The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	最小二乗法標準プログラムＳＡＬＳ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

資　料

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値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した。

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．ＳＡＬＳ開発の経過

ＳＡＬＳグループ発足後、１９７５年７月より東大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ＳＡＬＳ－ＭＩＮＩ版始動、１９７７年４月ＳＡＬＳ－ＭＩＮＩ－Ｂ版コーディング、そして１９７８年３月ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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　ＳＡＬＳ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（高エ研 → 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．ＳＡＬＳの使い方

いろいろ説明する前に、ＳＡＬＳ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です。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 METABOLIBM USING SALS.
      CALL SALS(4000)                                  ユーザーの
      STOP                                             主プログラム
      END
C***  MULTIPLE EXPONENTIAL DECAY MODEL.                ユーザー作成
      SUBROUTINE MODELD(LC, NP, ND, NC, X, Q, FOBS,    モデル関数
     1          F, RES, DF, LFIX, MDF)                 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
C*    CALCULATE THE JACOBIAN COEFFICIENTS, IF LC=1.
      IF(LC. LE. 0)GO TO 10                            微分行列の計算
      DF(I, J)=E
      DF(I, J+1)=-T*Q(I)
   10 CONTINUE
   20 RES(I)=FOBS(I)-F(I)                              ……残差の計算
      RETURN
      END
/*                                                    ……以下入力データ
PROBLEM      2.   5.   2.   4.   2.   3.              ……解法・出力の制御
```

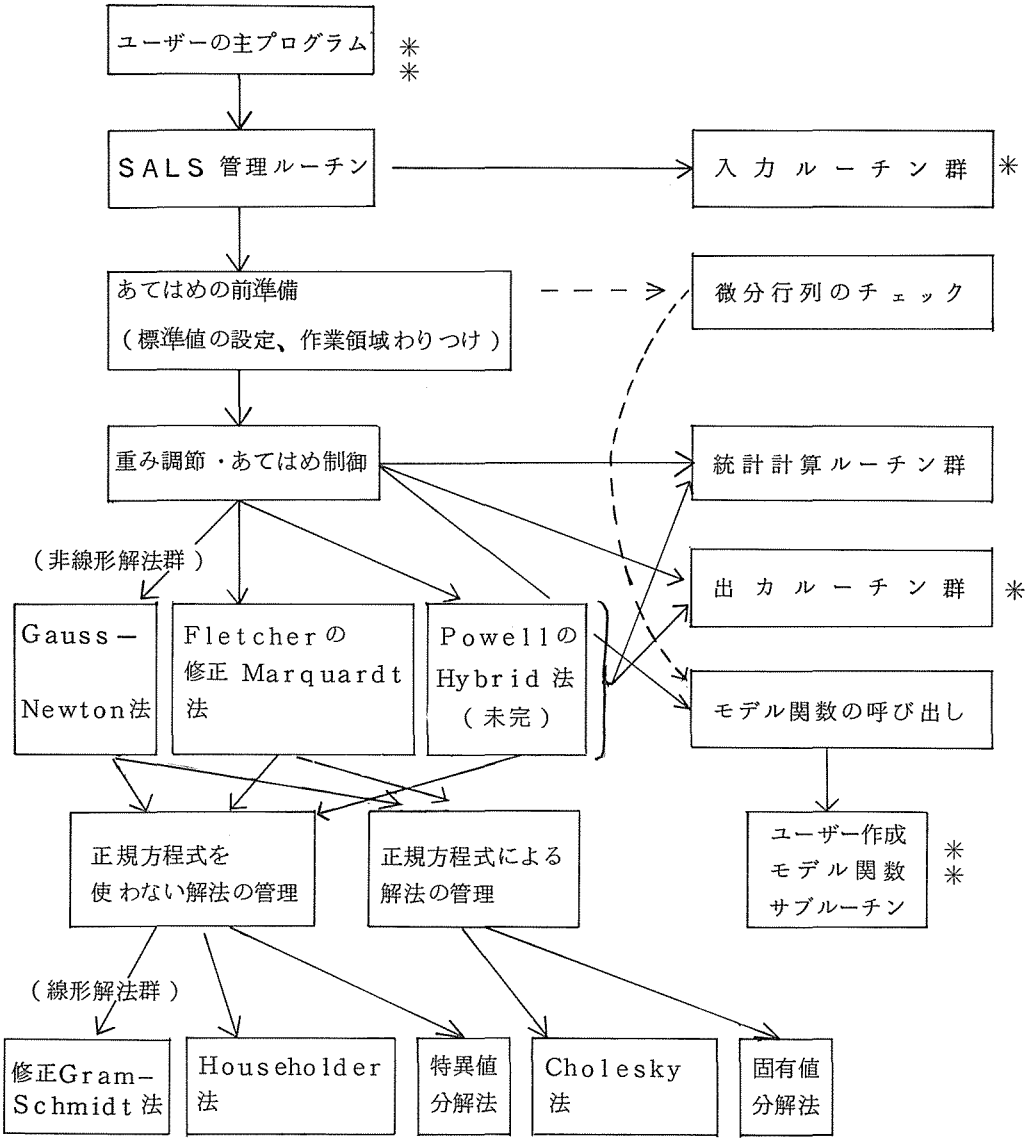
$$f_i = \Sigma_k a_k \exp(-b_k q_i)$$

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

4．ＳＡＬＳシステムの構成

ＳＡＬＳ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、使いわけています。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．ＳＡＬＳシステムの構成



5．ＳＡＬＳの特長

ＳＡＬＳ（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ってもよい。

４）　フォートランＪＩＳ７０００で作成。移値が容易。

５）　構造が明瞭で、プログラムの解読が容易。

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ー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、ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ，ＴＳＳ版ＳＡＬＳなどを開発中です。

６．ＳＡＬＳの公開と移値

ＳＡＬＳ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。

ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳが使えます。「第２部、制御・解法篇」はＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ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。ＳＡＬＳ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) ＳＡＬＳ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ＳＡＬＳ（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）．