

最小二乗法標準プログラムSALSの移植

名大農 山本充男

I はじめに

最小二乗法は、自然科学などの測定データの解析に広く使われている基本的な手法である。特に、モデルの構築・改良のために、実際の測定値をあてはめるという作業は不可欠であり、その際、最小二乗法は非常に有力な手段となる。しかし、モデルが複雑になればなるほどあてはめは困難になり、従来の正規方程式による方法、さらに、定差図による方法、ひいてはDEMINGの最小二乗法といろいろな手法を用いあてはめを実行してきた。しかし、DEMINGの方法においてもなかなか理論どおり解が収束しない場合があり、モデルのパラメーターの決定には困難を極めていた。ところが、今回（1979年11月）名古屋大学大型計算機センターに東京大学大型計算機センターで開発されたSALS（作成代表者：中川徹・小柳義夫）が移植され、公開使用が開始された。これにより、あてはめに費やす労力が軽減されるものと思われる。

II SALSの機能[※]

SALSとは、Statistical Analysis with Least-Squares Fittingの略であり「サルス」と呼ぶ。SALSは、最小二乗法を中心とするデータ解析のための汎用プログラム・パッケージである。

SALSの機能は、（広義の）最小二乗法解析、いいかえるとあてはめ（Fitting）である。すなわち、測定データに対して、それを説明できるとされる理論式を用いて、その理論式中の未知パラメーターを調節し、測定データを最もよく再現できるパラメーターの値を決定する。また測定値の誤差に由来するパラメーター値の不確定性など、統計情報を出力する。

また、SALSの特長の1つは非線形のモデルでも最小二乗法が行なえることである。非線形問題では、解が発散したり振動したりして収束しにくいことが多いので、これを安定に速く収束させるようにアルゴリズムが工夫されている。たとえば、ダンピングつきの Gauss - Newton 法と Fletcher の修正 Marquardt 法の2種が組み込まれている。

※ この節に関する記述は、

中川 徹：最小二乗法標準プログラムSALSについて . 名大センターニュース44 :
360 ~ 368 , 1979

の引用である。その他、SALSの開発の目的、統計的機能、システムの構成、使い方等については後掲の文献を参照されたい。

Ⅲ SALS の適用例

SALS 第2版にRICHARDS の生長曲線

$$y = A(1 - be^{-kt})^{1/(1-M)}$$

を適用する場合、ソース・プログラムは図1のようになり、フォートラン・カード10枚で済む。このプログラムにパラメーターの初期値、測定値その他の情報を与えてやれば結果はでてくる。この例は一例であり、このほかに種々の使用方法がある。いずれにせよ、それほど複雑なプログラムを作らずとも使用することができる。次に、出力については、決定されたパラメーターの値、理論値、残差、残差二乗和のほか、図2に示すようなモデルへのあてはめの様子を示す図が打ち出される。これ以外にいろいろな統計情報が出力されるが、詳細については文献を参照されたい。

```
CALL ZSALS(4000)
```

```
STOP
```

```
END
```

```
SUBROUTINE MODELF(N,M,NC,X,Q,FO,F,R)
```

```
DIMENSION X(N),Q(M),FO(M),R(M)
```

```
DO 10 I=1,M
```

```
F(I)=X(1)*(1.0-X(2)*EXP(-X(3)*Q(I)))**(1.0/(1.0-X(4)))
```

```
10 R(I)=FO(I)-F(I)
```

```
RETURN
```

```
END
```

図-1 SALS の入力例

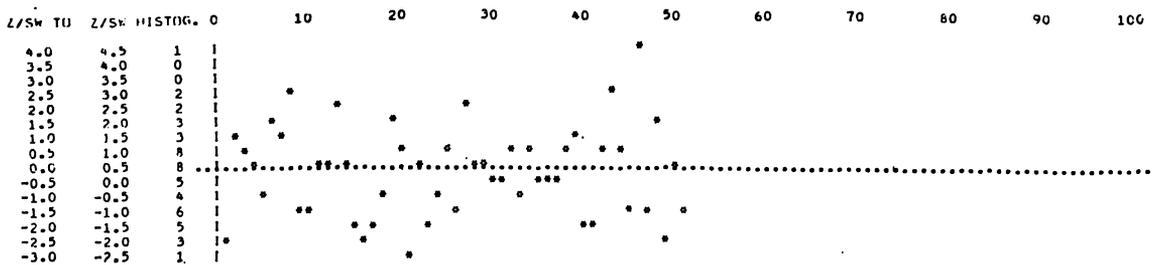


図-2 SALS の出力例 (一部)

Ⅳ おわりに

SALSのような便利なプログラム・パッケージが移植され、モデルへのあてはめは容易になるであろう。SALS以外にも、SSLやSPSSのような科学技術計算用、統計処理用プログラム・パッケージの充実にともない計算処理が容易になることは、我々ユーザーにとって非常に好ましいことである。しかし、容易に使えることが安易に使うことにはなってはならない。特に、ライブラリー・プログラムやプログラム・パッケージを用いる場合、その処理内容を十分理解しなければ、結果に対して誤まった判断を下すこともある。計算機で処理する際、この点に十分注意しなければならない。これについては、自分自身の反省でもある。

参 考 文 献

- (1) 中川徹・小柳義夫： 最小二乗法標準プログラムSALS（第2版）利用の手引，第1部基礎篇（改訂版）．東京大学大型計算機センター，1979.
- (2) 中川徹・小柳義夫・戸川隼人： 同，第2部制御・解法篇（改訂版）．東京大学大型計算機センター，1979.