補足 1－1　式(1.7)および(1.8)のパラメタ値の推定

まず、式（1.7）の場合について説明する。

$$SSE = \sum_{i=1}^{N} \{\log \psi_i - (\log k + \beta \log \phi_i)\}^2$$
$$= \sum_{i=1}^{N} \{y_i - (a + \beta x_i)\}^2 \tag{1.7}$$

式（1.7）は、次の近似式

$$y_i \approx a + \beta x_i \tag{1.6}$$

の誤差の 2 乗和である。

いま、

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}、\quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{bmatrix}、\quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a \\ \beta \end{bmatrix}$$

とおくと、近似式（1.6）は次式にまとめることができる。

$$\mathbf{y} \approx \mathbf{X}\mathbf{b} \tag{附 1.1.1}$$

このとき、式（附 1.1.1）における誤差の 2 乗和を最小にするパラメタ $\mathbf{b}$ の値は、次式で与えられる（Hogg et al., 2005）。

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

式（1.8）の場合は、パラメタ θ のために線形回帰分析が使えないので、極値探索法を用いる（附録 E を参照）。ここでは、共役勾配法による極値探索を行うために、以下の偏導関数を用いた。

$$\frac{\partial}{\partial \beta} SSE_1 = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_i [\log \psi_i - \{\log k + \beta \cdot \log(\phi_i - \theta)\}]^2$$
$$= \sum 2[\log \psi_i - \{\log k + \beta \cdot \log(\phi_i - \theta)\}] \times \{-\log(\phi_i - \theta)\}$$

$$= -2\sum\left[\log\psi_i - \{\log k + \beta\cdot\log(\phi_i - \theta)\}\right]\times\log(\phi_i - \theta)$$

$$\frac{\partial}{\partial k}SSE_1 = \sum 2\left[\log\psi_i - \{\log k + \beta\cdot\log(\phi_i - \theta)\}\right]\times\left\{-\frac{1}{k}\right\}$$

$$= -\frac{2}{k}\sum\left[\log\psi_i - \{\log k + \beta\cdot\log(\phi_i - \theta)\}\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}SSE_1 = \sum 2\left[\log\psi_i - \{\log k + \beta\cdot\log(\phi_i - \theta)\}\right]\times\left\{-\frac{\beta\times(-1)}{\phi_i - \theta}\right\}$$

$$= 2\beta\sum\left[\log\psi_i - \{\log k + \beta\cdot\log(\phi_i - \theta)\}\right]/(\phi_i - \theta)$$

ここで、パラメタβ、kおよびθには以下の制約がある。

$$\beta > 0、\quad k > 0、\quad \theta < \phi_0 = \min\{\phi_i\}$$

上の制約条件を満たす範囲で極値探索を行うために、次の変数変換を行う。

$$\beta = \varepsilon + b^2、\quad k = \varepsilon + h^2、\quad \theta = \phi_0 - \varepsilon - t^2$$

ここで、εは十分に小さい正数である。

このとき、変数変換に用いた変数に関する偏導関数は、以下のように与えられる。

$$\frac{\partial}{\partial b}SSE_1 = \left(\frac{\partial}{\partial\beta}SSE_1\right)\cdot\frac{d\beta}{db} = 2b\cdot\frac{\partial}{\partial}SSE_1$$

$$\frac{\partial}{\partial h}SSE_1 = \left(\frac{\partial}{\partial k}SSE_1\right)\cdot\frac{dk}{dh} = 2h\cdot\frac{\partial}{\partial k}SSE_1$$

$$\frac{\partial}{\partial t}SSE_1 = \left(\frac{\partial}{\partial\theta}SSE_1\right)\cdot\frac{d\theta}{dt} = -2t\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}SSE_1$$

上の偏導関数で与えられる勾配を用いた共役勾配法（附録 E 参照）によって極値探索を行うプログラムを、著者のホームページ[1]に用意した。

---

[1] http://www.ikuta.jwu.ac.jp/~yokamoto/books/pm/