

[ 解説記事を読む前に ]

～ サーバ名の読み替えについて ～

本解説記事は、2001年4月発行の大型計算機センター広報 Vol34 ,No.2 に掲載されたもので、当時の UNIX サーバ(vpp,spp)でサービスを開始した SALS の利用方法に関する解説です。

コンピュータリプレースに伴い、現在、SALS のサービスは、hpcで行っております。したがって、**本解説記事中のサーバ名「vpp」および「spp」は、「hpc」と読み替えてご欄下さい。**

2005年1月

# 最小二乗法標準プログラム SALS

浅岡香枝\* 平野彰雄\*

## 1 はじめに

4月からスーパーコンピュータ vpp および計算サーバ spp で、最小二乗標準プログラム SALS[1][2]のサービスを開始しました。

SALS は、小柳義夫教授(東京大学理学部情報科学科)を代表とする SALS 研究会により開発されたプログラムパッケージです。本センターでは、1980年代にプログラムの譲渡を受けて汎用サーバ(MSP)でサービスを行ってききましたが、今回、UNIX システムである vpp と spp に移植しました。移植は、バージョン 2.5 版をもとに SALS 移植の手引き [1]にしたがって行い、単精度版と倍精度版を用意しました。

ここでは、移植した SALS の使い方について説明します。

## 2 SALS とは

まず、本センターでの SALS の使い方を説明する前に、SALS とその基本構成について簡単に紹介します。

SALS は、自然科学・工学・能楽・薬学・医学などさまざまな分野において、測定データを最小二乗法およびその改良法を用いて解析するための汎用プログラムパッケージです。

測定データに対して、利用者が定義したモデル関数をあてはめ、モデル関数に含まれるパラメータを推定し、かつ、パラメータの誤差の推定などの計算もしてくれます。

SALS は、サブルーチン sals を頂点とする約 140 個の Fortran サブルーチンから構成されています。SALS の基本構成を図 1 に示します。

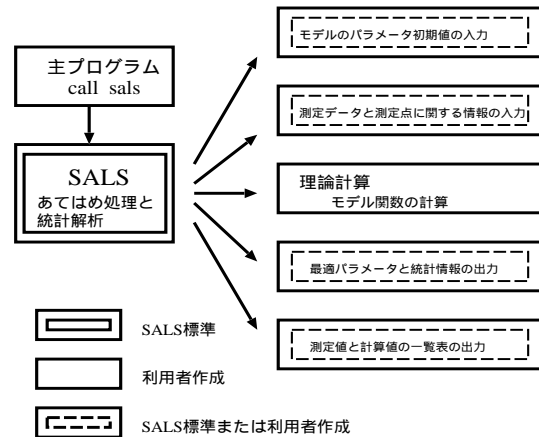


図 1. SALS の基本構成

SALS はライブラリとして提供されており、利用者はライブラリに含まれるモデルサブルーチン(モデル関数から理論計算を行う)や入出力サブルーチンを同じ名前のサブルーチンで置換えることで、用途に合わせてカスタマイズするような構造になっています。

利用者が用意するものは、次の3つです。

- サブルーチン sals を call する主プログラム
- モデルサブルーチン
- 入力データ

入力データは、測定データとモデルパラメータの初期値および SALS パラメータから構成されます。

## 3 SALS の使い方

### 3.1 実行モジュールの作成

実行モジュールの作成は、Fortran コンパイラ(コマンド名、frit)で、次のように指定します。

\*あさおかかえ、ひらのあきお(京都大学大型計算機センター)

```
% frt -o sals.exe main.f -lsals -zmuldefs
```

ここで、main.fには、利用者が用意した主プログラムとモデルサブルーチンのソースプログラムを格納しています。-lsalsはSALSライブラリの指定で、-zmuldefsはライブラリ内のサブルーチンを利用者が作成した同名のサブルーチンに置換えるためのオプションです。

また、倍精度版を使用する場合には、-lsalsのかわりに-lsalsdと指定します。

```
% frt -o sals.exe main.f -lsalsd -zmuldefs
```

なお、vppでコンパイルする場合、次のような警告メッセージが出ることがありますが、これは無視して構いません。

```
ld:/usr/local/KLIB/lib/src/libals.a \
(modl.o):warning: symbol: 'modelf_' \
has differentsize in file /var/tmp/ \
objBAAa000NG.o
```

### 3.2 実行方法

プログラムの実行は、次のようにします。

```
% ./sals.exe < in.data > out.data
```

これで、in.dataを入力データとして読み、SALSの解析結果は、out.dataに出力されます。

なお、標準入力、標準出力以外で入出力を行うときMSPの場合は、次のようなジョブ制御文を指定していましたが、

```
//GO.FT08F0001 DD DSN=IN.DATA
//GO.FT10F0001 DD DSN=OUT.DATA
```

UNIXでは、これを環境変数で指定できます。例えば、上記のジョブ制御文での指定は、次のようになります。

```
% setenv fu08 in.data
% setenv fu10 out.data
```

また、環境変数の指定を無効にするには、次のようにunsetenvコマンドで行います。

```
% unsetenv fu08
```

## 4 SALSの利用について

### 4.1 著作権の明示

SALSを利用して得られた研究成果を公表する場合には、プログラム名SALSおよび著作者名を明記することが求められています。SALSの著作権はSALS研究会に帰属しています。

### 4.2 ソースプログラムの公開

SALSの受入れ機関は利用者に対してソースプログラムを公開することを義務づけられています。

センターでは、SALSのソースプログラムをサンプルプログラムと合わせて、vppおよびsppの次のディレクトリ配下で公開しています。

```
/usr/local/KLIB/src/sals
```

ここで公開しているソースプログラムは、本センターの計算機以外にコピーして利用することは禁じられています。ご注意ください。

## 5 おわりに

移植したSALSのセンターでの使い方について説明しました。より詳細な使い方については参考文献をご覧ください。

今回のSALSのUNIXへの移植は、利用者からの要望によるものです。資料などを見ると開発から20年以上経ているにも関わらず、有効に利用されていることに感銘を受けました。

### 参考文献

- [1] 小柳義夫、中川徹: SALS 入門 - 実験データの解析、東京大学出版会 (1990)  
ISBN:4-13-062107-6
- [2] 中川徹、小柳義夫: 最小二乗法による実験データ解析、東京大学出版会 (1982)  
ISBN:4-13-064067-4