($0-1$) を発生させ適当な範囲でパラメータズを決める。

Simplex法²⁾を適用するには、こうして決められた $n+1 = 15$ 組の初期値 (a_i, b_i, c_i, \dots) に対する15ヶの χ^2 から出発する。こうして求めた χ^2 は、パラメーター空間 (14次元) 上のある閉じた曲面を形成する。ここから先は、Simplex法によって、取り得る χ^2 の範囲をせばめて行く。この方法を採用する前に、理論式の主な部分の4~5個のパラメーターについては、直接法によって、大凡の見当がついていたので、Simplex法に移ってから約200~300回の繰り返し操作で、 χ^2 の取り得る範囲(それらの最大値と最小値の差が最小値の1/10位になるまで縮小する)がせばめられた。

次にこのように狭められた範囲のパラメーターから χ^2 を更に小さくするようなパラメーターを求めるに当って、Marquardt法²⁾が適用された。この方法で安定した χ^2 (χ^2 が minimum における変化量はその値の $1/1000$ 乃至 $1/10000$ に当る)の値に達するのに更に数回のくりかえし計算が必要である。尚Marquardt法で χ^2 が安定しない解は捨てられる(擬似の minimum であった)。

吾々は、以上の擬似乱数、Simplex法、Marquardt法及び $x-y$ plotter で計算結果を示すまでを、計算時間を出きるだけ少なくするような仕方でも1つのプログラムしてある。

吾々の方法は更に弾性散乱 ($\pi^+p \rightarrow \pi^+p$) に応用する事を、この一連の仕事の目的としている。ここに上げた例題は余りに複雑過ぎて、具体的にFlow chartを含めた計算例(少数のパラメーターで、実験誤差が分かっている場合又は誤差の測定は為されていない例等)は、次号で掲載させていただく事にします。

- 1) 吾々の2年越しの研究結果は、今論文をまとめている最中で、何れProgress of Theoretical Physics, (基礎物理学研究所発行) という欧文の雑誌に発表する予定である。若し、もっと詳しい結果をお知りになりたい方は、Preprint も作りますので、著者等に請求して下さい。
- 2) J. Kowalik and M. R. Osborne, Methods for Unconstrained Optimization problems (American Elsevier, 1968.)

山本善之、小山健夫訳、非線型最適化問題(培風館)、尚、 χ^2 -test の分かり易い解説が小柳義夫、" χ^2 -fitの理論と実際、" と題して、日本物理学会誌Vol.28 (1973), 18にのっている。

測定値から未知パラメーターを決定する方法(I)

—— パラメーターに関して非線形な方程式の場合 ——

理学部 須原正彦・村田重男

§ 1. 測定の次に来るもの

我々は、応々にして苦勞して物理測定実験により得た物理量そのものもさることながら、例えば圧力、温度その他種々の量の関数として物理量が求まった場合、その関数中のパラメーター

(これも物理量であることもある)を決定しようとすることがある。関数が決定されるべきパラメーターに関して線形(linear)な場合は、多くの成書に記され、このような場合の最小二乗法は、計算機のSSL中にもあるが、学部3年生の実験結果の解析に我々の研究室ではそのプログラムを作成させているくらいである。しかし、非線形(non-linear)なパラメーターの決定方法についてまとめてある成書は少ない。我々の実測結果の解析は、パラメーターに関して非線形な関数であるので、いかにして速く、精度よくパラメーターを決定すべきか昨年の夏頃から種々調べていた際、金沢大学計算機センター蔵の図書の中に、KowalikとOsborne¹⁾の「非線形最適化問題」なる書を見つけ、非常に興味を持って読み、我々の問題を解決すべく早速プログラミングに入った。そうこうしているうちに、東大計算機センター・ニュースをやはりセンターの書架でながめていたとき、その中に「非線形関数に対する最小二乗法(Powellの方法)」が東大のライブラリーに登録された²⁾ことを知った。之は我々がプログラミングを始めていた方法の1つであったので、一時はがっかりしたが、「乗りかかった船」なので、勉強のためにもと、非線形パラメーターの決定(別の言葉でcurve fitting)のプログラムの完成を目指した。本年に入って、たまたま日本物理学会誌に小柳氏³⁾が、「 χ^2 -fitの理論と実際」と題して種々な方法を具体的に解説されていることを知り、日本においても、従来あまり知られていないこの種の問題に多くの研究者が目を向けるようになって来ているように思われた。我々のプログラムも次第に完成に近づきつつある(「真の完成」一種々のチェックを終了したものではないかも知れない)ので、その結果を順次発表していきたいと思っています。

今回は、我々が解析に用いている理論式とパラメーター決定法の概要を述べる。

§ 2. 我々の研究と解析の必要性

さて我々は、核四重極共鳴(NQR)スペクトロスコピーを用いて、固体物性——主として分子性結晶における化学結合性及び分子運動を調べている。NQRは核四重極モーメントを持つ原子核と、その核の場所での電場勾配(結晶中の電子および他の核によって作られている)との相互作用により量子化されたいくつかのエネルギーレベル間に電磁波を共鳴吸収する現象である。吸収する電磁波は、核の種類、化学結合性の差異により、ラジオ波からUHF帯に至る非常に広い範囲にわたっており、しかもスペクトル線の幅が非常に狭いので、観測している核のまわりの電氣的、電子的あるいは磁氣的環境の微細な違いが共鳴周波数の違いとして、明確に区別できるので、その核を含む化学結合性のわずかな差異や、結晶場の影響(例えば相転移など)がくわしく調べられる。従って、共鳴周波数の温度依存性が大きい(普通の場合でも線幅1 KHzのスペクトル線が0~300 Kで約1 MHz変化する)ので、精密な温度計あるいは温度レギュレーターとしても使用されている。しかし、温度変化に対する理論的説明は充分なされておらず、我々も研究を進めているが、従来用いられて来ているBayerの理論(問題点多し)を我々も現時点で踏襲している。この理論によると、分子性結晶における共鳴周波数の温度変化は、特に問題としている核が末端に結合しているような分子では、その分子の結晶中での回転的振動(libration)もしくはその核を含む一つの結合の変角振動(bending vibration)に起因するとされており、その振動の平均二乗振幅が温度と共に大きくなることにより共鳴周波数が著しく減少することを説明している。理論式は

$$\nu(T) = \nu_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \sum_i \frac{h}{2\pi\nu_i I_i} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(ah\nu_i/kT) - 1} \right) \right\}$$

であり、測定は温度Tに対する共鳴周波数 $\nu(T)$ である。通常、慣性モーメント、I, は分子の幾何学的構造より求めたものを用いるので、未知パラメーターは分子の静止状態での共鳴周波数 ν_0 と分子振動の振動数 ν_i である。明らかにパラメーター ν_i に関しては非線形な関数であるので、単純な最小二乗法を用いては解析できない。更に分子振動の非調和性を考慮に入れる必要

性があり、この効果を quasi-harmonic 近似で入れると、パラメーター ν_i が更に温度 T の関数となるので、解析を更に複雑化する。又、自由分子と結晶化したときの分子の慣性モーメントとは異なっていると考えられるので、之もパラメーターにすれば、1つのモードの振動しかない場合ですら多くの非線形パラメーターが生ずる。

一方、解析に用いる実験の精度は、共鳴周波数については有効数字5桁、温度は3~4桁であり、例えば液体窒素温度(77K)と室温(300K)の間で測定点の数は500点も可能である。かつ共鳴周波数の温度変化は相転移がない限り単調である。従ってかなりの数の非線形パラメーターが存在しても、理論式に測定データをfitさせることが出来るのではないと思われる。

この様な期待のもとに我々は、非線形パラメーターを決定する何種類かの方法を選び、そのプログラミングを行なっている。現時点で充分吟味されてはいないが、プログラムがうまく動いたものと、まだ悪戦苦闘しているものもある。今回は、我々がプログラム化した(しつつかある)方法が、どの様な考え方でせめて行く技法なのかを簡単に記すことにとどめる。更にくわしい事は前述の文献を参照されたい。

§ 3. 我々の選んだ方法

我々の選んだ方法は、 χ^2 -fit, 最小二乗法, 最適化法あるいは curve fitting と呼ばれるもので、制限条件をもたない多変数関数の最小値を計算する方法である。大きく分類すると、

- ①直接探索法——関数の微分を用いず、試行錯誤により多変数関数の最小値を求める方法で、原始的ではあるが、パラメーターの数の少ない場合には用いられる。高い精度、早い収束性はのぞめないが、大体の値を見当づける初期段階においては有効で、かなりかけ離れた点から出発するにも適す。
- ②傾斜法——関数の値に加えて、その1次や2次微係数が求め得る場合、その情報にもとづいて最小値をさぐって行く方法で、最小値の近くから始めれば、収束性が改良される。
- ③最小二乗法——最小化される関数が2乗和の形をとる特別な場合であるが、求めようとしているパラメーターの数に比し、圧倒的に多い測定データの χ^2 -fit 即ち誤差の2乗を最小化して、curve fitting を行ない、パラメーターを決定するという、常に我々が、最終的に用いなければならない方法である。関数の微係数を用い最小点の近くから探索するのに適している。

以上分類した3種の方法の中にそれぞれ多くの独特な方法が在るが、我々は次の方法を用いることにした。(下線を引いた方法は、プログラムが一応成功したものである。)

- ①-a : 黄金分割による探索——多くのパラメーターの内の1つに関して最小値を求める。各ステップごとに最小点を含む区間の幅を黄金分割で減らしてゆく。之を全てのパラメーターについてくりかえす。 n 回後の区間は $b^{(n)} - a^{(n)} = (0.618)^{n-1} (b^{(1)} - a^{(1)})$ 実行は容易;収束の割合が保証されているが、高信頼度を得るときは収束はおそい。
- ①-b : 二次補間法——関数とその最小点の近傍では2次の補間多項式で十分近似できるといふ仮定を用い、最小点をかこむ領域をちぢめてゆく。収束の速度は真の最小値と近似的な最小値との差の1.3乗に比例する。この方法は、より小さな関数値を求めるといふ手続きであるので、解に近づくにつれて1回のステップ幅が小さくなるので、最終状態では各直線方向の探索には2次補間を1回行なうだけで十分になる。
- ①-c : Hooke-Jeeves の方法——パターン決定とパターン移動からなるくりかえしの手法。前者は目的関数の局所的な動きをあるステップ幅で全パラメーターの方向について直線探索をする。後者は前者により到達した点を基点として一気に他の基点へとばす。そこで再び前者を行ない定められた点の関数値が源基点における値より小さければ、その点を新しい基点として手続きをくりかえす。そうでなければ、ステップ

幅を減じて前者をくりかえす。あらかじめ決められたステップ以下になったときに収束と考える。パラメーターが簡単な場合は収束が(a)(b)より悪いが、パターン探索である点の特徴。

①-d : Rosenbrock の方法——之は(c)の方法の発展で、パターン決定にあたる探索の各サイクルで互いに直交する方向の組を用いる。この方法の特徴は1つ前の反復段階での全てのステップが成功して得られた方向であるので、関数が最も速く減少する方向に向いていると期待できる点である。之は初期段階での最小点の決定に非常に有効である。

①-e : シンプレックス法——regular なシンプレックス——即ち n 次元空間 ($n + 1$) 個の点でかこまれた図形空間 (正多面体) ——の1つの頂点の、残りの点ではられる超平面に関する鏡像をとり新しいシンプレックスをつくり (之はシンプレックスの移動にあたる)、あるいはシンプレックスの拡張又は収縮を行ないながら最小点をかこむ空間をちぢめていく。之は収束が速く、浅い局所的極小点や関数の誤差に対し鈍いのが特徴。停止条件は、 \mathbf{x} をベクトルで表わしたパラメーター、 ϵ をあらかじめ決められた小さな数として

$$\left\{ \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} (f(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} f(\mathbf{x}_j))^2 \right\}^{1/2} < \epsilon$$

②-a : 微分を用いないPowell の共役傾斜法——関数の微係数を *explicite* に計算することは、多くの関数そのものの計算と同程度に複雑であり、関数値そのものの計算も必要である。微分を行なうと同程度の効率のある便利な方法として、2つの点からある V 方向に求めたパラメーターに関する正值2次形式の最小点を結ぶベクトルは V と共役であるという性質を用いて (即ち微係数を用いたと同じ効果をもつ) 極小点に収束させる。之はより小さな値ではなく、最小値を求める点、探索の方法が直交する方向でなく共役な方向である点で Rosenbrock のアルゴリズムの発展である。テストの結果、収束が速いようである。なお、この方法は、東大大型のライブラリーに登録されている。(C7/TC/POW2)。

③-a : 優決定系に対する Gauss の反復法——非線形方程式の優決定系 (方程式の数が未知パラメーターの数より多い系) は無矛盾でないので、最小二乗法の意味で決定されねばならぬ。第 i 段階での近似解 $\mathbf{x}^{(i)}$ のまわりに $f(\mathbf{x})$ をテーラー展開し、 $\mathbf{x}^{(i)}$ の補正 $\mathbf{h}^{(i)}$ の2次以上を無視して得られる線形方程式の解を最小二乗法で求める。これを $f(\mathbf{x}) = \mathbf{r}$ に対して $|\mathbf{r}|$ を最小にするベクトル \mathbf{x} を決定してゆく。この方法は、実験データにあてはめの問題でパラメーターを決定する場合に特に適切であるので、多くの実験家が、それぞれの分野で用いている方法である。しかし、方程式が無矛盾でない限り正解に近い点から出発しても発散する可能性があるので、Marquardt は、正規方程式の左辺の対角要素を補正することにより、最大傾斜法 (我々は用いていない) に近くする方法を提案し、かなりの成功をおさめている。我々のテストも、上述の原因で発散し、満足な結果を現在のところ得ていない。

③-b : 微分を用いないPowell の最小二乗法——多変数非線形方程式の組の解を求める最適化問題の解法の一つであるよく知られている Newton の方法において計算すべき微分の代わりに、差分を用いた場合の内、特に1変数の場合をセカント法という。このセカント法の拡張により、微分を計算せずに二乗和を最小化する方法が可能である。更に前述の直線探索のテクニック、行列の性質、スケーリングなどをたくみに用いた方法で、パラメーターが多い場合に極めて有効な方法である。但し、パラメーターが多くなると、記憶容量がいるのが欠点である。プログラミングは進行中で

あるが、東大大型ライブラリーに登録されているが、その内容は我々は知らない。

以上、我々の研究上の必要性から調査し、プログラム化している非線形パラメーターの決定方法を簡単に列記した。この中のどれかは、多分、すでに之を読まれている方の中にプログラム化し、使用されているものもあると思われますが、その様な方々からの御意見、データーを聴かせていただければ幸いです。さらに之らの方法を自由に用いるためのBOS IIによるプログラム編集方法については、村田氏の報告を参照して下さい。(次号につづく)

- 1) J. Kowalik, M. R. Osborne, 「非線形最適化問題」(1968), 山本善之, 小山健夫 共訳(培風館)
- 2) 東大計算機センター・ニュース, 4, Suppl. 1, 8 (1972)
- 3) 小柳義夫, 日本物理学会誌, 28, 18 (1973)
- 4) 村田重男, 金大計算機センター広報, 2, (3), 12 (1973)

— I/Oチャンネル —

プログラム相談員のレポート

工学部・機械 佐藤秀紀

他人の組んだプログラムは、わかりにくくて読むのが大変だという話しはよく聴く。確かに大きなプログラムともなるとなかなかやっかいである。しかし、わかりにくいけれども時にはおもしろい考え方にも出合う。ベテランの方にとっては当然のことであるかもしれないが、小生のような者にとっては、結構勉強にもなり、おもしろくもある場合がある。プログラミングをすることのなかには、多少ともパズル解きの感じ、頭の体操的要素があるからであろう。しかも、それらは単純な問題のなかにこそ、よりおもしろみがでてくるようである。「五目ならべ」が、わずかの手で勝負が決まる時ほど指手のあざやかさが感ぜられるように。

学生諸君のプログラムを見る機会が多いのであるが、比較的よく眼につくことは、計算時間を短かくすること、プログラムを簡潔に書くことなどに注意があまり払われていないことである。初級のプログラム講習会やマニュアルのみを読んでプログラムを作るのであるから最初のうちはしかたがないとも思われるが、とくに前者についていえばDÖループのなかの数式表現がまずい例が多い。

いかにFORTRANは数式どおり書けばよいといっても

```
DÖ 10 I = 1, N
DÖ 10 J = 1, N
C(I, J) = SQRT(A(I)**2 + B(J)**2) / 2.0 + SIN(SQRT
      (A(I)**2 + B(J)**2))
```

10 CÖNTINUE

では困るのであり、たとえば

```
DÖ 10 I = 1, N
A2 = A(I)**2
DÖ 10 J = 1, N
AB2 = A2 + B(J)**2
SQAB2 = SQRT(AB2)
C(I, J) = SQAB2 * 0.5 + SIN(SQAB2)
```

10 CÖNTINUE