関数のあてはめ

January 10, 2013

1　パラメータ

n 組の対になった測定データ (x_i, y_i) $(i = 1, 2, \cdots, n)$ があり、そのデータにあてはめたい関数 $f(x, \mathbf{a})$ は、m 個 $(m < n)$ のパラメータ $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_m)$ を含んでいるものとする。また、x_i には誤差がないか、または、y_i の誤差と比較して無視できるものとする。y_i が属する母集団分布は、母平均が $f(x_i, \mathbf{a})$，母分散が σ_i^2 の Gauss 分布 $N(f(x_i, \mathbf{a}), \sigma_i^2)$ であり、y_i はその母集団からの 1 個の標本であると仮定すると、尤度関数は、

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left[-\frac{\{y_i - f(x_i, \mathbf{a})\}^2}{2\sigma_i^2}\right] \tag{1}$$

で表される。

　また、y_i が属する母集団分布は、母平均が $f(x_i, \mathbf{a})$ の Poisson 分布 $P(y_i; f(x_i, \mathbf{a}))$ であり、y_i はそれからの 1 個の標本であると仮定すると、尤度関数は、

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^{n} \frac{\{f(x_i, \mathbf{a})\}^{y_i}}{y_i!} \exp\{-f(x_i, \mathbf{a})\} \tag{2}$$

で表される。

　測定値 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ が得られる確率を最大にする、つまり、尤度関数 $\mathcal{L}$ を最大にするためには、$\mathcal{L}$ の対数をとり、それをパラメータ a_j $(j = 1, 2, \cdots, m)$ で微分して 0 とおくと、

$$\sum_{i=1}^{n} w_i \{y_i - f(x_i, \mathbf{a})\} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_j} = 0 \tag{3}$$

が得られる。ここで、データが Gauss 分布からの標本の場合は、$w_i \equiv 1/\sigma_i^2$、データが Poisson 分布からの標本の場合は、$w_i \equiv 1/f(x_i, \mathbf{a})$ である。方程式 (3) を a_j について解けば、パラメータを求めることができる [1, 2, 3]。このようにして、最適なパラメータを求める方法は、**最尤法**と呼ばれる。また，データが Gauss 分布からの標本の場合は、最尤法は、式 (1) の尤度関数の指数関数の引数部分、

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\{y_i - f(x_i, \mathbf{a})\}^2}{\sigma_i^2} \tag{4}$$

を最小にすることと同じで、**最小二乗法**と呼ばれる。

　最小二乗法、または、最尤法を利用すると、データにあてはめる関数モデルに含まれるパラメータの最適値を求めることができる。しかし、関数モデルがパラメータに関して非線形である場合、式 (3) は、非線形連立方程式になり、解析的に解くことはできない。そこで、関数モデルがパラメータに関して非線形である場合、パラメータの最適値を求めるためには次のような方法をとる。

　最適なパラメータ $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_m)$ に近いパラメータ $\mathbf{a_0} = (a_{10}, a_{20}, \cdots, a_{m0})$ が与えられているとき、最適なパラメータ $\mathbf{a}$ は補正項 $\delta\mathbf{a}$ を用いて、$\mathbf{a} = \mathbf{a_0} + \delta\mathbf{a}$ で表される、データにあてはめる関数モデル $f(x, \mathbf{a})$ を $\mathbf{a_0}$ の近くで Taylor 展開し、$\delta\mathbf{a}$ の 1 次の項までとると、$f(x, \mathbf{a})$ は、

$$f(x, \mathbf{a}) = f(x, \mathbf{a_0}) + \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial f(x, \mathbf{a_0})}{\partial a_k} \delta a_k \tag{5}$$

と表される。式 (5) を式 (3) に代入し、δa_k の 2 次以降の項を無視すると、

$$\sum_{k=1}^{m} \alpha_{jk} \delta a_k = \beta_j \quad (j = 1, 2, \cdots, m) \tag{6}$$

という方程式が得られる。ここで、α_{jk}、β_j はそれぞれ、

$$\alpha_{jk} = \sum_{i=1}^{n} w_i \left[\frac{\partial f(x_i, \mathbf{a_0})}{\partial a_j} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a_0})}{\partial a_k} - \{y_i - f(x_i, \mathbf{a_0})\} \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a_0})}{\partial a_j \partial a_k} \right]$$

$$\beta_j = \sum_{i=1}^{n} w_i \{y_i - f(x_i, \mathbf{a_0})\} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a_0})}{\partial a_j}$$

で表され、α_{jk} は**曲率行列 (curvature matrix)** と呼ばれる。ここで再び、データが Gauss 分布からの標本の場合は、$w_i \equiv 1/\sigma_i^2$、データが Poisson 分布からの標本の場合は、$w_i \equiv 1/f(x_i, \mathbf{a_0})$ である。α_{jk} の [ ] 内の第 2 項の $f(x_i, \mathbf{a_0})$ の 2 階微分は、$f(x_i, \mathbf{a_0})$ がパラメータ $\mathbf{a}$ に関して線形の場合は 0 になる。また、第 1 項の 1 階微分に比べて十分小さな値であれば、無視できる。良く合うモデルを選択した場合、第 2 項の 2 階微分の項に掛けられる項 $\{y_i - f(x_i, \mathbf{a_0})\}$ は各点におけるランダムな測定誤差であるべきである。この誤差は符号を持ち、なおかつ、一般に、モデルとは無相関であるべきで、i について和をとったとき、打ち消されるべきである。したがって、そのような場合には、第 2 項を無視して考えることができる。

行列 α_{jk} の逆行列 $(\alpha^{-1})_{jk}$ を計算し、

$$\delta a_j = \sum_{k=1}^{m} (\alpha^{-1})_{jk} \beta_k \quad (j = 1, 2, \cdots, m) \tag{7}$$

から $\delta\mathbf{a}$ を求めると、最適なパラメータ $\mathbf{a}$ が得られる。しかし、あらかじめ与えるパラメータの初期値 $\mathbf{a_0}$ が最適値 $\mathbf{a}$ に近ければ、1 回目の計算でほぼ正しい値が得られるが、そのような初期値をあらかじめ与えることは困難であるので、1 回目の計算で $\mathbf{a}$ が得られたら、それを新しい $\mathbf{a_0}$ とみなして同じ計算を繰り返す。このような反復計算過程で、補正項 $\delta\mathbf{a}$ の値が十分小さくなり、さらに、最小二乗法の場合は、式 (4) の χ^2 を計算し、その値が最小とみなされたとき、最尤法の場合は、式 (2) の $\mathcal{L}$ を計算し、その値が最大とみなされたとき、それぞれの計算を打ち切り、その時点における $\mathbf{a}$ を最適なパラメータの値とする。(3 を参照)

χ^2 および $\mathcal{L}$ を収束させる方法は、**修正 Marquardt 法** [2] を使用する。Marquardt 法とは、初期値を与えた出発点の近くでは、χ^2 の減少、または、$\mathcal{L}$ の増加が最大になるようにパラメータを調整して行列 α_{jk} の対角要素を強調し、収束点に近づいたら、関数の Taylor 展開が正確になることを利用して、式 (7) を用いてパラメータの最適値を決定する方法である。

次に、測定値 (X_i, Y_i) $(i = 1, 2, \cdots, n)$ の X_i と Y_i それぞれに誤差がある一般的な場合には、X_i と Y_i が属するそれぞれの母集団分布によって尤度関数を考える。例えば、X_i と Y_i がそれぞれ Gauss 分布 $N(x_i, \sigma_{x_i}^2)$ と $N(y_i, \sigma_{y_i}^2)$ からの標本であるとすると、尤度関数は、

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{x_i}} \exp\left[-\frac{(X_i - x_i)^2}{2\sigma_{x_i}^2}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{y_i}} \exp\left[-\frac{(Y_i - y_i)^2}{2\sigma_{y_i}^2}\right] \tag{8}$$

で表される。また、X_i と Y_i がそれぞれ Poisson 分布 $P(X_i; x_i)$ と $P(Y_i; y_i)$ からの標本であるとすると、尤度関数は、

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^{n} \frac{x_i^{X_i}}{X_i!} \exp(-x_i) \frac{y_i^{Y_i}}{Y_i!} \exp(-y_i)$$

で表される。ここで、x_i と y_i は、それぞれの母集団分布における母平均、$\sigma_{x_i}^2$ と $\sigma_{y_i}^2$ は分散を表す。

さらに，x_i と y_i の間に，

$$f(x_i, y_i, \mathbf{a}) = 0$$

という制約があると仮定し、Lagrange の未定乗数法を利用して、尤度関数が最大になるような $\mathbf{a}$ を求めることができる [3]。ここで、$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_m)$ $(m < n)$ は関数モデルのパラメータである。

例えば、式 (8) の対数をとり、未定乗数 λ_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$ を導入した尤度関数、

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{n} \left\{ -\frac{(X_i - x_i)^2}{2\sigma_{x_i}^2} - \ln\sigma_{x_i} - \frac{(Y_i - y_i)^2}{2\sigma_{y_i}^2} - \ln\sigma_{y_i} + \lambda_i f_i \right\} - n\ln(2\pi)$$

を x_i、y_i、λ_i、a_j に対して極大にすることを考えると、

$$\sum_{i=1}^{n} w_i \left\{ (X_i - x_i)\frac{\partial f_i}{\partial x_i} + (Y_i - y_i)\frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right\} \frac{\partial f_i}{\partial a_j} = 0 \tag{9}$$

という関係式が得られる。ここで、$f_i \equiv f(x_i, y_i, a_j)$、$w_i = \left\{ \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left(\frac{\partial f_i}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_{y_i}^2 \right\}^{-1}$ である。

いま、真の値 x_i、y_i、a_j に近い値 x_{0i}、y_{0i}、a_{0j} が与えられている場合、

$$x_i = x_{0i} + \delta x_i \tag{10}$$
$$y_i = y_{0i} + \delta y_i \tag{11}$$
$$a_j = a_{0j} - \delta a_j \tag{12}$$

と表すことができる。さらに、f_i を x_{0i}、y_{0i}、a_{0j} のまわりで Taylor 展開すると、

$$f_i = f_{0i} + \frac{\partial f_{0i}}{\partial x_i}\delta x_i + \frac{\partial f_{0i}}{\partial y_i}\delta y_i - \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_k}\delta a_k = 0 \tag{13}$$

が得られる。ここで、$f_{0i} \equiv f(x_{0i}, y_{0i}, a_{0j})$ とおいた。式 (10) と式 (11) を式 (9) に代入し、式 (13) の関係を用いると、

$$\sum_{i=1}^{n} w_{0i} \left\{ f_{0i} + (X_i - x_{0i})\frac{\partial f_{0i}}{\partial x_i} + (Y_i - y_{0i})\frac{\partial f_{0i}}{\partial y_i} \right\} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_j} = \sum_{i=1}^{n} w_{0i} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_j} \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_k}\delta a_k$$

という関係式が得られる。ここで、$w_{0i} = \left\{ \left(\frac{\partial f_{0i}}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left(\frac{\partial f_{0i}}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_{y_i}^2 \right\}^{-1}$ である。

あらためて、

$$\alpha_{jk} \equiv \sum_{i=1}^{n} w_{0i} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_j}\frac{\partial f_{0i}}{\partial a_k}$$
$$\beta_j \equiv \sum_{i=1}^{n} w_{0i} \left\{ f_{0i} + (X_i - x_{0i})\frac{\partial f_{0i}}{\partial x_i} + (Y_i - y_{0i})\frac{\partial f_{0i}}{\partial y_i} \right\} \frac{\partial f_{0i}}{\partial a_j}$$

とおき、

$$\delta a_j = \sum_{k=1}^{m} (\alpha^{-1})_{jk}\beta_k \quad (j = 1, 2, \cdots, m) \tag{14}$$

から δa_j を求めると、式 (12) から最適なパラメータ a_j を得ることができる。

2　パラメータの誤差 [3]

非線形最小 2 乗法を用いた fit の場合、χ^2 は、

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{y_i - f(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i} \right\}^2$$

で表される。これが、

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 0$$

を満すこと、または、式 (3) から、

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{y_i - f(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i^2} \cdot \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_j} = 0$$

が得られる。ここで、$w_i \equiv \frac{1}{\sigma_i^2}$ として、

$$F_j(\mathbf{a}, \mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^{n} w_i \{y_i - f(x_i, \mathbf{a})\} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_j} = 0$$

を定義すると、F_j は、

$$\sum_{k=1}^{m} \frac{\partial F_j(\mathbf{a}, \mathbf{y})}{\partial a_k} da_k + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j(\mathbf{a}, \mathbf{y})}{\partial y_i} dy_i = 0 \tag{15}$$

を満す。ここで、$\mathbf{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)$ である。F_j を a_k で偏微分すると、

$$\frac{\partial F_j(\mathbf{a},\mathbf{y})}{\partial a_k} = -\sum_{i=1}^{n} w_i \left[\frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_k} \cdot \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j} - \{y_i - f(x_i,\mathbf{a})\} \frac{\partial^2 f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j \partial a_k} \right]$$

が得られる。ここで、

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial a_1} & \frac{\partial F_1}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial a_m} \\ \frac{\partial F_2}{\partial a_1} & \frac{\partial F_2}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial a_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_m}{\partial a_1} & \frac{\partial F_m}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial F_m}{\partial a_m} \end{pmatrix}$$

を定義すると、式 (15) の関係式から、

$$da_k = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j}{\partial y_i} dy_i \tag{16}$$

が得られる。さらに、a_k を $y_1, y_2, \cdots, y_n$ の関数とみなすと、

$$da_k = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial a_k}{\partial y_i} dy_i \tag{17}$$

と表すことができる。

式 (16) と式 (17) を比較すると、

$$\frac{\partial a_k}{\partial y_i} = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial F_j}{\partial y_i} = -w_i \sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j}$$

が得られる。したがって、パラメータの誤差を s_{a_k} で表すと、誤差伝播の法則から、

$$s_{a_k}^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial a_k}{\partial y_i} \right)^2 s_i^2 = \sum_{i=1}^{n} w_i \left[\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j} \right]^2$$

が得られる。ここで、$s_i = \sigma_i$ は y_i の誤差である。

次に、最尤法を用いた fit の場合、式 (3) から、

$$F_j(\mathbf{a},\mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i - f(x_i,\mathbf{a})}{f(x_i,\mathbf{a})} \cdot \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j} = 0$$

を定義すると、

$$\frac{\partial F_j}{\partial a_k} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{f(x_i,\mathbf{a})} \left[\frac{y_i}{f(x_i,\mathbf{a})} \cdot \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j} \cdot \frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_k} - \{y_i - f(x_i,\mathbf{a})\} \frac{\partial^2 f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_j \partial a_k} \right]$$

が得られる。F_j は、

$$\sum_{k=1}^{m} \frac{\partial F_j(\mathbf{a},\mathbf{y})}{\partial a_k} da_k + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j(\mathbf{a},\mathbf{y})}{\partial y_i} dy_i = 0$$

を満すので、この関係式から、

$$da_k = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j}{\partial y_i} dy_i \tag{18}$$

が得られる。ここで、

$$D_{jk} = \frac{\partial F_j}{\partial a_k}$$

である。さらに、a_k を $y_1, y_2, \cdots, y_n$ の関数とみなすと、

$$da_k = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial a_k}{\partial y_i} dy_i \tag{19}$$

と表すことができる。

式 (18) と式 (19) を比較すると、

$$\frac{\partial a_k}{\partial y_i} = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial F_j}{\partial y_i} = \frac{1}{f(x_i, \mathbf{a})} \sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_j}$$

が得られる。したがって、パラメータの誤差 s_{a_k} は、誤差伝播の法則から、

$$s_{a_k}^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial a_k}{\partial y_i} \right)^2 s_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{f(x_i, \mathbf{a})} \left\{ \sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_j} \right\}^2$$

で与えられる。ここで、$s_i = \sqrt{f(x_i, \mathbf{a})}$ である。

次に、2 次元の fit の場合も、式 (9) から、

$$F_j(\mathbf{a}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) \equiv \sum_{i=1}^{n} w_i \left\{ f_i + (X_i - x_i) \frac{\partial f_i}{\partial x_i} + (Y_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right\} \frac{\partial f_i}{\partial a_j} = 0$$

を定義すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F_j}{\partial a_k} =& \sum_{i=1}^{n} \left[\left[-2 \times w_i^2 \sigma_{x_i}^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_i} \left\{ f_i + (X_i - x_i) \frac{\partial f_i}{\partial x_i} + (Y_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right\} + w_i (X_i - x_i) \right] \frac{\partial f_i}{\partial a_j} \cdot \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i \partial a_k} \right. \\
&+ \left[-2 \times w_i^2 \sigma_{y_i}^2 \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \left\{ f_i + (X_i - x_i) \frac{\partial f_i}{\partial x_i} + (Y_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right\} + w_i (Y_i - y_i) \right] \frac{\partial f_i}{\partial a_j} \cdot \frac{\partial^2 f_i}{\partial y_i \partial a_k} \\
&+ w_i \frac{\partial f_i}{\partial a_j} \frac{\partial f_i}{\partial a_k} \\
&\left. + w_i \left\{ f_i + (X_i - x_i) \frac{\partial f_i}{\partial x_i} + (Y_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right\} \frac{\partial^2 f_i}{\partial a_j \partial a_k} \right]
\end{aligned}$$

が得られる。ここで、$\mathbf{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$、$\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \cdots, Y_n)$ である。F_j は、

$$\sum_{k=1}^{m} \frac{\partial F_j}{\partial a_k} da_k + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j}{\partial X_i} dX_i + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_j}{\partial Y_i} dY_i = 0$$

を満すので、この関係式から、

$$da_k = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F_j}{\partial X_i} dX_i + \frac{\partial F_j}{\partial Y_i} dY_i \right) \tag{20}$$

が得られる。ここで、

$$D_{jk} = \frac{\partial F_j}{\partial a_k}$$

である。さらに、a_k を X_i と Y_i の関数とみなすと、

$$da_k = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial a_k}{\partial X_i} dX_i + \frac{\partial a_k}{\partial Y_i} dY_i \right) \tag{21}$$

と表すことができる。

式 (20) と式 (21) を比較すると、

$$\frac{\partial a_k}{\partial X_i} = -\sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial F_j}{\partial X_i} = -w_i \frac{\partial f_i}{\partial x_i} \sum_{j=1}^{m} (D^{-1})_{kj} \frac{\partial f_i}{\partial a_j}$$

$$\frac{\partial a_k}{\partial Y_i} = -\sum_{j=1}^{m}(D^{-1})_{kj}\frac{\partial F_j}{\partial Y_i} = -w_i\frac{\partial f_i}{\partial y_i}\sum_{j=1}^{m}(D^{-1})_{kj}\frac{\partial f_i}{\partial a_j}$$

が得られる。したがって、パラメータの誤差 s_{a_k} は、誤差伝播の法則から、

$$s_{a_k}^2 = \sum_{i=1}^{n}\left\{\left(\frac{\partial a_k}{\partial X_i}\right)^2 s_{x_i}^2 + \left(\frac{\partial a_k}{\partial Y_i}\right)^2 s_{y_i}^2\right\}$$

で与えられる。ここで、s_{x_i} は、x_i が Gauss 分布からの標本である場合は σ_{x_i}、Poisson 分布からの標本の場合は $\sqrt{x_i}$ である。s_{y_i} も同様である。

3 反復計算過程における収束の条件

最小 2 乗法の場合、パラメータの反復計算過程で計算される補正項 $\delta\mathbf{a}$ の値と式 (4) から計算される χ^2 の値が次の条件を満した場合、計算を打ち切り、その時点における $\mathbf{a}$ を最適なパラメータの値とする [2]。

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\triangle\chi^2}{1+\chi^2(\mathbf{a}^{(k)})} \leqq \epsilon_{\chi^2} \\ \\ |\delta a_j| \leqq \epsilon_{a_j}\ \ (j=1,2,\cdots,m) \end{array}\right. \tag{22}$$

ここで、$\chi^2(\mathbf{a}^{(k)})$ は k 回目の計算過程で得られたパラメータ $\mathbf{a}$ を使って計算された χ^2 の値、$\triangle\chi^2$ は

$$\triangle\chi^2 = \chi^2(\mathbf{a}^{(k-1)}) - \chi^2(\mathbf{a}^{(k)})$$

である。また、

$$\left\{\begin{array}{l} \epsilon_{\chi^2} = max(\epsilon_M,\ \epsilon_u) \\ \\ \epsilon_{a_j} = max(\epsilon_{\chi^2}s_{a_j},\ \epsilon_M|a_j|) \end{array}\right.$$

である。ここで、デフォルトで、$\epsilon_M = 2.22\times10^{-16}$、$\epsilon_u = 1.0\times10^{-12}$ と設定しているので、$\epsilon_{\chi^2} = 1.0\times10^{-12}$ である。s_{a_j} はパラメータ a_j の誤差の値である。

最尤法の場合は、式 (2) の $\mathcal{L}$ を計算し、χ^2 の代わりに $\mathcal{L}$ に置き換えた上記の条件 (22) を満した場合、計算を打ち切り、その時点における $\mathbf{a}$ を最適なパラメータの値とする。

References

[1] P.R.Bevington, D.K.Robinson, "Data Reduction and Error Analysis for The Physical Sciences, Third Edition", McGraw-Hill, 2003

[2] 中川徹、小柳義夫、「最小二乗法による実験データ解析」、東京大学出版会、1982

[3] 粟谷隆、「データ解析」、学会出版センター、1991