数理解析研究所講究録
第 42 巻 1968 年 37-51

最小自乗法における Algorithm について

富山大文理　田中 專一郎

§1. 序論.

パラメータ $a=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$ を含む函数 $y=y(a,t)$ の $t=t_i$ $(i=1,2,\cdots,m\ ;\ m\geqq n)$ における実験値を y_i とする。いま

$$S(a)=\sum_{i=1}^{m} w(t_i)\,(y(a,t)-y_i)^2$$

の値を最小にする a を求める問題とじよう。こゝに $w(t)$ は $w(t_i)>0$ $(i=1,2,\cdots,m)$ となる函数で weight function と呼ばれる。

さて、初めに $b=(b_1, b_2, b_3)$, $c=(c_1, c_2, c_3)$ を与えたとき、二函数 $y=b_1 e^{-b_2 t}\sin b_3 t$, $y=c_1 e^{-c_2 t}\sin c_3 t$ のグラフの交点を (t_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,m)$ とじよう。いま (t_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,m\ ;\ m\geqq 3)$ と函数の型 $y(a,t)=a_1 e^{-a_2 t}\sin a_3 t$ を与えたとき，$S(a)$ を最小にする a と

して、 $b=(b_1, b_2, b_3)$, $c=(c_1, c_2, c_3)$ などをとることが出来る。 このように $S(a)$ を最小にする a はただ一つとは限らない。 また D を n 次元 Euclid 空間 R^n の有界閉集合とし、D 全体での $S(a)$ の最小値を求めることは特別な場合を除き極めてむずかしい。 この理由でわれわれは local な問題即ち極小問題を扱う。 そのとき

$$f_i(a) = \sqrt{w(t_i)}\,(y(a, t_i) - y_i)$$

とおくことにより、つぎのように一般化出来る。

$$x \in R^n, \quad h \in R^n, \quad f(x) \in R^m \quad (m \geqq n)$$

とし、 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$, $h = (h_1, h_2, \cdots, h_n)$,

$f(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x))$,

$S(x) = |f(x)|^2 \quad \left(\equiv \sum_{i=1}^{m} (f_i(x))^2\right)$

とする。 そのとき (A1), (A2), (A3) を仮定する。

(A1) R^n の領域 D において $f \in C^2(D)$,

(A2) $\operatorname{grad} S(x) = 0$ をみたす $x = \bar{x}$ が D の中に存在する。

(A3) $m \times n$ 行列 $A(x)$, $n \times n$ 行列 $C(x)$ は

(1) $$A(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right) \quad \left(\begin{matrix} i = 1, 2, \cdots, m \\ j = 1, 2, \cdots, n \end{matrix}\right),$$

(2) $$C(x) = \left(\sum_{i=1}^{m} f_i(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right) \quad (j, k = 1, 2, \cdots, n),$$

$\|C(x)\|$ を $C(x)$ の norm とするとき

$$\min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|.$$

この仮定のもとに $\bar{x} \in U \subset D$ を満たす近傍 U をとり，$\min_U S(x)$ となる x を決定する。 この目的のため Jacobi の algorithm および Newton-Jacobi の algorithm を設定した。さきに Newton-Jacobi の algorithm の意味付けを行ったとき $f \in C^3(D)$ を仮定したが，今回は $f \in C^2(D)$ $\underbrace{\text{で同}}_{\text{弱で}}$じ結果が成立することを示す。

§2. 最小自乗法における Algorithm.

Jacobi の algorithm の基礎はつぎの補助定理 1 である。

補助定理 1. "x は固定されたベクトルとする。 $m \times n$ 行列 $A(x)$ の階数が n $(m \geqq n)$ ならば

$$|A(x)h + f(x)|^2$$

の値を最小にする $h = \bar{h}$ は $A^*(x)$ を $A(x)$ の転置行列として連立一次方程式

$$A^*(x)A(x)h = -A^*(x)f(x)$$

を満たす。"

さて，絶対値の十分小さい h に対して

$$f(x+h) \fallingdotseq f(x) + A(x)h$$

が成立つ。ここに x は一応固定されたベクトル，$A(x)$ は $m \times n$ $(m \geqq n)$ の Jacobi 行列

$$A(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right) \quad \left(\begin{matrix} i=1,2,\cdots,m \\ j=1,2,\cdots,n \end{matrix}\right)$$

である。$\bar{x}$ のある近傍で $A(x)$ の階数は n であると仮定しよう。$S(x) = |f(x)|^2$ の最小値を求めるため，適当な初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。$|f(x^{(0)}+h)|$ の最小値をとる h を直接求めることは一般に簡単ではない。そこで $|f(x^{(0)}+h)| \fallingdotseq |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|$ であることと $|f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|^2$ の最小値をとる $h = h^{(0)}$ は補助定理1より

$$A^*(x^{(0)})A(x^{(0)})h^{(0)} = -A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})$$

の根として求まるから，この $h^{(0)}$ をもって $|f(x^{(0)}+h)|^2$ の最小値を与える h の近似と考える。換言すれば $x = x^{(0)} + h^{(0)}$ をもって $|f(x)|^2$ の最小値をとる x の第1近似と考える。この意味から $x^{(1)} = x^{(0)} + h^{(0)}$ とおく。

帰納法により点列 $\{x^{(s)}\}$，$\{h^{(s)}\}$ が得られる。この点列の求め方を Algorithm の形に書けば次のようになる。

Jacobi の Algorithm　適当に初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。

$x^{(0)}$ についての連立一次方程式

$$A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (s=0,1,2,\cdots)$$

により $h^{(s)}$ をきめる。　$x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

この algorithm を最小自乗法における Jacobi の algorithm という。

さて、最小自乗法において　$S(x) = \Sigma(f_i(x))^2$ の値を最小にする x は　$\mathrm{grad}\, S(x) = 0$ を満たす。この方程式

$$g_j(x) = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} f_i(x) = 0 \qquad (j=1,2,\cdots,n)$$

の根を Newton 法で求めるとき、最小自乗法における Newton 法という。　そのとき $g(x)$ の Jacobi 行列の (j,k) 要素は

$$\frac{\partial g_j(x)}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^{m}\left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} + f_i(x)\frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right)$$

であるから $h^{(s)}$ に関する一次方程式は

(3)　$$\left(A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}) + C(x^{(s)})\right)h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

と書かれる。　こゝに $A(x)$, $C(x)$ はそれぞれ (1), (2) によって定義された行列である。　よって最小自乗法における Newton の algorithm は次のようになる。

Newton の Algorithm　初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適

当に選ぶ。 $x^{(s)}$ を既知とし、(3) をみたす $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

こゝで Jacobi と Newton の algorithm を同時に含む algorithm を考える。

Newton-Jacobi の Algorithm

λ は $0 \leqq \lambda \leqq 1$ の定数とする。

$x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適当に選ぶ。

(4) $\quad B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \quad (s = 0, 1, 2, \cdots)$

こゝに

$$B_\lambda(x) = A^*(x)A(x) + (1-\lambda)C(x)$$

この $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

この algorithm を最小自乗法における Newton-Jacobi の algorithm といい、これによって $S(x)$ の最小値をとる x を求める方法を Newton-Jacobi の方法という。

§3. 補助定理.

こゝでは Main Theorem の証明に必要な補助定理を列挙する。§1 での仮定 (A1), (A2), (A3) はこれらの補助定理で断りなしに仮定する。

$$H = \{h \mid |h| = 1,\ h \in R^n\} \quad \text{とおく。}$$

補助定理2. "$\min_H |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|$ ならば $0 \leq \lambda \leqq 1$ の任意の λ に対して

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \|C(\bar{x})\|."$$

証明 C を任意の $n\times n$ 行列とする. ${}^\forall h \in H$ に対して

$$\|C\| \geqq |(Ch, h)|.$$

よって明らかに

$$((\|C\| I + C)h, h) \geqq 0 \quad \text{for } {}^\forall h \in H.$$

一方

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) = (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h})$$

を満たす $\hat{h} \in H$ が存在する。

$$\begin{aligned}
\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) &= (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) \\
&= ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\| I)\hat{h}, \hat{h}) \\
&\qquad - (1-\lambda)((\|C(\bar{x})\| I + C(\bar{x}))\hat{h}, \hat{h}) \\
&\geqq ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\| I)\hat{h}, \hat{h}) \\
&\geqq \min_H (A^*(\bar{x})A(\bar{x})h, h) - \|C(\bar{x})\| + \lambda \|C(\bar{x})\| \\
&> \lambda \|C(\bar{x})\|.
\end{aligned}$$

補助定理3. "任意の正数 ε に対して, 適当な $\bar{x}$ の閉近傍 V_λ を選べば

$$0 \leqq \min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) - \min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h) \leqq \varepsilon,$$

$$0 \leqq \max_{V_\lambda} \|C(x)\| - \|C(\bar{x})\| \leqq \varepsilon."$$

この補助定理の証明は $B_\lambda(x)$, $C(x)$ の要素が一様で連続であることから殆ど明らかである。

補助定理4. "$\bar{x}$ の δ_λ 閉近傍 V_λ と正数 μ_λ を適当に選べば

$$\min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h) > \lambda \max_{V_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda."$$

証明. 補助定理2より

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \max \|C(\bar{x})\| + \mu_\lambda$$

を満たす μ_λ が存在する。この両辺の差を 3ε とおき, 補助定理3を用いる.

註. 補助定理2の証明をみれば

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) - \lambda \|C(\bar{x})\|$$

$$\geqq \min_H |A(\bar{x})h|^2 - \|C(\bar{x})\|$$

であるから μ_λ は λ に無関係に選ぶことが出来る。

補助定理5. "任意の正数 ε に対して, $\bar{x}$ の $\delta_{\lambda 1}$ 近傍 $V_{\lambda 1}$ をとれば任意の $x^{(0)} \in V_{\lambda 1}$ に対して $|h^{(0)}| \leqq \varepsilon$."

証明 $A^*(\bar{x}) f(\bar{x}) = 0$ かつ $|A^*(x) f(x)|$ は x について連続であるから $|x^{(0)} - \bar{x}| \leqq \delta_{\lambda 1}$ の中の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|A^*(x^{(0)}) f(x^{(0)})| / \mu_\lambda \leqq \varepsilon$$

が成立つ。ところが $h^{(0)} \neq 0$ として $x^{(0)} \in \delta_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$\mu_\lambda |h^{(0)}|^2 \leqq (B_\lambda(x^{(0)})h^{(0)}, h^{(0)})$$
$$= -(A^*(x^{(0)})f(x^{(0)}), h^{(0)})$$
$$\leqq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})|\,|h^{(0)}|$$
$$\therefore \quad |h^{(0)}| \leqq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})| / \mu_\lambda \leqq \varepsilon.$$

注 μ_λはλに無関係に選べるから V_λは λに無関係に選べる。

§4. Main Theorem.

定理を述べる前に そこで用いられる記号について述べる

$$M(x) = \min_H |A(x)h|^2, \quad M = \min_{V \times H} |A(x)h|^2,$$

$$K_\lambda = (\max_{V_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda)/M_\lambda < 1.$$

Main Theorem. (A1) R^nの領域 Dで $f(x) \in C^2(D)$.

(A2) $\operatorname{grad} S(x) = 0$ を満たす $x = \bar{x}$ がDの中に存在する.

(A3) $\|C(\bar{x})\| < \min_H |A(\bar{x})h|^2$

仮定(A1), (A2), (A3) のもとに適当な正数$\delta_{0\lambda}$を選べば $|x^{(0)} - \bar{x}| \leqq \delta_{0\lambda}$ を満たす初期値 $x^{(0)}$と Newton-Jacobi の algorithm (4) によってきまる系列$\{x^{(s)}\}$, $\{h^{(s)}\}$に対して (I), (II), (III) および (IV) が成立つ。

(I) $\bar{x}$の適当な近傍をとると, $x = \bar{x}$ はその近傍で $S(x)$の最小値を与える。

(II) $|x^{(s+1)} - \bar{x}| \leqq K_\lambda |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s = 0, 1, 2, \cdots),$

(III) $\quad |h^{(s+1)}| \leqq K_\lambda |h^{(s)}| \quad (s=0,1,2,\cdots)$

(IV) $\quad S(x^{(s+1)}) \leqq S(x^{(s)}) \quad (s=0,1,2,\cdots)$"

(I)の証明. $\operatorname{grad} S(\bar{x})=0$ であるから補助定理2の直接の結果である。即ち補助定理2で $\lambda=0$ とすればよい。

(II)の証明. $p^{(s)} = x^{(s)} - \bar{x} \quad (s=0,1,2,\cdots)$ とおく。$h^{(s)} = x^{(s+1)} - x^{(s)} = p^{(s+1)} - p^{(s)}$ であるから(4)の中に代入

(5) $\quad B_\lambda(x^{(s)})(p^{(s+1)} - p^{(s)}) = -A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$.

故に

$$B_\lambda(x^{(s)}) p^{(s+1)} = B_\lambda(x^{(s)}) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

をうる。$x^{(s)} = \bar{x} + p^{(s)}$ に注意して

(6) $\quad g_\lambda(p^{(s)}) = (B_\lambda(x^{(s)}) + \lambda C(\bar{x})) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$

とおく。補助定理4の μ_λ に対して適当な正数 δ_λ をとれば $|x^{(s)} - \bar{x}| \leqq \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_\lambda(p^{(s)})| \leqq \mu_\lambda |p^{(s)}|$$

が成立つことを示す。そのため(6)を成分について書けば

$g_j(p^{(s)})$

$$= \sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}\Big(\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j}\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_k}$$

$$+(1-\lambda)f_i(\bar{x}+p^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}+\lambda f_i(\bar{x})\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k}\Big)p_k^{(s)}$$

$$-\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j}f_i(\bar{x}+p^{(s)})$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}f_i(\bar{x})\Big\{\Big(\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\theta_j p^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}\Big)$$

$$+\lambda\Big(\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}\Big)\Big\}p_k^{(s)}+O(p^2)$$

$$(0<\theta_j<1)$$

$f\in C^2(D)$ であるから適当な正数 δ_λ をとれば $|x^{(s)}-\bar{x}|=|p^{(s)}|\leqq\delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_\lambda(p^{(s)})|\leqq\mu_\lambda|p^{(s)}|.$$

よって(4)と(6)を用いて

$$B_\lambda(x^{(s)})p^{(s+1)}=-\lambda C(\bar{x})p^{(s)}+g_\lambda(p^{(s)})$$

と書けば $|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|p^{(s+1)}|\leqq\frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+\mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s)})}|p^{(s)}|$$

をうる。

$$\frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+\mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s)})}\leqq\frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+\mu_\lambda}{M_\lambda}\leqq K_\lambda<1$$

より初期値 $x^{(0)}$ を $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_\lambda$ の範囲にとれば

$$|\rho^{(1)}| \leqq K_\lambda |\rho^{(0)}|,$$

帰納法を用いれば

$$|x^{(s+1)} - \bar{x}| \leqq K_\lambda |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s=0,1,2,\cdots).$$

(II)の証明　$h^{(s+1)}=0$ の場合(II)は明らかに成立つから $h^{(s+1)} \neq 0$ とする。$|h^{(s)}|$, $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く。

(4)より

$$(*) \quad -\left(A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)}) + (1-\lambda)C(x^{(s+1)})\right)h^{(s+1)} = A^*(x^{(s+1)})f(x^{(s+1)})$$

が成立す。この右辺を成分について計算すれば

$$\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s+1)})$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x^{(s)}+h^{(s)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s)}+h^{(s)})$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)} \right)$$

$$\cdot \left(f_i(x^{(s)}) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_k^{(s)} + o(h^2) \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s)}) + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} + f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_k^{(s)} \right)$$

$$+ o(h^2)$$

$$= \lambda \sum_{k=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{m} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_k^{(s)} + g_j(x^{(s)}, h^{(s)})$$

ここに $g_j(x^{(s)}; h^{(s)})$ は

$$g_j(x^{(s)}; h^{(s)}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} f_i(x^{(s)})\left\{\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k}\right\} h_k^{(s)}$$
$$+o(h^2)$$

$f \in C^2(D)$ であるから，適当な正数 α をとれば

$x^{(s)} \in D$, $|h^{(s)}| \leqq \alpha$ に対して

$$|g(x^{(s)}; h^{(s)})| \leqq \mu_\lambda |h^{(s)}|.$$

が成立つ　そして（＊）は

(7)　$$B_\lambda(x^{(s+1)})h^{(s+1)} = \lambda C(x^{(s)})h^{(s)} + g(x^{(s)}; h^{(s)}).$$

$h^{(s+1)} \neq 0$ であるから (7) と $h^{(s+1)}$ との内積を考えれば

$$(B_\lambda(x^{(s+1)})h^{(s+1)}, h^{(s+1)}) = -\lambda(C(x^{(s+1)})h^{(s)}, h^{(s+1)})$$
$$+(g(x^{(s)}; h^{(s)}), h^{(s+1)})$$

そして

$$M_\lambda(x) = \min_{H}(B_\lambda(x)h, h)$$

とおけば　$h^{(s+1)} \neq 0$ より　$|h^{(s)}| \leqq \alpha$ のときに

(8)　$$|h^{(s+1)}| \leqq \frac{\lambda \| C(x^{(s)})\| + \mu_\lambda}{M_\lambda(x^{(s+1)})} |h^{(s)}|$$

が成立つ。　$M_\lambda = \min_{D\times H}(B_\lambda(x)h, h)$ とおけば

$M_\lambda \leqq M_\lambda(x^{(s+1)})$ であるから

(9)　$$|h^{(s+1)}| \leqq (\| C(x^{(s)})\| + \mu_\lambda)/M_\lambda \cdot |h^{(s)}|.$$

（8）および（9）は $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式関係である。つぎに $\{h^{(s)}\}$ が $|h^{(s)}|$ の意味で単調に減少して0に近づくことを示すため帰納法を用いる。補助定理5より適当に δ_1 を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_2$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|h^{(0)}|\leqq\alpha$$

が成立つ。よって $h^{(0)}$ は（　）の範囲にある。従って

$$|h^{(1)}|\leqq K_\lambda|h^{(0)}| \qquad (K<1)$$

従って $|h^{(1)}|\leqq\alpha$，帰納法により

$$|h^{(s+1)}|\leqq K_\lambda|h^{(s)}| \qquad (s=0,1,2,\cdots)。$$

(10) の証明

$$S(x^{(s+1)})-S(x^{(s)})=\sum_{i=1}^{m}\left\{\left(f_i(x^{(s)}+h^{(s)})\right)^2-f_i(x^{(s)})^2\right\}$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left[\left(f_i(x^{(s)})+\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}h_j+\frac{1}{2}\sum_{j,k}\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}h_j^{(s)}h_k^{(s)}\right)^2-\left(f_i(x^{(s)})\right)^2\right]$$

$$=2\sum_{i,j}f_i(x^{(s)})\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}h_j^{(s)}+\sum_{i,j,k}f_i(x^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}h_j^{(s)}h_k^{(s)}$$

$$+\sum_{i,j,k}\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k}h_j^{(s)}h_k^{(s)}$$

$$=\lambda\left(C(x^{(s)})h^{(s)},h^{(s)}\right)-\left(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)},h^{(s)}\right)$$

$$+\sum_{i,j,k} f_i(x^{(s)})\left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j\,\partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\,\partial x_k}\right)h_j^{(s)}h_k^{(s)}$$

$f\in C^2(D)$ であるから適当な正数 $\delta_2,\ \alpha_2$ を選べば

$$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_2,\qquad |h^{(s)}|\leqq\alpha_2$$

における $x^{(s)},\ h^{(s)}$ に対して

$$\left|\sum_{i,j,k} f_i(x^{(s)})\left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)}+\theta h^{(s)})}{\partial x_j\,\partial x_k}-\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\,\partial x_k}\right)h_j^{(s)}h_k^{(s)}\right|\leqq\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

さらに $\delta_3(\leqq\delta_2)$ を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_3$ の $x^{(0)}$ に対して $|h^{(0)}|\leqq\alpha_2$ よって $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_3$ を $x^{(0)}$ の初期値として選ぶとき $|\rho^{(s)}|=|x^{(s)}-\bar{x}|$, $|h^{(s)}|$ の単調減少性から

$$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_3,\qquad |h^{(s)}|\leqq\alpha_2$$

またこの範囲の $x^{(s)},\ h^{(s)}$ に対して

$$S(x^{(s+1)})-S(x^{(s)})=-(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)},h^{(s)})+\lambda(C(x^{(s)})h^{(s)},h^{(s)})+\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

である。δ_3 を補助定理4の ε_λ より小さく選べば、補助定理4を用いて

$$S(x^{(s+1)})\leqq S(x^{(s)})\qquad(s=0,1,2,\dots)$$

が証明される。