情報量規準 AIC を用いて中間表現式を 自己選択する改良形 GMDH[†]

近 藤 正*・田 村 坦 之*

Revised GMDH Algorithm of Self-Selecting Optimal Intermediate
Polynomials Using AIC

Tadashi KONDO* and Hiroyuki TAMURA*

In this paper, a revised GMDH (Group Method of Data Handling) algorithm, which automatically selects optimal intermediate polynomials instead of partial polynomials in each selection layer, is developed. In the previous GMDH algorithms, the partial polynomials, in which the intermediate variables are the input variables in each selection layer, have been estimated and accumulated in the multilayered structure. So, in general, it is difficult to identify exactly the physically meaningful structure between the input and the output variables. The revised GMDH algorithm in this paper generates optimal intermediate polynomials in each selection layer, which express the direct relationship between the input and the output variables, so as to minimize the Akaike's Information Criterion (AIC) evaluated by using all the data. Therefore, the physically meaningful structure can be identified when the characteristics of the system are well reflected in the data. The revised GMDH algorithm is applied to the input-output data observed in a simple kinematic system, and we try to discover the Newton's second law. The result obtained is compared with that obtained by the previous GMDH algorithm of using partial polynomials.

1. ま え が き

近年, GMDH は, 複雑な構造をもった非線形システムを対象にして, その入出力データを発見的自己組織化の原理に基づいて解析し, モデリングを行う方法論として各界から注目を浴びている. しかし, これまでに提案されてきた GMDH^{(1)~(5)} では, 各選択層にお

いて中間変数を入力変数にした部分表現式を構成して, これらを多層に積み重ねて完全表現式を構成している. その結果, システムの入出力変数間に存在する物理的意味を明確に表現した多項式の構造を正確に把握することは, 一般的に困難であった. しかし, 各選択層において, 部分表現式のかわりに, もとの入力変数の一部と出力変数の間の直接的な関係を表わす中間表現式を構成し, これらを多層に積み重ねて完全表現式を構成することによって, ある程度の可能性を見出すことができる.

本論文では, 部分表現式のかわりに, 各選択層で中間表現式を数多く構成し, 各中間表現式に対してすべてのデータを用いて情報量規準 AIC を計算し, この値を最小にする中間表現式を自己選択する改良形 GMDH を提案する. つぎに, このアルゴリズムを簡単な力学系における入出力データに適用し, ニュートンの第2法則を見つけ, 従来の部分表現式を自己選択する GMDH⁽⁵⁾によって得られた結果と比較することにより, 中間表現式を自己選択する改良形 GMDH の有効性を確かめる.

2. AIC を用いて部分表現式を自己選択する GMDH

重回帰分析において変数選択を行うときに, 変数選択の評価規準として予測平方和 PSS⁽⁶⁾または赤池氏の情報量規準 AIC⁽⁷⁾の最小化が良く用いられる. AIC は

$$AIC = -2 (\text{最大対数尤度}) \\ + 2 (\text{未知パラメータの数})$$

によって定義されていて, 第1項はモデルのデータに対するあてはまりの良さを表わし, 第2項はパラメータの増加に対するペナルティを表わしている.

いま N 組の入出力データに対して, k 変数の重回帰モデル

[†] 第3回システムシンポジウムで発表 (昭 52・7)

* 大阪大学工学部 吹田市大字山田上

* Faculty of Engineering, Osaka University, Suita
(Received June 15, 1978)

Generators of the optimal partial polynomials

I : Self-selection of intermediate variables

Fig. 1 Block diagram of the revised GMDH using partial polynomials

$$\phi = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + \varepsilon \quad (1)$$

を仮定するものとする。ただし、 $x_i (i=1, 2, \dots, k)$ は入力変数、 ϕ は出力変数、 ε は平均 0 分散 σ^2 の正規分布に従う互いに独立な残差項を表わす。このとき AIC は

$$AIC_k = N \log_e S_k^2 + 2(k+1) + C \quad (2. a)$$

となる。ただし

$$S_k^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (\phi_\alpha - \hat{\phi}_\alpha)^2 \quad (2. b)$$

$$\hat{\phi}_\alpha = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_{i\alpha} \quad (2. c)$$

ここで、 ϕ_α は α 番目のデータの出力値、 $\hat{\phi}_\alpha$ は N 組のすべてのデータを用いて得られる重回帰式 (2. c) から計算される回帰推定値、 k は変数の個数、 C は k に無関係な定数、 S_k^2 は (2. b) 式から計算される残差の 2 乗平均を表わす。

PSS または AIC による変数選択の考え方を、Ivakhnenko が提案した基本的 GMDH に適用すると、原データをトレーニングデータとチェックングデータに分割することなく、すべてのデータを用いてモデルの予測誤差を評価し、これをできるだけ小さくするようにモデルの構造とパラメータを決定する GMDH のアルゴリズムを構成することができる⁵⁾。その結果、従来の GMDH にみられる原データの分割方法の違いによるモデル構造の差異の発生、トレーニングデータとチェックングデータに対するあてはまりの不均一性などを防止することができ、原データに含まれているシステム構造に関するすべての情報を有効に使用することができる。さらに、この GMDH のアルゴリズム

では、部分表現式を構成する際に最適な部分表現式を自己選択するため、基本的 GMDH と比較して、複雑なシステムの特徴を簡単なモデルによって正確に表わす完全表現式を構成することができるという性質をもっている。この GMDH のブロック図を Fig. 1 に示す。

3. AIC を用いて中間表現式を自己選択する GMDH

ここでは、部分表現式を構成するかわりに、各選択層においてもとの入力変数 x と出力変数 ϕ との間の直接的な関係を表わす中間表現式を構成し、この中間表現式を多層に積み重ねて完全表現式を構成する GMDH のアルゴリズムを提案する。このアルゴリズムでは、AIC を、各選択層における最適な中間表現式の自己選択と、自己選択された中間表現式の評価に用いる。そこでは、原データの分割を行わずにすべてのデータを用いて予測誤差を評価し、これを最小にする中間表現式の構造とパラメータを見つけ出している。すなわち、中間表現式を構成する際に AIC に基づく変数の逐次選択⁶⁾を行い、不要な変数を取り除いた中間表現式を自己選択する。ここで、AIC を、中間表現式の変数選択の規準に用いる意義は、より少ない変数でより良いモデルを作成することによって、AIC を重回帰式の変数選択の規準に用いることと同等である。この GMDH のブロック図を Fig. 2 に示す。ここで、 m は入力変数 x の個数、 m_1 は最適な中間表現式の選択個数を示す。また、各選択層において自己選択する中間表現式の最大項数を L_1 項としておく。以下に、中間表現式を用いた GMDH のアルゴリズムを示す。

[I] 第 1 層におけるアルゴリズム

第 1 層では、2 変数の p 次式

$$\phi = a_0 + \sum_{i=1}^2 a_i x_i + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 a_{i_1 i_2} x_{i_1} x_{i_2} + \dots$$

I : Self-selection of the optimal intermediate polynomials

G1, G2, G3 : Generators of the optimal intermediate polynomials

Fig. 2 Block diagram of the revised GMDH using intermediate polynomials

$$+ \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_2=1}^2 \cdots \sum_{i_p=1}^2 a_{i_1 i_2 \cdots i_p} x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_p} \quad (3)$$

に対し AIC を用いた変数の逐次選択法を適用して最適な中間表現式を自己選択する。ただし、(3)式は L 項から構成されているものとする。変数の逐次選択法としては変数増減法⁶⁾を用いる。

まず、(3)式に対応した正規方程式

$$(X^T X)A = X^T \Phi \quad (4)$$

から、つぎの行列

$$\begin{bmatrix} X^T X & X^T \Phi & I \\ \Phi^T X & \Phi^T \Phi & 0^T \end{bmatrix} \quad (5)$$

を作る。ただし、 $A = (a_0, a_1, \dots, a_{L-1})^T$ 、行列(5)の最下行は残差平方和 RSS を計算するためにつけたものである。つぎに、行列(5)に Gauss-Jordan の消去法を適用して、第1列目の非対角要素を消去する。続いて、変数増減法を適用して最適な説明変数の組合せをもつ中間表現式を見つけ出す。これはつぎのようにして行う。(3)式の第 l 項目の変数を中間表現式の中に取り込む場合には、行列(5)に、Gauss-Jordan の消去法を適用し、第 l 列目の非対角要素を消去する。逆に第 l 項目の変数を中間表現式から取り除く場合には、第 $(L+1)$ 列目の非対角要素を Gauss-Jordan の消去法を用いて消去する。これらの操作を AIC の値を最も小さくする変数に対して交互に繰り返し、有用な変数を逐次中間表現式の中に取り込む。取り込まれた変数が (L_1-1) 個になった場合、あるいは、さらに変数を取り込んでも AIC の値が減少しなくなった場合にこの操作を打ち切る。このようにして、AIC の値を最小にする変数の組合せを選択し、最適な中間表現式を構成する。このアルゴリズムを中間表現式の発生器 G1 と呼ぶ。つぎに、構成された mC_2 個の中間表現式の中から AIC の値の小さいものを m_1 個選択して第2層の計算に移る。

[II] 第2層におけるアルゴリズム

第2層においては、2種類の組合せを行う。

(i) 第1層で自己選択した中間表現式どうしの組合せ

第1層で自己選択した i 番目の中間表現式を

$$\phi = f_i^{(1)}(x), \quad (i=1, 2, \dots, m_1) \quad (6)$$

で表わす。ただし、 x は入力変数を表わし、(6)式は $K_i^{(1)}$ 個の変数によって構成されているものとする ($K_i^{(1)} \leq L_1-1$)。 $f_i^{(1)}$ と $f_j^{(1)}$ の組合せを行う。 $f_i^{(1)}$ と $f_j^{(1)}$ に含まれているすべての変数によって構成される式を

$$\phi = f_i^{(1)}(x) + f_j^{(1)}(x) \quad (7)$$

で表わす。(7)式に対応した正規方程式

$$\begin{aligned} & [X_i^{(1)} : X_j^{(1)}]^T [X_i^{(1)} : X_j^{(1)}] A \\ & = [X_i^{(1)} : X_j^{(1)}]^T \Phi \end{aligned} \quad (8)$$

からつぎの行列

$$\begin{bmatrix} X_i^{(1)T} X_i^{(1)} & X_i^{(1)T} X_j^{(1)} & X_i^{(1)T} \Phi & I & 0 \\ X_j^{(1)T} X_i^{(1)} & X_j^{(1)T} X_j^{(1)} & X_j^{(1)T} \Phi & 0 & I \\ \Phi^T X_i^{(1)} & \Phi^T X_j^{(1)} & \Phi^T \Phi & 0^T & 0^T \end{bmatrix} \quad (9.a)$$

を作る。ただし、 $A = (a_0, a_1, \dots, a_{K_i^{(1)}+K_j^{(1)}+1})^T$ である。行列(9.a)の第 $(K_i^{(1)}+1)$ 列までの非対角要素を消去した場合を考えると行列(9.a)は、

$$\begin{bmatrix} I & M_{12} & M_{13} & M_{14} & 0 \\ 0 & M_{22} & M_{23} & M_{24} & I \\ 0^T & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0^T \end{bmatrix} \quad (9.b)$$

となる。ここで、 M_{13} , M_{14} , M_{33} , M_{34} は第1層の計算においてすでに求まっており、

$$M_{13} = (X_i^{(1)T} X_i^{(1)})^{-1} X_i^{(1)T} \Phi \quad (10)$$

$$M_{14} = (X_i^{(1)T} X_i^{(1)})^{-1} \quad (11)$$

$$M_{33} = \Phi^T \Phi - \Phi^T X_i^{(1)} (X_i^{(1)T} X_i^{(1)})^{-1} X_i^{(1)T} \Phi \quad (12)$$

$$M_{34} = -\Phi^T X_i^{(1)} (X_i^{(1)T} X_i^{(1)})^{-1} \quad (13)$$

で与えられる。残りの部分は次式によって計算できる。

$$M_{12} = M_{14} (X_i^{(1)T} X_j^{(1)}) \quad (14)$$

$$M_{22} = X_j^{(1)T} X_j^{(1)} - (X_j^{(1)T} X_i^{(1)}) M_{12} \quad (15)$$

$$M_{32} = \Phi^T X_j^{(1)} - (\Phi^T X_i^{(1)}) M_{12} \quad (16)$$

$$M_{23} = X_j^{(1)T} \Phi - (X_j^{(1)T} X_i^{(1)}) M_{13} \quad (17)$$

$$M_{24} = -M_{12}^T \quad (18)$$

以上により行列(9.b)は比較的少ない計算量で求まる。つぎに、行列(9.b)に対してアルゴリズム[II]に示した AIC を用いた変数増減法を適用し、最適な中間表現式の自己選択を行う。ここで、中間表現式に含まれる項数が L_1 項に達した場合、つぎの操作を行いさらに AIC の値を減少させる。まず、 (L_1-1) 個の変数の中から AIC の値の増加量が最も小さい変数を中間表現式から取り除く。つぎに、中間表現式の中に含まれていない変数の中から AIC の減少量が最も大きい変数を中間表現式の中に取り込む。この操作を交互に繰り返す。中間表現式から取り除いた変数がすぐに中間表現式の中に取り込まれる場合、変数の逐次選択を打ち切り、その結果得られた中間表現式を最適な中間表現式として用いる。このアルゴリズムを中間表現式の発生器 G2 と呼ぶ。構成された $m_1 C_2$ 個の中間表現式の中から AIC の値の小さいものを m_1 個選択してつぎの計算に移る。

(ii) 中間表現式と入力変数との組合せ

(i) で自己選択した i 番目の中間表現式を、

$$\hat{\phi} = f_i^{(2)}(x), (i=1, 2, \dots, m_1) \quad (19)$$

で表わす。ただし、 x は入力変数を表わし、(19)式は $K_i^{(2)}$ 個の変数によって構成されているものとする ($K_i^{(1)} \leq L_1 - 1$)。入力変数 $x_j (j=1, 2, \dots, m)$ と $f_i^{(2)}$ との組合せを行う。 $f_i^{(2)}$ と $x_j \cdot f_i^{(2)}$ に含まれているすべての変数によって構成される式を、

$$\hat{\phi} = f_i^{(2)}(x) + x_j \cdot f_i^{(2)}(x), (j=1, 2, \dots, m) \quad (20)$$

で表わす。ただし、 $x_j \cdot f_i^{(2)}$ には ($K_i^{(2)} + 1$) 個の変数が含まれている。(20)式に対応した正規方程式

$$\begin{aligned} [X_i^{(2)} : X_{ji}^{(2)}]^T [X_i^{(2)} : X_{ji}^{(2)}] A \\ = [X_i^{(2)} : X_{ji}^{(2)}]^T \Phi \end{aligned} \quad (21)$$

からつぎの行列

$$\begin{bmatrix} X_i^{(2)T} X_i^{(2)} & X_i^{(2)T} X_{ji}^{(2)} & X_i^{(2)T} \Phi & I & 0 \\ X_{ji}^{(2)T} X_i^{(2)} & X_{ji}^{(2)T} X_{ji}^{(2)} & X_{ji}^{(2)T} \Phi & 0 & I \\ \Phi^T X_i^{(2)} & \Phi^T X_{ji}^{(2)} & \Phi^T \Phi & 0^T & 0^T \end{bmatrix} \quad (22)$$

を作る。ただし、 $A = (a_0, a_1, \dots, a_{2K_i^{(2)}+1})^T$ である。

この行列に対して、(i)で行ったのと同じ操作を施し、最適な中間表現式を自己選択する。このアルゴリズムを中間表現式の発生器 G3 と呼ぶ。

つぎに、自己選択された ($m_1 \times m$) 個の中間表現式の中から AIC の値の小さいものを m_1 個選択し、第3層の計算に移る。

第2層では、まず、 $f_i^{(1)}$ と $f_j^{(1)}$ との線形結合により両方に含まれる変数の中から有用な変数を選び出し、つぎに、すべての入力変数 $x_j (j=1, 2, \dots, m)$ と $f_i^{(2)} (i=1, 2, \dots, m_1)$ とを組み合わせることにより、徐々に表現式を複雑にしている。これ以外に、 $f_i^{(1)}$ と $f_j^{(1)}$ との非線形結合 (たとえば、2変数の2次多項式のような結合) を直接行うことも考えられるが、中間表現式を自己選択する際に考慮しなければならない変数の数が一度に増加し、事実上計算が不可能になる。また、中間表現式を一度に複雑化するよりも、各選択層で変数の逐次選択を行いながら徐々に複雑化するほうがより正確な同定ができるものと思われる。

【Ⅲ】第3, 4, ... 層におけるアルゴリズム

第3, 4, ... 層では第2層と同じ操作を繰り返す。ただし、多層構造の層の積み重ねの終了はつぎのような場合に行う。

(a) AIC の値が非常に小さくなり、層を通過させても AIC の値が減少しない中間表現式が得られた場合

(b) AIC の値はそれほど小さくないが、 m_1 個の中間表現式の構造が前層の中間表現式の構造とまったく同じになった場合

(a)によって層の積み重ねを終了した場合には、ノ

イズの影響を受けることなく、入出力変数間に存在する非線形な関係をほぼ完全な形で抽出できたことを意味している。このときには、入出力変数間に存在する物理的な関係をそのまま抽出できた可能性が大きい。

(b)によって終了した場合には、得られた入出力関係は非物理モデルとしての意味しかもたない。多層構造の層の積み重ねを終了すると最終層に残った中間表現式をシステムの完全表現式として用いる。

以上のアルゴリズム【Ⅰ】、【Ⅱ】、【Ⅲ】によって、原データの分割を行わず、すべてのデータを用いて情報量規準 AIC を計算し、この値を最小にするように、各選択層で中間表現式を自己選択する改良形 GMDH を構成することができる。

この GMDH のアルゴリズムの中で用いられるパラメータは、

p : 第1層の中間表現式の最大次数

L_1 : 中間表現式の最大項数

m_1 : 各選択層での中間表現式の選択個数

であるが、これらの値はヒューリスティックに設定するのではなく、計算機の容量を考慮したうえでなるべく大きな値にとることが望ましい。改良形 GMDH を実際問題に適用する場合、各入出力変数に大きな測定誤差を含むと、同定されたモデルの構造あるいは推定されたパラメータの値が真の構造あるいはパラメータ値から大幅にずれる可能性がある。したがって、同定されたモデルの構造を物理的知識に基づいてよく吟味しておく必要があり、また、パラメータ値については、統計的知識に基づいてその信頼区間を評価しておく必要がある。同定されたモデルに含まれているパラメータの推定値と、その信頼区間の幅を比較することにより真のパラメータ値の存在範囲を知ることができ、モデル構造を物理的知識に基づいて吟味する場合に有益な情報を与える。ここで、真のパラメータ値の存在範囲に0を含む場合、その項の有効性を再検討する必要がある。さらに、パラメータ値の信頼区間が非常に大きくなる場合、モデリングに用いた入力変数およびデータなどの妥当性を再検討する必要がある。推定されたパラメータ値の $100(1-\alpha)\%$ 信頼区間は、つぎのように表わされる⁶⁾。

$$b_i: \hat{b}_i \pm t(N-p-1; \alpha) \sqrt{s^{ii} V_e} \quad (23. a)$$

$$V_e = S_e / (N-p-1) \quad (23. b)$$

ただし、 V_e は残差平方和 (S_e) から計算される誤差分散の不偏推定値、 N はデータ数、 p は変数の個数、 s^{ii} は $(X^T X)^{-1}$ の (i, i) 要素、 $t(N-p-1; \alpha)$ は自由度 $(N-p-1)$ の t 分布の $100\alpha\%$ 点を表わす。

Table 1 Observed data ($m=9$)

t (sec)	0	1	2	3	4	5	6	7
$F(t)$ (gr. cm/sec ²)	2.90	2.08	1.03	0.01	0.95	1.94	2.99	2.00
$x(t)$ (cm)	0.00	0.10	0.59	1.24	1.88	2.65	3.52	4.63
$v(t)$ (cm/sec)	0.00	0.38	0.43	0.55	0.67	0.74	0.97	1.29

4. 改良形 GMDH による物理法則の導出

質量 m (gr.) の物体に、力 F (gr.cm/sec²) を加えて、 t 秒後に進んだ距離 x と速度 v を測定するものとする。物体は、 $m=3, 5, 7, 9$ gr. の4種類を用いている。測定は1秒ごとに8回行う。力 F は時間によって変化させる。ただし、接触面はなめらかな場合を考える。このような実験を行うと、たとえば $m=9$ に対しては Table 1 に示す測定データが得られる。ただし、 $F(t)$, $x(t)$, $v(t)$ の各測定データには、測定誤差として平均値0, 標準偏差0.05の正規性白色雑音を含むものと仮定している。これらのデータに改良形GMDHを適用し変数間に存在する関係を見つけ出す。GMDHの出力変数としては、 $x(k+1)$, $v(k+1)$ の2変数を選び、入力変数としては、 $x_1=m$, $x_2=1/m$, $x_3=F(k)$, $x_4=1/F(k)$, $x_5=x(k)$, $x_6=1/x(k)$, $x_7=v(k)$, $x_8=1/v(k)$ の8変数を選ぶ。

部分表現式を用いる GMDH による数値実験結果：

・中間変数

AIC の値の小さい変数を8個選択する。

・補間点

$m=3, 5, 7, 9$ gr. のデータを用いる。

・同定されたモデル

$x(k+1)$ を出力変数とした場合、通過層は4層であった。最終層に残ったモデルの一例を示す。

$$\begin{aligned} z_1 &= 0.017 + 1.081y_1 - 0.087y_8 \\ y_1 &= 0.146 + 1.098x_7 + 0.952x_5 \\ y_8 &= 0.042 + 4.259x_7 - 12.108x_7x_2 + 1.065x_2^2 \end{aligned} \quad (24)$$

$v(k+1)$ を出力変数とした場合、通過層は5層であった。最終層に残ったモデルの一例を示す。

$$\begin{aligned} z_1 &= -0.014 + 0.589y_1 + 0.423y_3 \\ y_1 &= 0.249 + 0.842x_7 + 3.452x_7x_2 - 0.362x_2^2 \\ y_3 &= 0.112 + 0.109x_3 + 0.741x_7 + 0.109x_3x_7 \\ &\quad + 0.078x_7^2 \end{aligned} \quad (25)$$

・モデルに含まれる変数

$x(k+1)$ を出力変数とした場合

$$x(k), v(k), v(k)/m, 1/m^2$$

$v(k+1)$ を出力変数とした場合

$$v(k), v(k)^2, F(k), F(k)v(k), v(k)/m, 1/m^2$$

・計算時間および記憶容量

約2秒/層, 13 K. words

ただし、使用した計算機は NEAC 2200/700 である。

中間表現式を用いる GMDH による数値実験結果：

・パラメータの設定

第1層の中間表現式の最大次数は2次とする。($p=2$)

中間表現式の最大項数は10項とする。($L_1=10$)

各選択層では中間表現式を8個選択する。($m_1=8$)

・補間点

$m=3, 5, 7, 9$ gr. のデータを用いる。

・同定されたモデル

$x(k+1)$ を出力変数とした場合、通過層は3層であった。

$$\begin{aligned} x(k+1) &= 0.035 + 0.999x_5 + 0.993x_7 + 0.432x_2x_3 \\ &\quad (\pm 0.040) (\pm 0.018) (\pm 0.046) (\pm 0.082) \end{aligned} \quad (26)$$

$v(k+1)$ を出力変数とした場合、通過層は2層であった。

$$\begin{aligned} v(k+1) &= 0.002 + 0.992x_7 + 0.994x_2x_3 \\ &\quad (\pm 0.057) (\pm 0.036) (\pm 0.122) \end{aligned} \quad (27)$$

ここで、カッコ内の数字は、推定されたパラメータ値の95%信頼区間を表わしている。

・モデルに含まれる変数

$x(k+1)$ を出力変数とした場合

$$x(k), v(k), F(k)/m$$

$v(k+1)$ を出力変数とした場合

$$v(k), F(k)/m$$

・計算時間および記憶容量

約15秒/層, 16.5 K. words

ここで、つぎの距離、速度、加速度に関する定義式を考察する。

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = a \end{cases} \quad (28)$$

ただし、 x は距離、 v は速度、 a は加速度を表わす。

(28)式をベクトル行列表示すると、

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} a \quad (29)$$

となる。(29)式のシステムを、離散時間幅1秒の離散形線形動的システムで表現すると、

$$\begin{bmatrix} x(k+1) \\ v(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(k) \\ v(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1.0 \end{bmatrix} a(k) \quad (30)$$

となる。(30)式と中間表現式を用いた GMDH によって同定した(26), (27)式を比較すると、つぎの関係が存在していることがわかる。

$$F(k)/m \approx \alpha(k) \quad (31)$$

この関係式は、ニュートンの第2法則を表わしている。つまり、中間表現式を用いた GMDH のアルゴリズムによってニュートンの第2法則が導出されたことになる。これに対して、部分表現式を用いた GMDH によって同定した(24)、(25)式からは、(31)式のような関係を導出することはできない。これは、部分表現式を用いた GMDH では各選択層において中間変数を入力変数にした部分表現式を構成し、これらを多層に積み重ねて入出力関係式(完全表現式)を構成しているため、入出力変数間に存在する物理的関係を正確に把握することが困難なためである。計算時間については、部分表現式を用いた GMDH のほうが短くてすむ。

5. む す び

情報量規準 AIC を用いて、各選択層において最適な中間表現式を自己選択する改良形 GMDH を提案した。このアルゴリズムを簡単な力学系における入出力データに適用し、各選択層において最適な部分表現式を自己選択する GMDH によって得られた結果との比較を行った。そして、システムの入出力変数間に存在する物理的意味を明確に表現した多項式の構造を正確に求める問題に対する有効性を確認した。

この改良形 GMDH を実際問題に適用する場合、各入力変数に含まれる測定誤差が大きいと、同定されたモデルの構造がシステムの構造と異なる可能性がある。構成されたモデルを物理的知識に基づいてよく検証する必要がある。また、入出力関係式に非常に多くの変数を含み複雑な構造をした問題に対しては、本論文の手法よりもむしろ従来の部分表現式を用いた GMDH⁵⁾ を適用したほうがよいと思われる。これは、入出力関係式に非常に多くの変数が含まれる場合、個々の入力変数と出力変数の間の物理的意味づけを明確

にすることは困難であり、さらに、本論文の手法を用いても、測定誤差などの影響により、測定データのみからシステムの構造を正確に把握することは非常に困難であると考えられるからである。すなわち、対象となる問題の性質に応じて、使用する GMDH のアルゴリズムを使いわけける必要がある。ただし、実際問題において、対象となる問題の性質があらかじめ明らかでない場合には、まず本論文の改良形 GMDH を用いて、システム構造の複雑さの度合いを調べてみる。そして、もし比較的簡単なモデルが得られればその結果をそのまま使用し、複雑な構造をしたモデルしか得られなかったならば従来の GMDH を新たに適用しなおすといった使い方も考えられる。また、変数選択形重回帰分析法と、中間表現式を用いる改良形 GMDH との違いは、重回帰分析では、入力変数の個数が増加したり、入力変数の次数が高くなると、事実上計算が不可能になるが、改良形 GMDH ではこのような制限を受けないことである。

参 考 文 献

- 1) A. G. Ivakhnenko: Polynomial Theory of Complex Systems, IEEE Trans. on Systems, Man, and Cybernetics, **SMC-1-4**, 364/378 (1971)
- 2) A. G. Ivakhnenko, et al.: Discovery of Physical Laws by GMDH Method with the Absence-of-Bias Criterion, Soviet Automatic Control, **6-6**, 32/45 (1973)
- 3) 池田三郎, 樫木義一: GMDH (発見的自己組織化法)と複雑な系の同定・予測, 計測と制御, **14-2**, 185/195 (1975)
- 4) 井原二郎: 改良形 GMDH—動的世界人口モデルの場合—, システムと制御, **19-4**, 201/210 (1975)
- 5) 田村坦之, 近藤正: モデル選択の評価規準に予測平方和(PSS)を用いる改良形 GMDH, 計測自動制御学会論文集, **14-5**, 518/523 (1978)
- 6) 奥野忠一ほか: 統多変量解析法, 日科技連 (1976)
- 7) 赤池弘次: 情報量規準 AIC とは何か, 数理科学, No. 153, 5/11 (1976)