



Title	最小二乗法標準プログラムS A L Sの紹介
Author(s)	中川, 徹
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1979, 33, p. 35-41
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65411
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

最小二乗法標準プログラムSALSの紹介

東京大学理学部 中川 徹

最小二乗法解析のための使いやすい標準プログラムが、最近東京大学大型計算機センターで開発されました。統計学的にも数値解析的にもよく吟味されたシステムであり、自然科学をはじめ種々の分野のデータ解析に便利です。近く大阪大学大型計算機センターにも移植して公開使用される予定です。

1. SALSの開発の目的

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す。私達がSALSの開発を始めましたより以前にも、多くのユーザーが自作の最小二乗法プログラムを使っており、東大センターにもいくつかライブラリーとして登録されていました。しかし、そのほとんどが統計学的にも数値解析的にも旧式で、性能や使い勝手に多くの問題がありました。特に自然科学においては、大規模で複雑な理論式を用いることが多いので、社会科学などを対象として作られている“統計プログラムパッケージ”などはほとんど使えません。パラメーターについて非線形の理論式（モデル）で速く安定に収束させ、同時に高精度の解が要求されます。それには、複雑で緻密なプログラミングが必要で、ユーザー一人一人が大変な苦労を強いられてきました。解を求めるのが精一杯でしたから、統計的な情報を詳しく出力することなどは手が回らないのが実情でした。

しかし、最小二乗解法や統計的手法はいろいろな分野に共通に使えるはずであります。そこで、共通の困難に直面している多くのユーザーが、物理や化学などの個々の分野にとらわれずに、データ解析一般の問題としてとり組めば、共同で解決できるはずであります。それには、ユーザーだけでは不可能で、統計や数値解析の専門家と協力することが必要なことは明らかであります。

そこで、私達は1975年4月に呼びかけをして、統計・数値解析・計算機の専門家と物理や化学のユーザーとで、共同のグループを作りました。そして、「自然科学における測定データの最小二乗法解析のための汎用標準プログラム」を目標として、開発を始めました。統計学的にも数値解法の面でも、近年の新しい研究成果をとり入れて、使いやすく信頼できるシステムを作ることが基本的な方針でした。

2. S A L S 開発の経過

S A L S グループ発足後、1975年7月より東大型計算機センターから応用プログラムライブラリーの開発の一環として認められ、計算機使用料や作業室などの援助を受けました。また、1976年度から1978年度まで、科研費特定研究「統計プログラムパッケージの研究」（代表者：丘本正阪大教授）にサブグループとして参加し、活動の基盤を得ました。

活発な討論を経て、1975年10月に基本仕様を決定しました。その後、細部の設計とコーディングに悪戦苦闘し、1976年12月S A L S - M I N I 版始動、1977年4月S A L S - M I N I - B 版コーディング、そして1978年3月S A L S 基本システム第1版を完成し東大センターで公開使用を開始しました。この第1版は1年間で約800回使用されました。さらに改良を続け、本年4月にS A L S 基本システム第2版を完成し公開できることになりました。この第2版はS A L S システムの当初の目標をほぼ完全に達成したものです。

この4年間のS A L S 開発グループの主要メンバーは表1のようですが、この他にも多数の人々が開発に寄与されたことを付記し、感謝いたします。

表1 S A L S 開発 グループ主要構成メンバー

中川 徹 (東大理)	竹中 章郎 (東工大理)
小柳 義夫 (高工研 → 筑大情報)	町田 勝之輔 (京大薬)
田辺國士 (統数研)	渋谷 政昭 (日本IBM)
力久正憲 (早大理工)	山本毅雄 (東大センター)
戸川隼人 (日大理工)	鈴木 功 (東大教計セ → 筑大情報)
伊藤徹三 (理研)	平島 守 (日大理工)
上田澄江 (統数研)	松田久夫 (日大理工)
大岩元 (東大理 → 豊橋技科大)	

3. S A L S の使い方

いろいろ説明する前に、S A L S を使ったジョブの入力例(図1)を見て下さい。指数減衰関数が2つ重なり合っているモデルで、12個の測定値をあてはめようとしている例です。ユーザーが用意するのは、カード4枚の主プログラムと、あてはめるべき関数形のサブルーチン、そして入力データだけです。データの最初はPROBLEMコマンドで解法や出力レベルなど一切を指定しています。その後に、パラメーターの初期値とあてはめるべき測定値を入れれば終ります。このようにユーザーの負担を最少限にして、その実、統計的にも数値解析的にも最先端の手法が使えるのです。

図1. SALSの使用例

// SALS:JOB 1234567890, PASSWORD, A, T, MPG=180 ジョブカード

// JOBLIB %0228953001. SALS.O SALSオブジェクトファイルの使用

// FORTCG (S)

C*** ANALYSIS OF DRUG METABOLISM USING SALS.

CALL SALS(4000)

STOP

END

} ユーザーの
主プログラム

C*** MULTIPLE EXPONENTIAL DECAY MODEL.

SUBROUTINE MODELD(LC, NP, ND, NC, X, Q, FOBS, ↓

1 F, RES, DF, LFIX, MDF)

ユーザー作成
モデル関数
↓ サブルーチン

DIMENSION X(NP), Q(ND), FOBS(ND), F(ND), RES(ND),

1 DF(MDF, NP), LFIX(NP)

DO 20 I=1, ND

F(I)=0.0

DO 10 J=1, NP, 2

E=EXP(-X(J+1)*Q(J))

T=X(J)*E

F(I)=F(I)*T

$$f_i = \sum_k a_k \exp(-b_k q_i)$$

C* CALCULATE THE JACOBIAN COEFFICIENTS, IF LC=1.

IF(LC.LE.0) GO TO 10

DF(I, J)=E

DF(I, J+1)=-T*Q(I)

10 CONTINUE

20 RES(I)=FOBS(I)-F(I)

} 微分行列の計算

RETURN

END

/*

.....以下入力データ

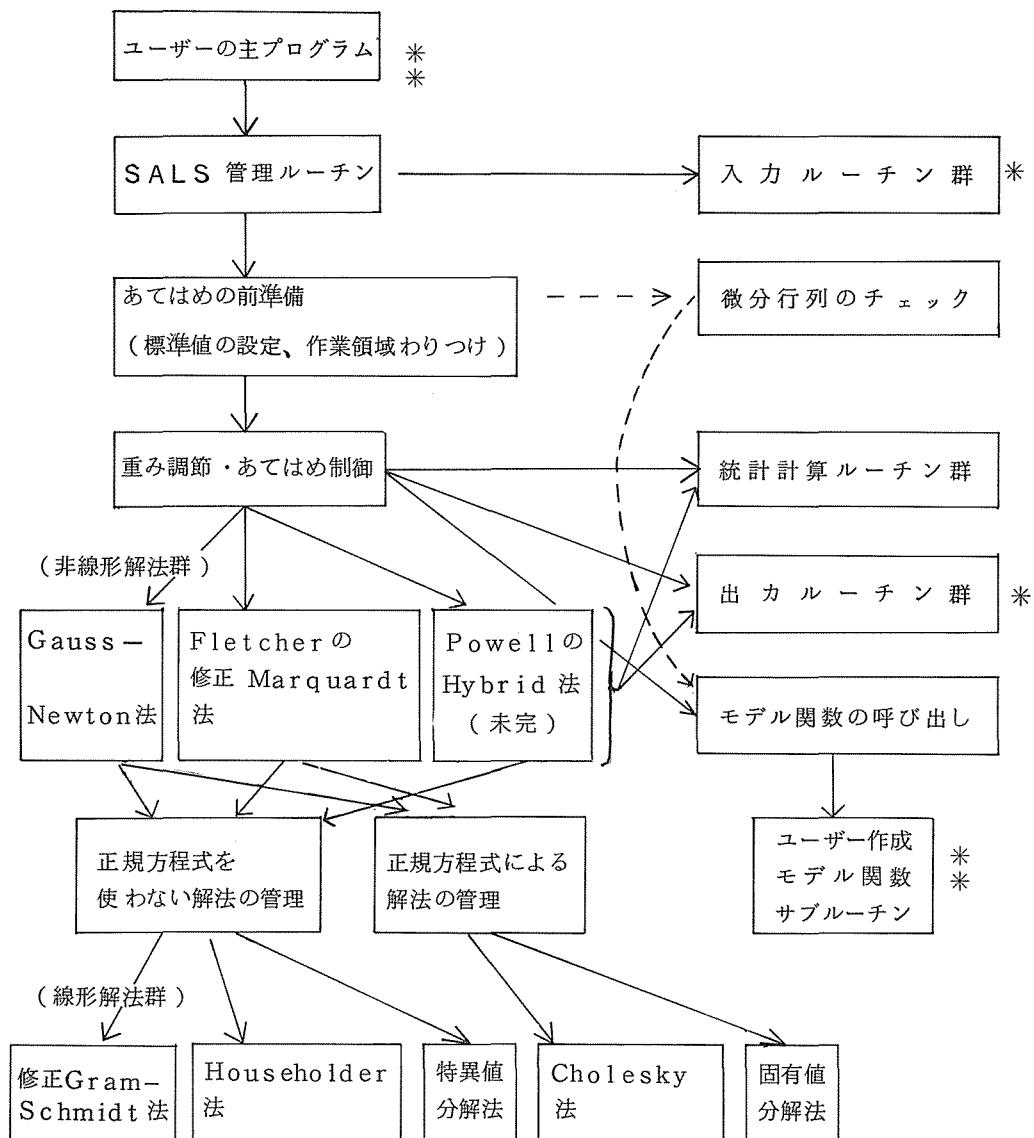
PROBLEM 2. 5. 2. 4. 2. 3.解法・出力の制御

TITLE	2.	}	標題の 入力
	ANALYSIS OF DRUG METABOLISM.		
	TORU NAKAGAWA MARCH 27, 1979.		
PARAMETER	4.	}	パラメーターの初期値 の入力
A 1	5.0		
B 1	3.0		
A 2	1.5		
B 2	0.1	}	測定値の入力
DATA	12. 1. 1. 0.05		
1	0.1 9.17		
2	0.2 7.66		
:	:		
12	10.0 0.14		
ENDSALS SALS の入力の終り		
// END			

4. S A L S システムの構成

S A L S の構成を図 2 に示します。全体でフォートランカード約 14,000 枚、約 130 個のサブルーチンからなり、階層的な構造を持っています。非線形解法が 3 種（うち 1 種は未完）、線形解法が 5 種あって、使いわかれています。入出力ルーチン（＊印）はシステムに備わっていますが、ユーザーが自分用に作って接続することもできます。主プログラムとモデル関数サブルーチン（＊印）はユーザーが作成せねばなりません。

図2. S A L S システムの構成



5. S A L S の特長

S A L S (第2版) の特長を列挙するとつぎのようです。

- A. システム性
 - 1) 自然科学に限らず、種々の分野に汎用。
 - 2) 入出力とあてはめ処理の一切を含むシステム。
 - 3) あてはめるべきモデル関数サブルーチンだけをユーザーが使ればよい。
微分行列または正規方程式をも計算するサブルーチンを作つてもよい。
 - 4) フォートラン J I S 7000 で作成。移植が容易。
 - 5) 構造が明瞭で、プログラムの解説が容易。
 - 6) パラメーター数とデータ数に応じて、配列の大きさを動的に割りつける。
- B. 入力と制御
 - 7) コマンドにより、解法や入出力を自由に制御。
 - 8) コマンドやコントロールデータのデフォルトの設定が完備し、使いやすい。
 - 9) 解法の複数組、パラメーターの複数組、測定値の複数組を同時に扱える。
- C. 解法
 - 10) 線形最小二乗法には、正規方程式を使わない解法3種(修正 Gram-Schmidt 法、Householder 法、特異値分解法)と正規方程式を解く解法2種(Cholesky 法、固有値分解法)を備える。ランク落ちも扱える。
 - 11) 非線形最小二乗解法として、ダンピングつき Gauss-Newton 法と Fletcher による修正 Marquardt 法の2種。収束が安定。
 - 12) 計算速度と計算精度の向上に配慮。
- D. 統計手法
 - 13) 重みつき最小二乗法可能。
 - 14) パラメーターの初期値への固定、初期値のまわりのゆるい束縛が可能。
 - 15) ロバスト推定法を採用。異常値に強い。
 - 16) 残差のグラフ、パラメーターの誤差行列、計算値の推定誤差、赤池の情報量基準 AIC などの統計情報が豊富。
- E. 出力
 - 17) 整備された出力情報。中間情報の出力が容易。
- F. エラー処理
 - 18) ユーザー作成微分行列の正しさをチェック。
 - 19) 入力のエラーチェック、実行時の異常の処理、エラーメッセージ、デバッグ用出力などを整備。
- G. 文書
 - 20) コメントカード、利用の手引き、プログラム原簿を整備。

以上の特長は、S A L S の基本目標をほぼ完全に達成しているといえます。なお、Powell

の Hybrid 法（速くて安定な非線形解法）、倍精度版 S A L S, T S S 版 S A L Sなどを開発中です。

6. S A L S の公開と移植

S A L S 第 2 版は、近日中に東大センターの応用プログラムライブラリーとして登録し、東大センターのユーザーは誰でも使用できるようになります。ソースプログラムも公開します。

S A L S の使い方は、「利用の手引き」をご覧下さい。このうち、「第 1 部、基礎篇」は初めて使う人が必ず読むべきもので、これだけで S A L S が使えます。「第 2 部、制御・解法篇」は S A L S を使いこなすためのユーザーの手引きです。さらに、東大センターニュースに解説記事を連載し、東大で S A L S 講習会（5月 21 日（月）、6月 22 日（金））を企画しています。詳しくは、東大センターのプログラムライブラリー開発室（唐木・高橋）まで問い合わせ下さい。

この度、阪大センターより S A L S の移植の申し入れを受けました。移植は東大センターの公的手続きを経て行なわれます。良いプログラムを作って、みんなが使えるようにしたいというのが S A L S を開発した趣旨ですから、私達開発グループも喜んで移植のお手伝いをしたいと思います。移植が成功して阪大センターに定着するように、阪大センターのスタッフの方だけでなく、ユーザーの皆さんにもぜひご協力いただきたいと思っております。S A L S は、ユーザーの発意によって開発されたシステムです。今後もユーザーの皆さんのが育てて良くして下さることを願っております。

7. 参考文献

1) あてはめ法 —— その理想と現実 (I), (II)

中川 徹・朽津耕三：分光研究、24(2), 109 ; (3) 165 (1975).

2) 最小二乗法標準プログラムの開発 (4) S A L S 基本システム（第 2 版）の公開

中川 徹・小柳義夫・戸川隼人：東大型計算センターニュース、11(4), 70 (1979).

3) 最小二乗法標準プログラム S A L S (第 2 版) 利用の手引き。第 1 部 基礎篇。（改訂版）

中川 徹・小柳義夫：東大型計算センター（1979）.

4) 同上。第 2 部 制御・解法篇。（改訂版）

中川 徹・小柳義夫・戸川隼人：東大型計算センター（1979）.

5) あてはめ法の新しいアプローチ

中川 徹：ぶんせき、1979(4), 84 (1979).