## 補足 1－3　式(1.14)および式(1.15)の最小化

式（1.14）

$$SSE=\sum_{i=1}^{N}\left\{\log\phi_{1/2,i}-\left(\log 2^{-1/\beta}+\log\phi_{1,i}\right)\right\}^2 \qquad (1.14)$$

の最小化を考え易くするために、

$$y_i=\log\phi_{1/2,i}\text{、}\quad x_i=\log\phi_{1,i}\text{、}\quad \text{および}\quad a=\log 2^{-1/\beta}$$

とおく。このとき、式（1.14）は次式となる。

$$SSE=\sum_i\left\{y_i-\left(a+x_i\right)\right\}^2$$

$$=\sum_i\left\{\left(y_i-x_i\right)-a\right\}^2$$

上式を最小にするパラメタ $a$ の値が平均値で与えられることはよく知られている。すなわち、

$$a=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-x_i\right)$$

上式により与えられる $a$ の値に対して $\beta$ の値を求める式が、以下のように導かれる。

$$\log 2^{-1/\beta}=a$$

$$\frac{-1}{\beta}\log 2=a$$

$$\beta=-\frac{\log 2}{a}$$

式（1.15）

$$SSE_1=\sum_{i=1}^{N}\left[\log\phi_{1/2,i}-\log\left\{2^{-1/\beta}\phi_{1,i}+\theta\left(1-2^{-1/\beta}\right)\right\}\right]^2 \qquad (1.15)$$

の最小化は、共役勾配法によって行うことができる。式を見やすくするために

$$b=2^{-1/\beta}\text{、}\quad b>0$$

とおくと、式（1.15）は次式となる。

$$SSE_1 = \sum_i \left[\log \phi_{1/2,i} - \log\left\{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)\right\}\right]^2 \qquad \text{（附 1.3.1）}$$

　このとき、勾配を与える偏導関数は次式で与えられる。

$$\frac{\partial SSE_1}{\partial b} = \sum_i 2\left[\log \phi_{1/2,i} - \log\left\{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)\right\}\right] \times \left\{-\frac{\phi_{1,i} - \theta}{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)}\right\}$$

$$= 2\sum_i \left[\log \phi_{1/2,i} - \log\left\{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)\right\}\right] \times \frac{\theta - \phi_{1,i}}{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)}$$

$$\frac{\partial SSE_1}{\partial \theta} = \sum_i 2\left[\log \phi_{1/2,i} - \log\left\{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)\right\}\right] \times \left\{-\frac{1-b}{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)}\right\}$$

$$= 2\sum_i \left[\log \phi_{1/2,i} - \log\left\{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)\right\}\right] \times \frac{b-1}{b\phi_{1,i} + \theta(1-b)}$$

　パラメタ $b$ と $\theta$ には、次式で与えられる制約がある。

$$b > 0\text{、}\qquad \theta < \min\left\{\phi_{1,i}, \phi_{1/2,i}\right\} = \theta_0$$

　上式の制約条件の下で極値探索を行うために、次の変数変換を行う。

$$b = \varepsilon + s^2\text{、}\qquad \theta = \theta_0 - \varepsilon - t^2$$

ここで、$\varepsilon$ は十分に小さい正数である。

　これらの変換変数の偏導関数は次式で与えられる。

$$\frac{\partial SSE_1}{\partial s} = \frac{\partial SSE_1}{\partial b} \cdot \frac{db}{ds} = 2s\frac{\partial SSE_1}{\partial b}$$

$$\frac{\partial SSE_1}{\partial t} = \frac{\partial SSE_1}{\partial \theta} \cdot \frac{d\theta}{dt} = -2t\frac{\partial SSE_1}{\partial \theta}$$