

連立1次方程式に対する解法アルゴリズムの信頼性*

磯本 征雄** 森田 一興***

Abstract

Generally, it is very difficult to discuss about the reliability of library subprograms made for the scientific calculation. Almost all subprograms are written in the FORTRAN language. But, at present, many people use the library subprograms which were made by the other people. Therefore, it has got necessary to know about not only the efficiency, but also the accuracy and the reliability of the subprograms.

In this paper, we show one of the methods to check the reliability of the subprogram for linear equations. Here, it is the main purpose to show the method to check the behavior of the subprogram around the ill-conditional problems. In this method, it is possible to check one of the reliability of the subprogram of linear equations in a certain norm, disregarding the details of the algorithm.

1. まえがき

連立1次方程式は、解が一意的であることから、多くの分野に応用され、そして現在、高速大型計算機を用いて多くの利用者が、連立1次方程式の数値解を求めている。ところが、教科書および論文¹⁾で詳細に説明されているように、方程式によっては、特異またはそれに近い状態になる場合がある。このような場合、数値計算により得られる解は、一般に大きな誤差をもつ。このことは、ディジタル計算機を用いる限り避けられない。したがって、不特定多数の利用者を対象として、高速大型計算機用に開発されたサブプログラムに対しては、このような“悪条件の問題”について十分な考慮をしておくことが望ましい。

この論文の目的は、利用者の立場で、既成のサブプログラムの信頼性を調べる方法を示すことにある。“計算プログラムにより出力された解の精度が望みのものよりも良いものであり、もし誤差が望みのものよりも大きくなった場合には、そのことを知り得る”ことをもって信頼性が高いと考える。検査方法は、次のよう

に行なう。まず、悪条件の問題を系統的につくり、それを検査対象のサブプログラムに入力する。出力された数値解および補足情報から、サブプログラムの信頼性を確認する。ここに示す方法により、サブプログラムの Algorithm に立入ることなく、簡単かつ機械的にその出力情報の信頼性を知ることができる。

2. 連立1次方程式の ill-condition

2.1 高次元連立1次方程式の簡略化

連立1次方程式は一般に n 次元正方行列 A 、未知および既知の n 次元ベクトル X および B により、 $AX=B$ 、で与えられる。この式の各行は、 n 次元空間の超平面をあらわす。そして方程式の解 X_0 は、これら n 個の超平面の交点である。また、 i および j 行目の超平面のなす交角を θ_{ij} とおき、 $C_{ij} \equiv \cos \theta_{ij}$ 、なる行列要素を定義すれば、行列 C は次式で与えられる。

$$C=AA^T \quad (2.1)$$

ただし行列 A は、各行ごとに $(\sum A_{ik}^2)^{1/2}$ ($i=1, 2, \dots, n$) で割って規格化されているものとする。ill-condition とは、 n 個の超平面の中に、相互に平行または重なった1対の平面が存在する状態である。この時、 $\cos \theta_{ij} \approx 1$ ($i \neq j$) なるものが行列 C の非対角要素の中に存在する。ここで、われわれは、このような意味での ill-condition の式に対する解法アルゴリズムの信

* The reliability of the algorithm for the linear equations, by Yukuo Isomoto (Osaka University Computation Center) and Kazuoki Morita (Nippon Electric Co., Ltd., Industrial System Engineering Dep.)

** 大阪大学大型計算機センター

*** 日本電気株式会社産業システム技術部

類性の検査方法を示す。

一般に実数を要素とする任意の正則行列 A は、ある直交行列 U と三角行列 S の積であらわせる²⁾。

$$A = SU. \quad (2.2)$$

また、行列 S は次の性質をもつ。

$$SS^T = AA^T = C. \quad (2.3)$$

したがって $\cos \theta_{ij} \approx 1 (i \neq j)$ における ill-condition の性質は、行列 S および A に対して同じである。このことから、われわれは、より簡単な三角行列 S で考えれば十分である。

n 次元空間における超平面 i および j の交角を θ_{ij} とすれば、(2.3)式に於いて三角行列 S は定まる。ここで、① $\cos \theta_{12} \approx 1$ が成り立つと仮定する。この時 $S_{21}^2 + S_{22}^2 = 1$ であるから $S_{22}^2 \approx 0$ ($\therefore S_{21}^2 \approx 1$)。故に三角行列 S の行列式は、② $|S| \approx 0$ 、となる。また三角行列 S の固有値の内、絶対値最大および最小のものを $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ とすれば、③ $|\lambda_{\max}/\lambda_{\min}| \gg 1$ となる。なぜならば $\lambda_{\min} = S_{22} \approx 0$ 。さらに三角行列 S の行列要素 S_{22} の絶対値は非常に小さいから、④ 逆行列 S^{-1} において行列要素 $(S^{-1})_{22}$ の絶対値は、相対的に大きくなる。これら①～④の各項目は、いずれも連立1次方程式の ill-condition の判定に用いられるものである。

一般に $\cos \theta_{ij} \approx 1$ が1および2行目以外にある場合にも、“行の入れかえに対して連立1次方程式の解は変わらない”から、方程式の性質を変えずに、第 i および j 行を第1および2行に移すことができる。最終的には $\cos \theta_{12} \approx 1$ の場合のみで十分である。

行列 S において第1および第2行は、2次元空間における2直線からなる2元連立1次方程式の係数行列である。これに対する解は、他の超平面と独立に得ることができる。したがって ill-condition については、一般性を失うことなく、常に2次元空間内での議論に簡略化することができる。 $\cos \theta_{ij} \approx 1$ が行列 C の同じ列に2つ存在する場合にも、同様にして3次元空間内に簡略化できる。しかし異なる列に2つある場合には、それらは相互に独立にしらべれば良い。

ill-condition が3つ以上の場合には、上述の方法を単にくりかえせば良い。したがって3次元までの検査で本質的な内容は知ることができる。

2.2 2元連立1次方程式の ill-condition

規格化された2元連立1次方程式を考える。

$$\sin \theta_1 \cdot x - \cos \theta_1 \cdot y = \alpha, \quad (2.4)$$

$$\sin \theta_2 \cdot x - \cos \theta_2 \cdot y = \beta. \quad (2.5)$$

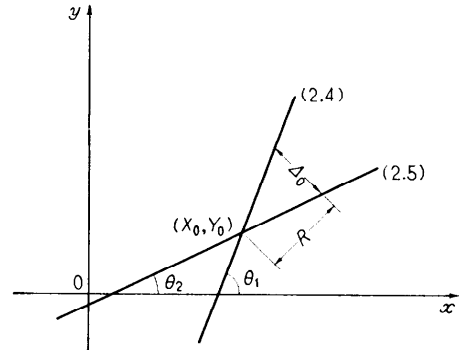


Fig. 1 The equation (2.4) and (2.5) on the two dimensional plane.

式(2.4)および式(2.5)は、図1に示したように、おのおの x 軸と θ_1 および θ_2 の角度をなす直線の方程式である。ただしここで式(2.4)と式(2.5)は座標 (X_0, Y_0) で交わっているものとする。以下、悪条件の問題を考えるために、ここでは $\theta_1 = \theta_2$ ($\theta_1 > \theta_2$) の条件を仮定する。また、単位長さ1に対して計算機で識別し得る最小の長さを Δ_0 とする。直線(2.4)と(2.5)は、座標 (X_0, Y_0) から距離 R の所で、相互に Δ_0 へだたっているものとする。この時、近似的に次の関係式が成立つ。

$$\Delta_0 \approx R \cdot (\theta_1 - \theta_2). \quad (2.6)$$

また、図1における2直線は、太さ Δ_0 の不確定さをもつ。したがって、点 (X_0, Y_0) から距離 R 以内では、直線(2.4)と(2.5)は重なっていて、判別できない。この結果、計算機により算出され得る解 (x, y) は、次の不等式であらわされる。

$$\begin{aligned} X_0 - R \left| \cos \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right| &\leq x \leq X_0 + R \left| \cos \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right|, \\ Y_0 - R \left| \sin \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right| &\leq y \leq Y_0 + R \left| \sin \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right|. \end{aligned} \quad (2.7)$$

故に x, y の誤差 $(\Delta x, \Delta y)$ は、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} |\Delta x| &\leq R \left| \cos \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right|, \\ |\Delta y| &\leq R \left| \sin \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right|. \end{aligned} \quad (2.8)$$

当然誤差の大きさの上限は $\sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} \leq R$ で与えられる。一方、式(2.6)より

$$R \approx \Delta_0 / (\theta_1 - \theta_2) \quad (2.9)$$

が成立つ。このように、連立1次方程式の誤差の上限は、その解法には関係なく、式(2.8)で与えられることがわかる。式(2.9)は、誤差の大きさの上限と方程

式の性質との関係を示すものである。

3. サブプログラム検査方法

第2節における考察でわかるように、連立1次方程式を計算機で解いた場合に出力される解は、常に式(2.7)で与えられる範囲内に存在する。しかも解の誤差は、さらに高精度の計算を実行しない限りこの範囲の内のいずれになるかは制御不可能である。この不可避な誤差に対して十分な対処がなされたサブプログラムであることが望ましい。またこの対処が十分であるか否かが、そのサブプログラムの信頼性に直接結びつくことである。

さて、連立1次方程式解法アルゴリズムの信頼性を確認するにあたって、次の点に注目する。

- (i) サブプログラムにより出力される解の誤差は、最悪の場合でも式(2.8)の関係を満足しているか。
- (ii) サブプログラム利用者が望んでいる精度よりも悪い解が出力された場合、この事実を何らかの方法で知り得る手がかりが、サブプログラム内に内蔵されているか。

本節では、特にこの2点が明確に引き出せるように工夫した検査方法を示す。ただし、2式間の関係が他のもう一つの式との間におよぼす影響を考慮するため、3元連立1次方程式を用いることにする。

3.1 例題のための公式

連立1次方程式を用いて、特異点のまわりに系統的に検査のための例題をつくる。ここでは、例題をつくる上で必要な式の説明をおこなう。

ここで座標系 $(\bar{X}, \bar{Y}, \bar{Z})$ において、方程式を次のように与える。

$$\bar{A}_{1x}\bar{x} + \bar{A}_{1y}\bar{y} + \bar{A}_{1z}\bar{z} = \bar{A}_{10}, \quad (3.1)$$

$$\bar{A}_{2x}\bar{x} + \bar{A}_{2y}\bar{y} + \bar{A}_{2z}\bar{z} = \bar{A}_{20}, \quad (3.2)$$

$$\bar{A}_{3x}\bar{x} + \bar{A}_{3y}\bar{y} + \bar{A}_{3z}\bar{z} = \bar{A}_{30}. \quad (3.3)$$

連立1次方程式における“悪条件”は、平面相互のなす角度の関係にのみ依存する。そして、各平面の位置は2次的な役割をはたすと考えて良い。そこでわれわれは平面相互のなす角度の相互関係を中心に考える。また、取り扱いを簡単にするために、 \bar{Z} 軸を極軸とする極座標を用いて連立方程式の係数行列を次のように与える。

$$\begin{aligned} \bar{A}_{ix} &= \cos \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i, \\ \bar{A}_{iy} &= \sin \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i, \\ \bar{A}_{iz} &= \cos \bar{\theta}_i. \end{aligned} \quad (3.4)$$

ただし $i=1, 2, 3$ である。

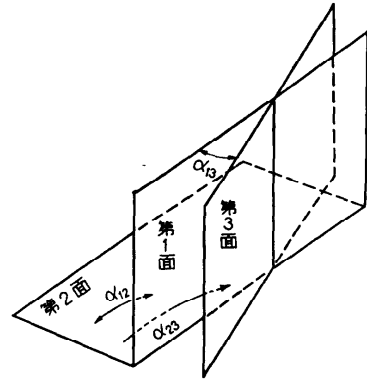


Fig. 2 The three planes in the three dimensional space and the relation between their angles.

ここで $\bar{\theta}_i$ は polar angle そして $\bar{\phi}_i$ は azimuthal angle である。係数行列(3.4)を用いた場合、式(3.1)、式(3.2)および式(3.3)はおのおの $(\bar{A}_{ix}, \bar{A}_{iy}, \bar{A}_{iz})$ を \bar{X}, \bar{Y} および \bar{Z} 成分とするベクトルを法線にもつ平面の式である。ここで式(3.1)を第1面、式(3.2)を第2面そして式(3.3)を第3面と名づけることとする(Fig. 2参照)。面相互の角度を α_{12}, α_{13} および α_{23} とする。

第1段階として、空間における平面の相対的位置関係を明瞭にするために、 $\bar{\theta}_i$ および $\bar{\phi}_i$ を次のように定める。

$$\begin{aligned} \bar{\theta}_1 &= \alpha_{12}, & \bar{\phi}_1 &= 0, \\ \bar{\theta}_2 &= 0, & \bar{\phi}_2 &= 0, \\ \bar{\theta}_3 &= \alpha_{23}, & \bar{\phi}_3 &= \cos^{-1} \left[\frac{\cos \alpha_{13} - \cos \alpha_{12} \cos \alpha_{23}}{\sin \alpha_{12} \sin \alpha_{23}} \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

式(3.5)において、第2面は $\bar{X}-\bar{Y}$ 平面に平行にとっており、第1面は \bar{X} 軸に平行にとっている。第3面は、第1面に対して α_{13} 、第2面に対して α_{23} の角度をなすことから、式(3.5)の第3式のように定められる。

式(3.4)と式(3.5)で与えられる平面は、座標系に対して特殊な位置にある。これらを一般化するために、次のように座標回転をおこない、係数行列の表現を変える³⁾。

最初に \bar{Z} 軸を中心軸に $\bar{\phi}_0$ 座標回転をおこなう。その結果できた座標系を (X', Y', Z') とする。次に Y' 軸を中心軸として θ_0 座標回転を (X', Y', Z') 系に対しておこなう。

そして最終的に得られる座標系を (X, Y, Z) とする。

このようにして得られた (X, Y, Z) 系において, $(\bar{X}, \bar{Y}, \bar{Z})$ 系で与えられた係数行列は, 次のように変換される.

$$\begin{aligned} A_{1x} &= -\sin \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i \sin \phi_0 + \cos \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i \cos \phi_0 \\ &\quad \times \cos \theta_0 + \cos \bar{\theta}_i \cos \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{1y} &= \sin \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i \cos \phi_0 + \cos \bar{\phi}_i \sin \bar{\theta}_i \sin \phi_0 \cos \theta_0 \\ &\quad + \cos \bar{\theta}_i \sin \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{1z} &= \cos \bar{\theta}_i \cos \theta_0. \end{aligned} \quad (3.6)$$

ただし $i=1, 2, 3$ である. また $\bar{\theta}_i, \bar{\phi}_i$ は, 式(3.5)で定義されたものである. 以上の議論により, $\alpha_{12}, \alpha_{13}, \alpha_{23}, \theta_0$ および ϕ_0 を定めれば, 容易に3平面を任意の位置に定めることができ, またそれらの相対的位置も自由に操作できる.

さて, 悪条件の問題を系統的につくるために, 平面相互の間の角度に対して次の条件を置く.

$$\alpha_{23} = (1-\delta)\alpha_{13} + \alpha_{12} \quad (0 \leq \delta < 1). \quad (3.7)$$

式(3.7)において, $\alpha_{13}=0$ の場合, 第1面と第3面は重なり, 方程式の解は不定となる. したがって $\alpha_{13} \cong \Delta_0$ では方程式は悪条件となる.

一方, $\delta=0$ では, 3平面は一直線上に交線を唯一持つ. この場合にも方程式の解は不定となる. 故に, $\delta \cong \Delta_0$ において方程式は, やはり悪条件となる. そこでわれわれは

$$\begin{aligned} \Delta_0 &\leq \alpha_{13} < 1.0 \quad (\text{radian}), \\ \Delta_0 &\leq \delta < 1.0 \quad (\text{radian}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

の領域内で変数 α_{13}, δ を変えることにより, 系統的に悪条件の問題を得ることが可能である.

3.2 例題作成の手順

ここでは, 悪条件の方程式を系統的かつ機械的につくるための具体的手順を説明する. ただし, 第1面と第3面が近接した状態の悪条件を主体にする. そして, 第1面と第2面は固定し, 第3面を徐々に回転させて特異点から遠ざける. 以下, 作成手順を順序をおって説明する.

手順1: 第2面の位置を定めるため, 角度 (θ_0, ϕ_0) を与える. これにより第2面の式に対する係数は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} A_{2x} &= \cos \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{2y} &= \sin \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{2z} &= \cos \theta_0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

手順2: 角度 α_{12} を与えることにより, 第1面の位置を定める. この時, 第1面の式に対する係数は次式で与えられる.

$$A_{1x} = \sin \alpha_{12} \cos \phi_0 \cos \theta_0 + \cos \alpha_{12} \cos \phi_0 \sin \theta_0,$$

$$\begin{aligned} A_{1y} &= \sin \alpha_{12} \sin \phi_0 \cos \theta_0 + \cos \alpha_{12} \sin \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{1z} &= \cos \alpha_{12} \cos \theta_0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

手順3: 角度 $\alpha_{13} = \Delta_0$ を与え, 第1面に近接して第3面を定める. ただし, この時 α_{23} は式(3.7)で与えられる.

手順4: 与えられた角度 α_{12}, α_{13} に対して第3面に対する係数は, 次式で計算される.

$$\begin{aligned} A_{3x} &= -\sin \bar{\phi}_3 \sin \alpha_{23} \sin \phi_0 + \cos \bar{\phi}_3 \sin \alpha_{23} \\ &\quad \times \cos \phi_0 \cos \theta_0 + \cos \alpha_{23} \cos \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{3y} &= \sin \bar{\phi}_3 \sin \alpha_{23} \cos \phi_0 + \cos \bar{\phi}_3 \sin \alpha_{23} \sin \phi_0 \cos \theta_0 \\ &\quad + \cos \alpha_{23} \sin \phi_0 \sin \theta_0, \\ A_{3z} &= \cos \alpha_{23} \cos \theta_0. \end{aligned} \quad (3.11)$$

手順5: 式(3.9), (3.10)および(3.11)で与えられた係数行列に対して, 解が (X_0, Y_0, Z_0) となるように, 次式にしたがって右辺の定数係数を定める.

$$\begin{aligned} A_{1x} \cdot X_0 + A_{1y} \cdot Y_0 + A_{1z} \cdot Z_0 &= A_{10}, \\ A_{2x} \cdot X_0 + A_{2y} \cdot Y_0 + A_{2z} \cdot Z_0 &= A_{20}, \\ A_{3x} \cdot X_0 + A_{3y} \cdot Y_0 + A_{3z} \cdot Z_0 &= A_{30}. \end{aligned}$$

以上の手順により例題はつくりあげられた.

手順6: 例題を検査対象のサブプログラムに入力する. ただし, サブプログラムに対する補足情報が得られるようにしておく.

手順7: サブプログラムから出力された解と真の解との差から, 誤差の大きさを計算する. これと同時に, 補足情報を確認し, 出力された解に対する信頼性の確認が十分であるか否かを調べる.

手順8: α_{13} をもとの値の10倍にする. そして, $\alpha_{13} \leq 1.0$ であれば, 手順4に移す.

$\alpha_{13} > 1.0$ ならば, すでに悪条件ではないので検査終了として次の手順9へ移す.

α_{12} は固定されており, α_{23} は式(3.7)で与えられる.

手順9: 手順7における結果を α_{13} についてまとめるならば, サブプログラムの信頼性は確認される.

最終結果の整理方法としては, δ を独立なパラメータとして, 誤差の大きさを縦軸にそして α_{13} を横軸にとって図式化すれば便利である. 補足情報を同時にグラフ上に符号で示しておく, サブプログラムの信頼性の判断に役立つ.

なお, “手順” についての流れ図の概略を Fig. 3 に示した.

4. むすび

連立1次方程式サブプログラムの信頼性を一般的に

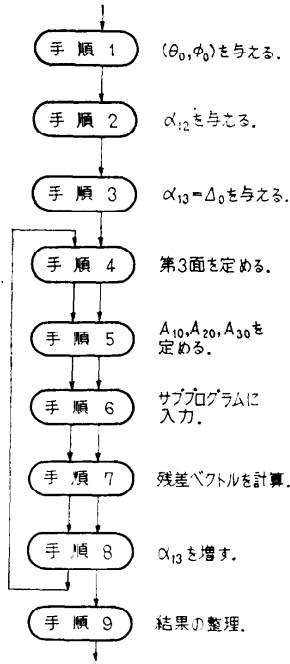


Fig. 3 Flow chart.

論ずるのは困難である。しかし、ここで述べた方法による検査で、悪条件の式に対するサブプログラムの信頼性を確認することができる。

Fig. 4, Fig. 5 には、各々消去法(サブルーチン 1)、掃出し法(サブルーチン 2)を用いた既存のサブプログラムに対する検査結果の一例を示した。入力パラメーターとして、次のものを用いた。

$$\begin{aligned}
 X_0 &= 1.0, & \theta_0 &= 30^\circ, \\
 Y_0 &= 2.0, & \phi_0 &= 30^\circ, \\
 Z_0 &= 3.0, & \alpha_{12} &= 45^\circ.
 \end{aligned}$$

サブルーチン 1 に対しては、10 桁の精度が得られるようにパラメーターを定めた。また、サブルーチン 2 は、精度については入力パラメーターによる制御はできない。

Fig. 4, 5 の縦軸は誤差の大きさ、横軸には α_{13} の大きさをラジアンで示した。また、図中の「 \otimes 」印の部分は、「出力解に大きな誤差がある」ことの注釈が出力されたものである。2 つのサブルーチン共に、 α_{13} と誤差の関係は第 2 節で示した関係に一致している。 δ の減少と共に誤差が大きくなるのは、真の解の近傍における 3 平面の近接状況が、より激しくなることによる。

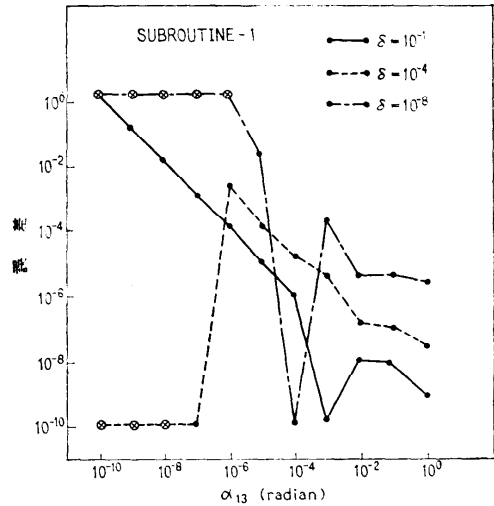


Fig. 4 The results of the check for SUBROUTINE-1.

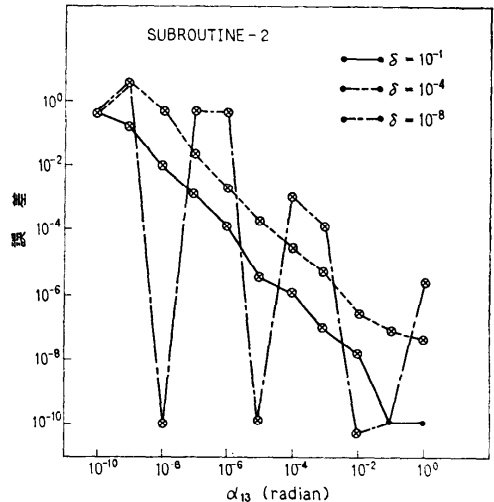


Fig. 5 The results of the check for SUBROUTINE-2.

これらの図式を用いるならば、悪条件の問題を解く際に、いずれのサブプログラムを使用するのが、解の信頼度は高いかを、容易に判断することができる。また、この方法によってサブプログラムを検査することにより、既存サブプログラムの中でいずれが信頼性の点で優れているかを判定するのに有意義な資料を引き出すことができる。

末筆ながら、資料の提供をお願い致しました。全国共同利用大型計算機センター開発室の皆さまおよび作

業の助力をいただきました岡田由美技官に深謝いたします。

参 考 文 献

- 1) 一松信, 森口繁一, 山内二郎: 数理科学シリーズ 1, 電子計算機のための数値計算法 I, 培風館, 1965.
新谷尚義: 基礎数学シリーズ 16, 数値計算 I, 朝倉書店, 1967.
宇野利雄: 応用数学力学講座 16, 計算機のため

の数値計算, 朝倉書店, 1962.

牧之内三郎, 鳥居達生: NEAC JOURNAL, No. 5, 日本電気株式会社情報処理教育部, 1963.

- 2) 遠山啓: 共立全書, 行列論, 共立出版, 1961.
- 3) D. M. Brink and G. R. Satchler: angular momentum (Oxford University Press, New York, 1962).

(昭和 47 年 2 月 7 日受付)
(昭和 47 年 4 月 26 日再受付)