資 料

ユニタリ変換による連立一次方程式の解法*

平 野 泰 彦**

Abstract

In solving systems of simultaneous linear equations, application of Householder unitary transformation is known to be superior to conventional Gaussian elimination with respect to computational stability, while the former requires somewhat larger amount of computation.

The paper demonstrates that the former is quite competitive even in speed since it eliminates the need of pivoting. The advantage of the former becomes still more significant when applied to complex equations. The some technique is applied to the regression analysis by Golub's procedure.

1. まえがき

Gauss 消去法や Crout 法など，連立一次方程式の直接解法では，係数行列の上三角化により解が求められ，そのための変換は非ユニタリ変換である．これに対し，ユニタリ変換により上三角化をすれば，計算量は多くなるが安定性の点で優れていて，たとえば係数行列の (1,1) 要素が零であっても，他の非零要素との置換なしに計算することができる．連立一次方程式が実係数からなるときは，固有値計算と同様のユニタリ変換が適用できる．すなわち，Givens 法，Householder 法があり，計算量が少ないことから後者が多く用いられる．

係数行列が正定値対称でないとき，非ユニタリ変換による解法では，安定化のためにピボッティングが必要であるが，ユニタリ変換による解法ではその必要がないから，計算量は多くてもコンピュータによる実際の計算時間は速いかも知れない．しかし，現実にはあまり利用されていないので，精度と計算時間に関して実用的見地から数値実験により検討を加え，有利であることを確かめた．複素連立一次方程式では，同様の実験で一層有利であった．また，Householder 法を応用した Golub の回帰分析の計算について，その特徴を明らかにした．

2. Householder 法の原理

Householder 法は実係数行列のエルミート変換を得る方法で，一回の変換でとりあげた列の副対角項以下の全要素を零にすることができ，これを繰り返して係数行列を上三角化する．右辺にも同じエルミート変換を行い，その後通常のように後退代入により解を求めることができる．

まず，エルミート変換による三角化の原理を説明しておく．与えられた行列 $A=A_1$ とおき，

$$A_2=P_1A_1,\ \ A_3=P_2,A_2,\ \ \cdots\cdots \tag{1}$$

のように，直交行列 $P_r\ (r=1,2,\cdots\cdots,n-1)$ による変換を繰り返して三角化するわけである．いま，行列 P が

$$P=I-2\omega\omega^T \tag{2}$$

なる形からなって，ω が列ベクトルで

$$\omega^T\omega=1 \tag{3}$$

なる関係があると，

$$P^TP=1 \tag{4}$$

となるから，P は直交行列である．

ここでは式(1)を

$$P_r=I-\beta u_ru_r^T \tag{5}$$

のように書く．このようにすると平方根の計算を避けることができる．ここに，ベクトル u_r の最初の $r-1$ 個の要素は零であって，

$$u_r^T=(0,\cdots,0,x_r,x_{r+1},\cdots,x_n) \tag{6}$$

* Solution of simultaneous linear equations by using unitary transformation by Yasuhiko HIRANO (Yatusiro Technical College)

** 八代工業高等専門学校

の形をとり，このベクトルの各要素の値が定められる．

具体的には，Householder 法による連立一次方程式の解法は次の計算手順になる．

(1) $s^2=\sum_{t=r}^{n} a_{tr}^2$ を計算する．

(2) $a_{rr}\geq 0$ なら $s=-\sqrt{s^2}$

$a_{rr}<0$ なら $s=\sqrt{s^2}$

(3) $\beta=1/(s^2-sa_{rr})$ を計算する．

(4) $P_r=I-\beta u_r u_r^T$,

$u_r^T=(0, \cdots, 0, a_{rr}-s, a_{r+1r}, \cdots, a_{nn})$

をAに掛ける．

以上を $r=1$ より $n-1$ まで繰り返して係数行列Aを上三角化する．

(5) 右辺に P_r を $r=1$ より $n-1$ まで乗算する．

(6) 後退代入により解を求める．

3. 計算時間と精度

Householder 法の演算量の大略は，**Table 1** に示すように Gauss 消去法の約 2 倍である．しかし，Gauss 消去法のようなピボッティングの必要がないから，その分だけ計算時間では有利とも考えられる．Gauss 消去法におけるピボット値の評価は，ピボッティングのためだけでなく，悪条件行列の判定にも用いるので，相対値で判断する方がよい．この点を考慮したプログラムが少なく，最良のプログラムではないかも知れないが，計算時間の比較のために IBM の科学用サブルーチン・パッケージの GELG[4] を用いることにした．密な係数行列からなる 50 元と 100 元の連立一次方程式を計算した結果は，Householder 法の計算時間が速く約 2/3 であった．

次に解の計算精度について，丸め誤差と悪条件行列の二点から検討した．倍精度演算を用いるとき，所望の精度に対し十分な桁数があれば丸め誤差の影響はないが，単精度演算で丸め誤差の累積が精度を劣化する恐れのあるときは，その対策が必要である．その方法として，Forsythe と Moler の提案した残差による反

Table 1 The number of arithmetic operations for both methods

method	for left hand side			for each right hand side	
	±	×÷	√	±	×÷
Gaussian elimination	$\frac{1}{3}n^3$	$\frac{1}{3}n^3$		n^2	n^2
Householder elimination	$\frac{2}{3}n^3$	$\frac{2}{3}n^3$	n	$\frac{3}{2}n^2$	$\frac{3}{2}n^2$

Table 2 Accuracy of inversion of the Frank matrix by both methods

method	$S\to S$	$S\to SD$	$S\to D$
Householder elimination	0.458×10^{-6}	0.362×10^{-9}	0.353×10^{-9}
Gaussian elimination	0.207×10^{-6}		0.379×10^{-9}

復改良法がこの場合も適用できる．しかし，計算時間の点でもっと有利な方法は積和の計算に部分倍精度演算を採用する方法であって，一列の全要素を倍精度領域に置きかえて，その列の変換を繰り返し三角化すれば，これが適用できる．倍精度の 2 語が同時にロードまたはストアされる機械では，倍精度演算を使用することによる計算時間の増加はほとんどない．数値実験には 50 次の Frank 行列をとり，右辺を単位行列にして逆行列を計算し，零以外の要素の相対誤差の平均を求めた．**Table 2** に示すように，部分倍精度演算の場合は単精度入力倍精度演算と同等の精度になった．使用した機械は NEAC 2200-575 である．

連立一次方程式が悪条件の係数行列からなるとき，解の計算精度は Householder 法においても非ユニタリ変換による方法と同様に悪化し，その誤差評価が必要である．ノルムによる誤差評価は逆行列や固有値の計算を必要として実用的でなく，行列式の相対的大きさから悪条件の度合を評価することも考えられる[2]．

$$K_H=D/V \tag{7}$$

と幾何平均の算術平均に置き換えた

$$K_N=D/(N/\sqrt{n})^2 \tag{8}$$

があって，

$$K_N\leq K_H$$

である．

K_H や K_N は Householder 法においても求めることができ，ユニタリ変換ではユークリッドノルムは変化しないから，上三角行列から K_N を計算すれば，計算量は変換前の正方行列から計算するときの約 1/2 になる．K_N から解を誤差評価することが試みられているが，まだ計算量が多く実用的とはいいがたい．

いま，係数行列の二つの列の要素が互に比例関係にある特異行列をとりあげてみると，この一方を消去するユニタリ変換を行うと，他方の対角要素は零になる．したがって，悪条件係数行列からなる連立一次方程式の解の精度を評価する実用的な方法は，対角要素の桁落ちをチェックすることである．1語の仮数部の桁数（NEAC では 35 ビットより 10.53 桁）から対角要素の最大桁落ち数を引いた値が解の評価精度であ

Table 3 Accuracy of inversion of the Lotkin matrix by Householder's method

n	mean rel. error	computed accuracy	max. significance error	evaluated accuracy
2	0.182×10^{-9}	9.74	2.23	10.12
3	0.118×10^{-8}	8.93	2.69×10	9.04
4	0.128×10^{-7}	7.89	4.28×10^{2}	7.84
5	0.289×10^{-6}	6.54	7.51×10^{3}	6.59
6	0.146×10^{-4}	4.83	1.39×10^{5}	5.33
7	0.225×10^{-3}	3.65	2.66×10^{6}	4.04
8	0.705×10^{-3}	3.15	5.25×10^{7}	2.75
9	0.192×10^{-1}	1.72	1.08×10^{9}	1.44

る．実験例として，右辺に単位行列をとり，Lotkin 行列の逆行列を計算した結果を **Table 3** に示す．その評価精度は計算結果の理論値に対する精度とよく一致している．

4. 複素連立一次方程式の解法

複素係数の連立一次方程式 $Ax=b$ が次の実係数行列で表されるとする．

$$(B+iC)(y+iz)=f+ig \qquad (9)$$

複素係数のままで Gauss 消去法を適用しようとすると，ピボットの実部と虚部を評価して選択する具合のよい方法がないので，実係数の連立一次方程式に変形して計算するのが一般的である．

ユニタリ変換を複素行列に適用すると，複素連立一次方程式の解を求めることができる．エルミート変換の転置をこの場合は共役転置するので，ユニタリ行列は

$$P=I-2\omega\omega^{*} \qquad (10)$$

となる．ここに，ω^{*} は ω の共役転置を意味する．

ユニタリ変換による複素連立一次方程式の解法の計算手順は次の項が実係数連立一次方程式の場合と異なるだけである．

（1） $s^2=\sum_{t=r}^{n} a_{tr}\bar{a}_{tr}$ を計算する．

（2） s は実数であって，a_{rr} の実部と加算されるように s の符号をとる．

$$R_e(a_{rr})\geq0 \quad なら \quad s=-\sqrt{s^2}$$

$$R_e(a_{rr})<0 \quad なら \quad s=\sqrt{s^2}$$

二つの複素数の乗算は実数の4回の乗算からなるので，ユニタリ変換による解法の乗算数は $8n^3/3$ である．これに対し，実係数に展開した連立一次方程式に Gauss 消去法を適用しても，乗算数は $(2n)^3/3$ になって同数になるから，ピボッティング分だけ計算時間が多くなると考えられる．50元の複素連立一次方程式について，さきの Gauss 消去法 GELG と実際の計算時間を比較したところ，約1/3になった．フォートランによる複素演算は多少時間がかかるようにいわれているが，数値実験でかなり有利であった．

Table 4 Accuracy of inversion of the Lotkin complex matrix

n	computed accuracy	evaluated accuracy
2	10.44	10.16
3	9.22	9.08
4	7.84	7.82
5	6.44	6.40
6	4.85	5.35
7	3.63	3.46
8	3.16	2.70

悪条件行列からなる複素連立一次方程式の解の精度劣化の実験例は次のように考えた．実部と虚部の行列 $B=C$ とし，右辺は $f=g$ とすると，$y=B^{-1}f$，$z=0$ になる．行列 B と C に Lotkin 行列をとり，右辺を単位行列にして解の実部にその逆行列を計算し，精度として理論値に対する相対誤差の平均値を求めた．この値は **Table 4** に示すように，対角要素の桁落ちの最大値から求めた評価精度とよく一致している．

5. Golub の方法による回帰分析

Householder 法の応用として，従来のように正規方程式をつくらずに，回帰係数を求める方法が Golub によって考案された[5]．平均からの偏差による観測行列を $X(m\times m)$，$y(m\times1)$ とすると，

$$X=\begin{pmatrix} x_{11}-\bar{x}_1 \cdots\cdots x_{1n}-\bar{x}_n \\ x_{21}-\bar{x}_1 \qquad x_{2n}-\bar{x}_n \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \\ x_{m1}-\bar{x}_1 \qquad x_{mn}-\bar{x}_n \end{pmatrix} \qquad y=\begin{pmatrix} y_1-\bar{y} \\ y_2-\bar{y} \\ \vdots \\ y_m-\bar{y} \end{pmatrix} \qquad (11)$$

ここに，攪乱項 u を用い X と y との関係を次のように書くことができる．

$$y=X\beta+u \qquad (12)$$

式(11)に Householder 変換を行うと次のようになる．

$$\tilde{X}=PX=\begin{pmatrix} R \\ \cdots \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \tilde{y}=Py \qquad (13)$$

R は上三角行列であって，この関係から次式により回帰係数の推定値を求めることができる．

$$b=R^{-1}\tilde{y} \qquad (14)$$

従来方法において，正規方程式の解法として修正 Cholesky 法を用いると，計算量の目安としての乗算数は $n^3/6$ である．したがって，回帰係数の計算に要

する乗算数はこれに積率行列の計算量を加えて $mn^2/2+n^3/6$ になる．

これに対し，Golub の方法における乗算数は $mn^2-n^3/3$ であって，$m \gg n$ なら計算量は約2倍ということになる．求めた回帰係数の t 値による検定を行うときは，逆行列の対角要素の値が必要で，まず三角行列 R^{-1} を求めて，解の $R^{-1}\tilde{y}$ を計算するとともに，$R^{-1}R^{T-1}$ の対角要素だけを計算すれば時間の点で有利である．正規方程式の解法においても，同様に計算すれば逆行列から求める必要はなく，両方法についてこのための乗算数の増加は同一でカウントに加えていない．また，Golub の方法ではデータ量が多いとき一度にコアメモリの格納が困難になり，中間結果に二次記憶装置を用いれば計算時間の点で一層不利になる．

Golub の方法は計算時間はかかるけれど，精度の点に特徴がある．多重共線性をもつ観測データは積率行列 X^TX を悪条件とする．行列 X のノルムは行列 X^TX のノルムの 1/2 乗であるが，行列のノルムに比例して入力データの誤差が拡大されるから，Golub 法の解の精度劣化は正規方程式による場合の半分の桁数である．重回帰分析においては，多重共線性を有する観測データは変数の選択により除くことができる．しかし，多項式回帰では積率行列は必ず悪条件になり，一方データ量は少なくて計算時間もあまりかからないので，Golub の方法を用いることに意義がありそうである．

実験例として5次の多項式をとり計算した．その結果を **Table 5** に示す．Golub 法では従来の Cholesky 法に比し精式劣化が 1/2 程度小さい．このときの計算精度は対角要素の桁落ちの最大値から推定することができ，この場合の評価精度は 8.2 桁であった．

Table 5 Computation results of th order polynominal regression

input data

x	0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1.0 1.1 1.2 1.3
y	1.7 2.1 2.2 2.7 3.6 4.9 5.6 4.6 8.0 8.6 8.8 9.2 9.4

computation results

	Cholesky' method	Golub' method	with double precision arithmetric
b_0	1.244763210	1.244755224	1.244755245
b_1	7.491977814	7.492085086	7.492084876
b_2	−34.73569688	−34.73613477	−34.73613396
b_3	94.11175748	94.11250653	94.11250514
b_4	−83.76983063	−83.77039736	−83.77039627
b_5	24.13257362	24.13273033	24.13273002

従来方法の多項式回帰の計算では，精度不足から倍精度演算がよく用いられているが，観測データの精度は5桁程度であるのに，倍精度の桁数まで正確であるとして求めたことになる．観測データの精度が5桁であると通常4次の多項式が限度であって，倍精度演算による高次多項式の計算はもっともらしい結果が得られるだけである．実用上の精度には入力データの精度が関係して，演算桁数の増加により必ず向上するというものではなく，この場合はむしろ入力データは単精度で Golub の方法を用いることを推奨したい．なお，予測にあまり高次の多項式による回帰曲線を用いると，観測範囲の端で曲線が彎曲して危険である．

6. むすび

ユニタリ変換による連立一次方程式の解法は，計算量が多いことから計算時間の点で不利のように思われるが，ピボッティングが不要であるから有利である．特に，複素連立一次方程式の解法においては，一層有利なことが数値実験により明らかになった．悪条件行列に対する精度評価も，対角要素の桁落ちの最大値から容易に推定することができる．また，多項式回帰の計算において，Householder 法を応用した Golub 法が精度の点から望ましいことを明らかにした．

終りに，ユニタリ変換による連立一次方程式の解法が広く利用されるようになることを希望する．

参考文献

1) 藤田：経営と経済の数値計算，森北出版(1974)．
2) R. ツルミュール著，瀬川・高市訳：マトリクスの理論と応用，ブレイン図書，(1972)．
3) J. H. Wilkinson: Solution of linear algebraic equations and matrix problems by direct methods, E. Klerer & G. A. Korn, Digital computer user's handbook, McGRAW-HILL, (1967).
4) IBM Application Program, System/360 Scientific Subroutine Package Version III, Programmer's Manual.
5) G. H. Golub: Matrix decomposition and statistical calculation, R. C. Milton & J. A. Nelder, Statistical Computation, Academic Press, (1969).
6) T. L. Jordan: Experiments on error growth associated with some linear least-squares procedures, Mathematics of Computation, 22, (1968).
7) 平野：統計計算法に関する考察，情報処理学会第16回大会，(1975)．

(昭和52年 1 月 8 日受　付)
(昭和52年 5 月13日再受付)