日本海ブロック試験研究集録
水産庁　日本海区水産研究所
第 6 号，77 ～ 85，1985

1．数値計算プログラムの作り方と使い方の問題点

―― 非線型手法を中心として ――

赤　嶺　達　郎
（日本海区水産研究所）

は じ め に

パソコンの普及により資源解析のほとんどの部分がプログラム化されてきている。また非線型手法の導入によりデータをより有効に利用できるようになりつつある。しかし，非線型手法にはさまざまな落し穴がありエラーを起こしやすい。ここでは赤嶺（1984）の Marquardt 法のプログラムを例にしてこの問題について解説する。

解の存在について

線型手法では解は唯一つ存在するが，非線型手法では複数個存在する。したがって非線型手法では初期値が重要な意味を持つ。また解法には反復法を用いなければならない。

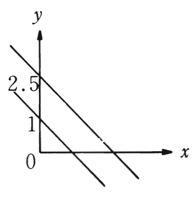
一方，線型手法においても解の精度を高める目的やプログラムを簡単にする目的等のため反復法を用いることがしばしばある。この場合には初期値はそれ程重要ではない。また解が不定の場合には初期値によりいろいろな解に収束するが，この場合は非線型手法とは本質的に異なる。

反復法のプログラムには以上のようにさまざまな場合があるので，モデルを作る際には十分注意する必要がある。以下に連立方程式における簡単な例と水産研究における応用例を示す。

解が
- 存在しない（不能）……………………①
- 存在する
  - 無限個存在する（不定）………②
  - 有限個　〃
    - 唯一つ存在する……………③
    - 複数個　〃　……………④

連立方程式の例

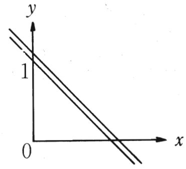
① $\begin{cases} x+y=1 \\ 2x+2y=5 \end{cases}$



平行な 2 直線なので交点（解）なし

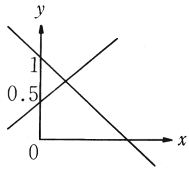
② $\begin{cases} x+y=1 \\ 2x+2y=2 \end{cases}$

2直線が重なっているので交点（解）は無限個



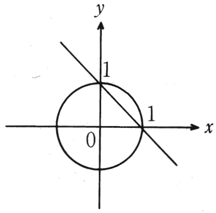
③ $\begin{cases} x+y=1 \\ 2x-2y=-1 \end{cases}$

交点（解）は（$\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}$）の１点のみ



④ $\begin{cases} x+y=1 \\ x^2+y^2=1 \end{cases}$

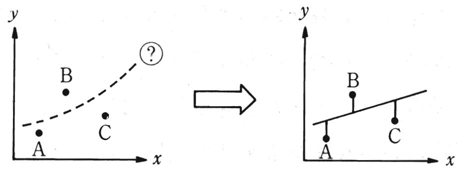
交点（解）は（1，0），（0，1）の２点



これは簡単な例なので解析的に解けるし，解が２個であることもすぐに判るが，一般の非線型連立方程式では反復法でなくては解けないし，解の個数もきちんと調べなくてはならない。

水産での応用例

① これはモデルとして意味を持たないので，③や④にモデルを作りかえるのが一般的である。回帰直線はその代表である。



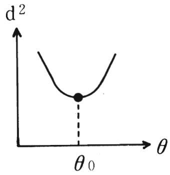
A，B，Cを通る直線　　　$\Sigma d^2 \rightarrow \min$

② 赤嶺（1982）

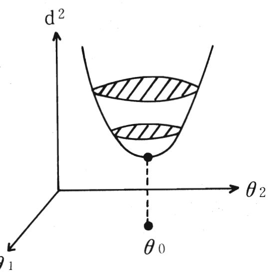
Cohort analysis

未知数の個数の方が独立な方程式の個数よりも多いため解が不定となる。したがって一部の未知数にさまざまな値を入れて解を求め，その解を比較して検討する。簡単な場合にはパラメータ表示も可能である。

③ 回帰直線（線型最小二乗法）



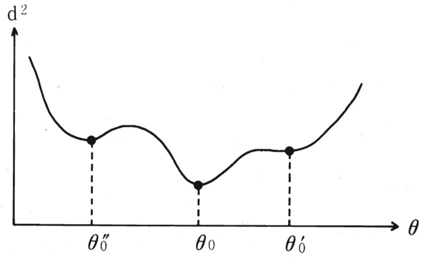
１変数



２変数

（だ円放物面）

④　赤嶺（1984）（非線型最小二乗法）



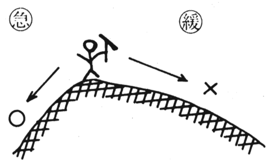
解析手法（計算方法）

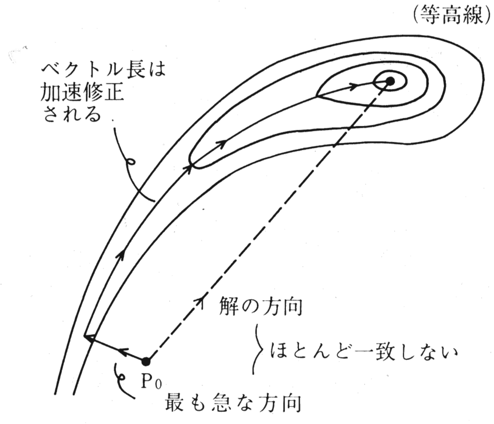
大部分のモデルでは与えられた関数（目的関数）の極値を求めることが目的となる。さまざまな手法が開発されているが，ここではもっとも基本的な最急降下法と Newton 法，最小二乗法では現在のところ最良の手法であると言われている Marquardt 法について簡単に解説する。

最急降下法

Steepest descent method の訳であるが，最急傾斜法・最急公配法等さまざまに訳されている。[たとえ話] 霧で全く視界がきかない場合に谷底におりていくには ～ とりあえず一番急な斜面をおりる。

最急：最も勾配がきついという意味。急いでという意味ではない。実際に使ってみるとかなり収束は遅い。“近視眼的手法”とけなす人もいるが，パラメータのスケーリングをきちんとやればけっこう使える。パラメータ数が3個以内であれば十分実用的である。

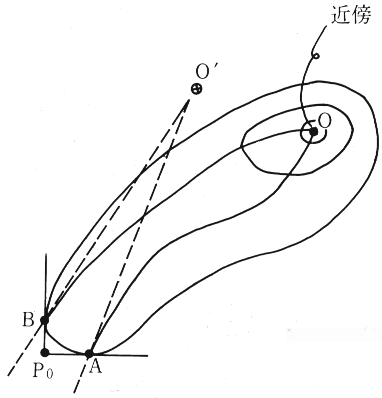




Newton 法

　ＡＯ：横軸方向からみて一番谷底のルート

　ＢＯ：縦軸　　　　　　〃



　ＡＯとＢＯの交点が解である。この交点は非線型連立方程式の解となるので簡単には解けない。そこで直線近似（２次曲面近似）して交点を求める。上図のようにO′が外側に出た場合には発散する可能性が強い。

　解の近傍では線型に近くなる（だ円になる）ので，初期値が解に近ければ数回で収束する。しかし，解から遠ければ発散をおこす。パラメータ数が３個以内であれば，初期値も比較的解に近いものが推定しやすいので収束しやすいが，４個以上の場合には発散をおこしやすい。

Marquardt 法

　最急降下法と Newton 法を融合したのが Marquardt 法である。両手法をたして２で割るような方法ではなく，強引に合体させたところが成功のミソのようである。

　最急降下法は

$$\begin{pmatrix} \lambda & \\ & \ddots & \\ & & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\theta \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} g \end{pmatrix}$$

と書けるので，$\Delta\theta i = \frac{1}{\lambda} g i$ となり，λ が大きくなる程きざみ巾が小さくなって収束は遅くなるが安定する。

　Newton 法は

$$\begin{pmatrix} H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\theta \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} g \end{pmatrix}$$

として，この連立１次方程式を解くものである。

　Marquardt 法では

$$\begin{pmatrix} \lambda & & \\ & H & \\ & & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\theta \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} g \end{pmatrix}$$

のように両手法の係数行列をたしてしまうという乱暴なことをしているが，それが成功のひけつのようである。

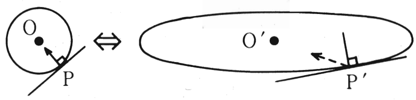
　最初 λ を大きくとってだんだん小さくする。λ が大きい場合は最急降下法に近くなり，小さい場合には Newton 法に近くなる。最急降下法からみた場合，λ が小さくなるにつれてベクトル長が長くなるので加速されることになる。Newton 法からみた場合，連立方程式において対角成分が大きくなることは

解が安定する効果をもつ。以上のようにはなはだうまく収まるので，収束が速くしかも安定しているという理想的な手法である。

パラメータのスケーリング

パラメータの大きさを変えることを言う。単純な線型変換であるが，直交性が変化するので最急降下法では重要である。Marquasdt 法でも前半は最急降下法的性質が強いのでスケーリングを行なわないと収束しない。

左図ではPにおける法線はOの方向を向いているが，右図ではP′における法線はO′の方を向いていない。スケーリングによって右図を左図のように直して計算する必要がある。



赤嶺（1984, 1985）では各パラメータの大きさが1になるようにスケーリングを行った。これでも十分実用的であるが，Marquardt（1963）は係数行列の対角成分がすべて1になるようにスケーリングを行っている（分散行列から相関行列をつくるのと同じ方法)。これだとさらに1回程速く収束するようである。

解に収束しない場合

非線型手法ではよくおこる現象であるが，以下に主な原因を述べる。

① 手法が不適当

パラメータ数が多い場合にはMarquardt法でないとうまくいかない。その際，スケーリングをきちんとやること。

② プログラムのミス

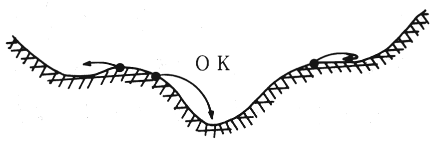
プログラムには必ずバグがある。赤嶺（1984）では“うっかりミス”があったが，解にはあまり影響がなかったため気づくのにかなり時間がかかった。

初歩的な入力ミスにしても，0とOをまちがえた場合はsyntax errorとなって発見しやすいが，1とIをまちがえた場合はsyntax errorとならないため発見しにくい。

考えちがいをしてアルゴリズム自体をまちがえた場合は発見に相当に時間を食う。場合分けの見落し等はerrorが発生しやすいので，TRON等の命令によって発見できることがある。

③ 初期値が不適当

教科書的には右図のように初期値が解からはなれていると他の解や停留点にはいってしまうと言われている。



経験的には初期値が解からはなれていると最小二乗法ではover flow errorを，最尤法ではlog 0でerrorを起こしやすい。

Marquardt法では正常な場合，λが連続的に小さくなり，最後に2・3回振動して終了する。λが最初から振動したり，途中で目的関数の値が急に変化したような場合はあまり収束がうまくいってい

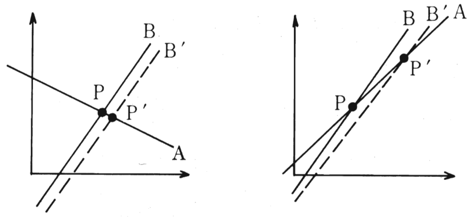
ないので注意する必要がある。

データの条件

データ数は一般に多い程良いと言われているが，多くても条件が悪い場合もある。以下に簡単な例と具体的な例について述べる。

① 連立方程式（交点の座標を求める）

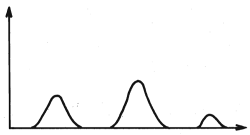
左図ではＢからＢ′に変化した場合，ＰからＰ′への変化はあまり大きくないが，右図ではＰからＰ′の変化は大きく，Ａ，Ｂの信頼性が相当に高くないと使えない。Ａ，Ｂが直交に近い程解は安定している。行列で表現すると係数行列の対角成分が大きい程，解は安定している。左図のような場合をデータの条件が良いと言い，右図のような場合を悪いという。



② Polymodal な度数分布を正規分布に分解する場合

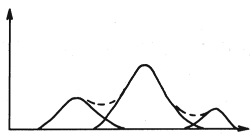
〈理想的〉

直接計算できる

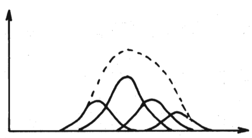


〈まあまあ〉

赤嶺（1985）で計算できる

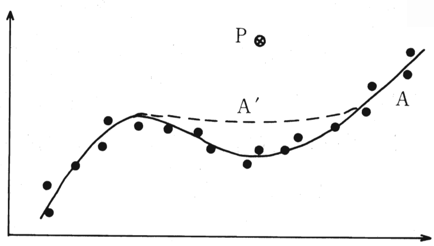


〈絶望的〉



③ ロバスト推定

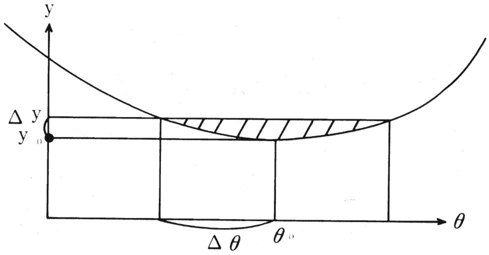
Ｐをのぞくと回帰曲線はＡ′からＡに大きく変化する。他の点をのぞいても回帰曲線はそれ程大きく変化しない。この場合，真の回帰曲線をＡと考え，Ｐは測定ミスと考えて捨ててしまう。つまり棄却検定のようなものであるが，これを計算機に自動的に判定させる方法がロバスト推定である。ロバストとはがんけん性の意味である。



④ 解の信頼区間

一般に最適手法では目的関数の値はすみやかに収束し安定であるが，各パラメータの値は収束が遅く不安定である。

右図のように解の近傍ではナベ底のようになっているためで，これは本質的に避けられない問題である。ただし，すべてのパラメータがこうなっている訳ではなく，一部の不安定なパラメータで著しい。具体的には行列Hの逆行列の固有値と固有ベクトルを計算して検定を行なえばいい訳だが，詳しくは赤嶺（1985）を参照されたい。



そ　の　他

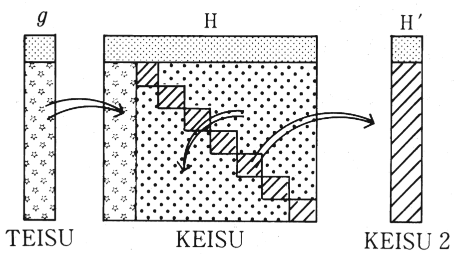
① プログラムの作り方

ひと昔前（2・3年前）では，パソコンのメモリーが少なく速度も遅かったため，メモリー効率と速度に重点をおいたプログラムをつくる必要があり，大型計算機とは一味ちがったテクニックが必要であった。ここ2・3年のパソコンの高性能化・低価格化は驚くべきもので，ひと昔前のミニコン以上の能力を有している。したがってプログラムも大型計算機と同様に，多少効率が悪くても，単純でわかりやすく作りかえやすいものの方がよいようになってきた。特に研究機関ではさまざまなユーザーがいろいろな目的に用いるため，作りかえやすさは最重要である。各パソコンごとに互換性のない現状では，共用のサブルーチンを全員で使うことが困難なため，単純で短いプログラムも移殖の必要性を考えると重要である。

② Polymodalな度数分布を正規分布に分解する方法について

赤嶺（1984）には“うっかりミス”があった。λを大きくするループでHとgの値が保存されていなかったため，ループが正しく動いてなかった。しかし，λを大きくするループはほとんど収束判定にしか作動してなかったので，解にはほとんど影響していなかった。このような問題では，いくらでも真の解に近い解を見つけることができるので，真の解に到達することはほとんど不可能である。それよりも信頼区間をきちんと押さえることの方が大切である。

赤嶺（1985）ではこのミスを修正し，以下のようにしてHとgの値を保存している。



プログラムでは

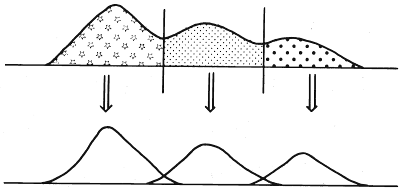
1182～1189で保存

1522～1529で読み出しを行なっている。

◉ 計算には赤嶺（1985）のプログラム2を使用する。

⊙ 初期値の与え方

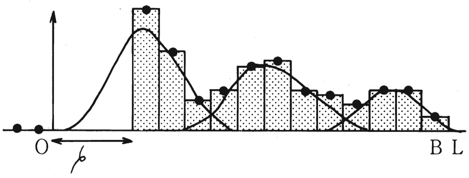
へこんだ部分で切断し，それぞれの部分で面積，平均，標準偏差を計算して初期値とするといい初期値が得られる（海生研の原猛也氏の私信による）。



⊙ とびはなれた点，長くすそをひいた部分はカットして別にとり扱う。

各群において正規分布しているという仮定から著しくはずれるため。

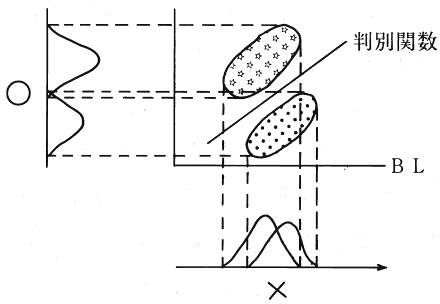
⊙ 一部のデータが欠測したりする場合（ロバスト推定的扱い）には，赤嶺（1985）のプログラム3のχ^2最小化法か最小二乗法を用いる。



漁具効率が悪くて採集できない

⊙ うまい解に収束しない場合

• 年令組成では判別できないので，他の形質をさがす（年令形質）。



判別関数的考え方が必要

• Cassieや田中の方法を用いる。

統計的には厳密でない～生物学的には正しい解が求まるかも。

主観にかなり左右される～最近ではプログラム化されており，かなり客観性が増している。

今後の予想

① 非線型手法の浸透

5年後にはさらに良いプログラムパッケージが完備されて誰でも手軽に使えるようになるだろう。

② 次のステップへの飛躍

10年後には現在パソコンで遊んでいる中高生が研究者として現場に参加してくる。彼らにとってパソコンは使い慣れた道具でしかなく，非線型手法も見慣れた解析手法にすぎない。さらなる飛躍が期待できる。

文　献

赤嶺　達郎（1982）　日水研報（33）141～145

〃　　（1984）　〃　（34）53～60

〃　　（1985）　〃　（35）129～160

参考書

① 応用回帰分析（ドレーパー＆スミス，森北出版　￥3200）

10章に非線型最小二乗法についてつっこんだ解説がある。ただしプログラムについての説明はない。

② 最小二乗法による実験データ解析（中川徹・小柳義夫　東大出版会　￥2400）

5章に非線型最小二乗法，8章にロバスト推定の説明がある。専門的で行列等の記述は理解しにくいが，文章だけ読んでイメージをつかむだけでも役に立つ。

③ パソコン会話型科学技術計算プログラム集（玄光男・井田憲一　工学図書　￥1900）

逆行列，固有値・ベクトルの計算サブルーチンがあるので信頼区間推定に役に立つ。多変量解析用のサブルーチンとしても使える。

④ The BASIC（技術評論社　￥490）

パソコンについて知らないよりは知っていた方が得をする情報が多く載っていたが，最近パワーが落ちてきた。

Marquardt 法についてやさしく解説した本はほとんどない。要は自分で実際に作ってみれば一番簡単に理解できるということだろう。

Do it yourself!

The END