



固有方程式数値解法プログラムのテスト方式*

磯本 征雄** 後藤 米子**

Abstract

Up to the present, a number of programs have been developed for numerical calculation of an eigen value equation. Some of those have been used as a program library in a computer system. On the other hand, there are few certified methods how to test the reliability of such a program for numerical calculations.

In this paper, we show a test method for the reliability of a program for an eigen value equation with real symmetric matrices. The test method can be carried out apart from the detailed algorithm in a tested program. And three dimensional matrices are used. Then it is very simple and convenient to try the test.

1. はじめに

大型電子計算機の進歩と共に、電子計算機を利用した数値計算アルゴリズムの開発・改良が進められ、数値計算のおこなわれる機会も多くなった。同時に数値計算アルゴリズムをプログラム化した際の、これらプログラムの信頼性をテストすることの重要性についても既に論議の対象になっている¹⁾。しかし、具体的なテスト方式の定式化については未解決のまま残されている部分が多い。

プログラム信頼性のテスト方式は、次の点が満たされることが望ましいと考える。

- 1) テスト結果についての評価事項が明確である。
- 2) 正確な固有値・固有ベクトルの知れたテスト行列を適宜に生成することができる。
- 3) 機械的かつ系統的におこなえる。
- 4) 簡単かつ容易である。

これらを満足する数値計算プログラムの信頼性テスト方式として、連立一次方程式の数値解法については既に提案されている²⁾。これにならって、ここでは上記 1)~4) を達成目標として、実対称行列に対する固

有方程式数値解法のプログラムの信頼性テスト方式を定式化する。なお、テストの最終結果において、数値解誤差の一般的な定量的特徴が分るよう工夫した。

固有方程式の数値解法アルゴリズムについては、これまでに多くの文献で解説されている^{3), 4)}。しかし、これらのアルゴリズムの信頼性テスト方式については、テスト・データ用の行列の提案⁵⁾がなされているにすぎない。しかも、テスト結果の評価事項、及び使用上の可能性の網羅という点では、これまでのように単にテスト用の行列のつくり方を示すのみでは不十分である。

この論文では、すべての固有ベクトルと固有値の知れたテスト用行列 A を機械的かつ系統的につくり、この行列 A をテストされるべき数値解法アルゴリズムで解き、その結果得た数値解の誤差を解析することにより、アルゴリズムのもつ特徴を知るテスト方法を示す。ここで示す方法によれば、例えば固有値の大きさに大差がある場合とか、縮退の近傍である等の望みの状況を任意に作り出すことにより、それらの状況下におけるプログラム数値解誤差の特徴を知ることができる。同時に、その状況下での数値解誤差がどの程度 unavoidable のものであるかも知ることができる。また第 2 章の論議で、テストは 3×3 次元行列 A でおこなえば十分であることがわかる。故に前記 1) と 4) が満たされる。

* Test Method of a Computer Program for Eigen Value Equations by Yukuo ISOMOTO and Yoneko GOTO (Osaka University Computation Center)

** 大阪大学大型計算機センター

もし、実対称行列の固有値及び固有ベクトルを一般的な関数形式で表現できたならば、実対称行列の固有値・固有ベクトルのすべてを機械的に網羅することは容易である。この与えられた固有値及び固有ベクトルから実対称行列を生成し、この行列をテスト・データ用行列として使うことができる。これについては、第3章で論議する。

ここで示すテスト方式は、具体的なアルゴリズム(プログラム)の信頼性テストの場合において、その実用性の面でも有効である。特に、テストのために要する計算機利用時間は、大次元行列をテスト・データとする場合に比較して、はるかに短時間ですむ。但し、それはテストの手順及び最終結果の整理方法にも関連する。これらの点については、具体例とともに、第4章において述べる。

2. 固有方程式とその近似解

今、 $n \times n$ 次元の実対称行列 A を考える。行列 A の固有方程式は一般に次式で表わされる。

$$A\bar{x} = \lambda\bar{x} \quad (2.1)$$

\bar{x} 及び λ は各々方程式 (2.1) を満たす固有ベクトルと固有値であり、これらは (\bar{x}_j, λ_j) , $j=1, 2, \dots, i, \dots, n$ と n 組存在する。ここでは、プログラムのテストを目的としていることから、行列 A に対する n 組の固有ベクトルと固有値はいずれも正確に知られているものとする。これについては、次節で論ずる。

ここで、 (\bar{x}_i, λ_i) に注目し、これに対する数値計算の結果得た近似解を (\bar{x}_i', λ_i') とする。 (\bar{x}_i', λ_i') と (\bar{x}_i, λ_i) は、次式で関係づけることができる。

$$\bar{x}_i' = (1 - \delta_i)\bar{x}_i + \delta_{\perp} \sum_{j \neq i}^n \alpha_j \bar{x}_j \quad (2.2)$$

$$\lambda_i' = \lambda_i + \delta\lambda_i \quad (2.3)$$

δ_i は誤差の \bar{x}_i 成分を与える。 δ_{\perp} は誤差の \bar{x}_i に直交する成分を与える。 α_j は \bar{x}_i 成分以外の各成分 \bar{x}_j が誤差ベクトルに含まれる割合を与える。 $\delta\lambda_i$ は固有値 λ_i' の誤差である。

以下で δ_{\perp} , δ_i 及び α_j を得るための方法を示す。

式 (2.2) の両辺とベクトル \bar{x}_j の内積をとることに、次の関係を得る。

$$\delta_{\perp} \alpha_j = \langle \bar{x}_j, \bar{x}_i' \rangle, \quad i \neq j \quad (2.4)$$

但し $\langle \bar{x}_j, \bar{x}_i' \rangle$ はベクトル \bar{x}_j と \bar{x}_i' の内積である。今、次式を仮定する。

$$\sum_{j \neq i}^n \alpha_j^2 = 1 \quad (2.5)$$

式 (2.5) は、固有ベクトルの正規直交性及びベクトル $\sum_{j \neq i}^n \alpha_j \bar{x}_j$ を 1 に正規化するための条件より得られる。式 (2.4) と (2.5) を用いれば、次式を得る。

$$\delta_{\perp}^2 = \sum_{j \neq i}^n \delta_{\perp}^2 \alpha_j^2 = \sum_{j \neq i}^n \langle \bar{x}_j, \bar{x}_i' \rangle^2$$

故に、次の結果を得る。

$$\delta_{\perp} = \sqrt{\sum_{j \neq i}^n \langle \bar{x}_j, \bar{x}_i' \rangle^2} \quad (2.6)$$

$$\alpha_j = \langle \bar{x}_j, \bar{x}_i' \rangle / \delta_{\perp} \quad (2.7)$$

今、 \bar{x}_i' に対する誤差ベクトル $\delta\bar{x}_i$ を次式で与える。

$$\delta\bar{x}_i = \bar{x}_i' - \bar{x}_i$$

ベクトル \bar{x}_i' に式 (2.2) を代入することにより、次の関係を得る。

$$|\delta\bar{x}_i|^2 = \delta_i^2 + \delta_{\perp}^2$$

一方、式 (2.2) 両辺の各々の内積をつくることにより次式を得る。

$$\langle \bar{x}_i', \bar{x}_i' \rangle = (1 - \delta_i)^2 + \delta_{\perp}^2$$

これら 2 式より δ_i について、次の結果を得る。

$$\delta_i = \frac{1}{2} (|\delta\bar{x}_i|^2 - \langle \bar{x}_i', \bar{x}_i' \rangle + 1) \quad (2.8)$$

以上、 δ_i , δ_{\perp} , α_j 及び $\delta\lambda_i$ を得ることにより、誤差の内積を定量的に知ることができる。

一般にデジタル計算機で数値計算をおこなう場合、すべての変数または定数に相対誤差 Δ が含まれていると考えた方がよい。但し、 Δ の大きさは計算機に依存する。式 (2.1) を数値計算により解く場合、ベクトル $A\bar{x}_i'$ と $\lambda_i'\bar{x}_i'$ の各々の長さは相対誤差 Δ の範囲で等しいであろう。また、ベクトル $A\bar{x}_i'$ と $\lambda_i'\bar{x}_i'$ のなす角度 Ω は、相対誤差 Δ の範囲で 0 に等しいであろう。

ベクトル $A\bar{x}_i'$ の長さ $\|A\bar{x}_i'\|$ 及び $\lambda_i'\bar{x}_i'$ の長さ $\|\lambda_i'\bar{x}_i'\|$ は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \|A\bar{x}_i'\| &= \sqrt{\langle \bar{x}_i', A^2 \bar{x}_i' \rangle} \\ &= \sqrt{(1 - \delta_i)^2 \lambda_i^2 + \delta_{\perp}^2 \sum_{j \neq i}^n \alpha_j^2 \lambda_j^2} \end{aligned}$$

$$\|\lambda_i'\bar{x}_i'\| = \sqrt{\lambda_i'^2 \langle \bar{x}_i', \bar{x}_i' \rangle}$$

固有ベクトル \bar{x}_i' に関して、ベクトル $\|A\bar{x}_i'\|$ と $\|\lambda_i'\bar{x}_i'\|$ の間の等しさの精度を見るため次の量 f を定義する。

$$f = \left| \sqrt{(1 - \delta_i)^2 \lambda_i^2 + \delta_{\perp}^2 \sum_{j \neq i}^n \alpha_j^2 \lambda_j^2} - \sqrt{\lambda_i'^2 \langle \bar{x}_i', \bar{x}_i' \rangle} \right| / |\lambda_{\max}| \quad (2.9)$$

ここで、 λ_{\max} はテスト行列 A の固有値の内の絶対値最大のものである。すなわち f は、行列 A にかかわる最も長いベクトルを基準に見た相対誤差の目安を与える。もし解法が、計算機の性能の範囲内で理想的にすすめられているならば、次式が成立つ。

$$f \leq A \quad (2.10)$$

ベクトル $A\bar{x}_i'$ と $\lambda_i'\bar{x}_i'$ のなす角 Ω の方向余弦は、次式で与えられる。

$$\cos \Omega = \frac{\lambda_i' \langle \bar{x}_i' | A \bar{x}_i' \rangle}{\sqrt{\lambda_i'^2 \langle \bar{x}_i' | \bar{x}_i' \rangle \langle \bar{x}_i' | A^2 \bar{x}_i' \rangle}}$$

$$\frac{\lambda_i'}{|\lambda_i'|} = \frac{(1-\delta_i)^2 \lambda_i + \delta_i^2 \sum_{j \neq i}^n \alpha_j^2 \lambda_j}{\sqrt{\langle \bar{x}_i' | \bar{x}_i' \rangle \left[(1-\delta_i)^2 \lambda_i^2 + \delta_i^2 \sum_{j \neq i}^n \alpha_j^2 \lambda_j^2 \right]}} \quad (2.11)$$

もし解法が、計算機の性能の範囲内で理想的にすすめられているならば、次式が成立つ。

$$0 \leq |1 - \cos \Omega| \leq |1 - \cos A| \quad (2.12)$$

さて、数値解法により得た式 (2.1) の近似解 (\bar{x}_i' , λ_i') は、次の近似式を満す。

$$A \bar{x}_i' \cong \lambda_i' \bar{x}_i' \quad (2.13)$$

式 (2.9) の f は、式 (2.13) 両辺のベクトルの長さの差異の程度を示す。また、式 (2.11) の $\cos \Omega$ は、式 (2.13) 両辺のベクトルの方向の差異の程度を示す。すなわち、 f 及び $\cos \Omega$ は、元の方程式 (2.1) に対する近似式 (2.13) の満足される程度を示す。

真の解 (\bar{x}_i, λ_i) と近似解 (\bar{x}_i', λ_i') との差異を与える $\delta_i, \delta_{\lambda_i}, |\delta \bar{x}_i|$ 及び $\delta \lambda_i$ の値はテスト行列 A の性質 (固有値の値等) に依存する。これに反して、 f 及び $\cos \Omega$ の値は、プログラムの数値解法が相対誤差 A の精度内で理想的にすすめられているならば、 A のみに依存し、テスト行列 A の性質 (固有値の値等) には依存しない。すなわち、 f 及び $\cos \Omega$ は、解法プログラムが近似解を得る過程で如何程に理想的な解法手順を取ったかを知る手掛りを与える。

さて、 $\delta \lambda_i, |\delta \bar{x}_i|, \delta_i, \delta_{\lambda_i}, \alpha_j, f$ 及び $\cos \Omega$ 等は、これらを単独に孤立した状態で見ただけでは意味がない。固有値 λ_i 及び固有ベクトル \bar{x}_i を相互に独立した因子とみなして、これらの変化に対する依存性を系統的に調べることに意味がある。すなわち、誤差の特徴を示す上記の量が、固有値及び固有ベクトルの変化に対して如何なる依存性をもつかを系統的に調べる。

一方、注目している固有値 λ_i について、次の4状況が考えられる。

- i) λ_i は最小固有値である。
- ii) λ_i は最大固有値である。
- iii) λ_i は最大または最小のいずれでもない固有値である。
- iv) λ_i は他の固有値と縮退の関係にある。

状況 iii) は、固有値 λ_i がこれ以外の他の固有値によって上と下の両側から挟まれている状態である。状況 iv) における状態では、縮退固有値相互間の固有ベクトルの直交性は一義的には定められない。今、 $\lambda_i = \lambda_j$ ($i \neq j$) を考える。この時、近似解 \bar{x}_i' と \bar{x}_j' の直交性は保証されない。式 (2.2) に即して言うならば、 \bar{x}_i の近似解 \bar{x}_i' はこれと縮退している固有値 λ_j に対する固有ベクトル \bar{x}_j の成分を多く含む。すなわち、式 (2.2) で $\delta_{\lambda_i} \alpha_j$ の値が相当に大きくなる。この傾向は、縮退近傍においても見ることができる。言い換えるならば、 \bar{x}_i と \bar{x}_j の数値解 \bar{x}_i' と \bar{x}_j' の中には、 \bar{x}_i と \bar{x}_j の両成分をほぼ同程度に含み得る。このように、縮退の状態については $\delta_{\lambda_i} \alpha_j$ を見ることによりその状況を知ることができる。以上のように、固有値の状況について見る限りでは、 3×3 次元行列 A (3つの固有値) で調べることにより、その可能な状況の特徴について知ることができる。

固有ベクトルは正規直交性という性質をもつ。この性質は、次元数に無関係である。但し、縮退したものの間の直交性については上述のとおりである。したがって、ここでも3次元より大きな行列でテストしなければならない積極的理由はない。

これらの理由及びプログラム・テストの簡単かつ容易さのためには、 3×3 次元行列 A を用いたテスト方式で十分である。但し、このようなテストにより知り得ることは、行列 A の数学的特徴と近似解誤差の関係である。大次元行列において特に問題となる丸め誤差の累積効果については、誤差が累積される以前の個々に独立した状態での、個別の誤差の情報を与えることになるであろう。

3. 固有方程式テスト・データ用の行列

第2章に述べた理由により、プログラム信頼性テストは 3×3 次元行列 A を使っておこなう。実対称の 3×3 次元行列 A に対する固有値はすべて実数である⁶⁾。また、この場合、固有ベクトルについても実ベクトルを取ることができる⁶⁾。固有値 λ_1, λ_2 及び λ_3 を対角要素にもつ対角行列 A を次式で与える。

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

固有値 λ_1, λ_2 及び λ_3 に対応する固有ベクトル \bar{x}_1, \bar{x}_2 及び \bar{x}_3 を列ベクトルとして、これらよりつくられる正規直交行列を X とする。3次元実空間において、行列 X は一般に次式で与えられる⁷⁾。

$$X = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ -\cos \theta \cos \varphi \sin \psi - \sin \varphi \cos \psi \\ \sin \theta \cos \varphi \\ \cos \theta \sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \sin \psi \\ -\cos \theta \sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \sin \psi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ -\sin \theta \sin \psi \\ \sin \theta \sin \psi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

ここで、 (φ, θ, ψ) はオイラー角である。

式 (3.1) 及び (3.2) を用いることにより、方程式 (2.1) は次式で書き替えることができる。

$$A \cdot X = X \cdot A \quad (3.3)$$

さらに、行列 X の正規直交性により、式 (3.3) は次式に変形できる。

$$A = X \cdot A \cdot X^T \quad (3.4)$$

式 (3.4) は、固有値 (A) 及び固有ベクトル (X) を与えて、これら固有値及び固有ベクトルを解とする実対称行列 A を生成するための式である。

行列 A は、6独立変数 (φ, θ, ψ) 及び $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ に依存する。しかし、ここでのテスト目的から言って、これら6変数は必ずしも独立であると考えする必要はない。固有値については、第1にそれらの大きさの順序が重要である。第2に、相対誤差を議論する場合、行列 A の行列要素は相対的大きさのみが問題である。この2条件より、固有値についてはそれらの内の1つの変化にのみ注目すれば十分である。1固有ベクトルに注目するとき、その特徴はその要素の相対的大きさの比としてとらえることができる。例えば、要素の1つに零があるとか、すべての要素がほぼ同じ大きさである等の状況として把握することができる。したがって (φ, θ, ψ) の3変数は、必ずしも独立ではない。このように、状況設定による条件づけによって、自由な独立変数を少くできる。具体的方法については次章で述べる。

4. 固有方程式プログラムのテスト実施方法

テストにおける評価事項については、第2章で述べ

た。また、テストのための例題となるべき固有ベクトル、固有値及び行列の生成方法については、第3章で述べた。これにより、適宜のテスト用実対称行列生成のための道具立てができた。この章では、 3×3 次元行列 A を用いて、機械的かつ系統的にテストを実施するための具体的方法と手順について述べる。

固有方程式数値解法プログラムのテストは、実対称行列のすべての状況について網羅されることが望ましい。しかし、すべての状況を尽すことは、容易でないと同時に実用面から見て能率的ではない。むしろ、実際にプログラムが使用される状況を具体的に想定して、この状況でのプログラムの振舞いを集中的にテストするほうが実用的である。ここで言う具体的状況とは、例えば固有値の大きさに差がある場合とか、あるいは縮退に近い状況にあるとか等のことである。

第3章に示したように、正確な固有値及び固有ベクトルの知れたテスト・データ用の行列 A を生成することは容易である。したがって我々は固有値または固有ベクトルの系統的変化とそれにとまらぬ数値解誤差の変化を容易に調べることができる。固有値については、式 (3.1) において、 λ_1, λ_2 及び λ_3 をテストしたい状況の近傍に設定する。これら3固有値の内の1つ λ_1 をテストしたい状況下の実数の範囲で系統的に変化させる。これにより固有値に関する系統的変化を操作する。固有ベクトルについては、式 (3.2) において、まずベクトル \bar{x}_1, \bar{x}_2 及び \bar{x}_3 をテストしたい状況の近傍に設定する。この時のオイラー角 (φ, θ, ψ) は一義的に定まる。次に3固有ベクトルの内の1つ \bar{x}_1 を望みの方向に向って、適当な条件を付けて変化させる。この時のパラメータ (φ, θ, ψ) の自由度は1と考えて良い。これにより、固有ベクトルの系統的変化は操作される。

テスト結果を整理する場合、 $\lambda_1, \varphi, \theta$ 及び ψ を独立変数として、 $|\delta \bar{x}_1|, \delta \lambda_1, \delta \theta_1, \delta \psi_1, \alpha_j (j=2,3), f$ および $(1 - \cos \Omega)$ をこれら独立変数に依存した関数値とみなすことができる。これらの関係を視覚化するためには、いくつかの工夫の方法がある。今の場合、円筒座標を用いて図式化するのが最良であろう。

円筒座標において、円筒の軸方向 (z -軸) に $|\delta \bar{x}_1|, \delta \lambda_1, \delta \theta_1, \delta \psi_1, \alpha_j (j=2,3), f$ 及び $\cos \Omega$ を取る。 z -軸に垂直な平面内の2次元極座標において、動径方向に λ_1 を取り、 z -軸を1周する方向の角度にオイラー角 (φ, θ, ψ) を対応させる。但し、 (φ, θ, ψ) の変化には適当な条件を付して、ちょうど z -軸を1周した時に、

3次元空間の元の位置に戻るよう定める。例えば、 $\varphi \equiv 45^\circ$, $\psi \equiv 45^\circ$ として、 θ を 0° から 360° まで変化させる。この例では、 x -軸を一周する角度としては、 θ そのものを取りることができる。このような図式による立体図形を見ることにより、テストされたプログラムの特徴の把握を容易にする。

次に、プログラムの系統的なテストの手順について述べる。但し、ここでは説明を簡単にし、理解を容易にするために、オイラー角 (φ, θ, ψ) を固定し、 λ_1 の変化のみに注目する。(オイラー角への依存性についても同様の手順でテストされる。)

手順 1: テストしたい状況を具体的に設定する。

この時、 X 及び A が与えられる。以下、全テスト過程で λ_2, λ_3 及び X は固定する。

手順 2: λ_1 の変化域及び変化のキザミを定める。

これにより、行列 A の系統的変化の方法が決められる。

手順 3: 行列 X と A より、式 (3.4) に従って行列 A を生成する。

手順 4: 行列 A を被テスト・プログラムに入力し、数値解 \bar{x}_1' と λ_1' を得る。

手順 5: (\bar{x}_1', λ_1') と X 及び A を用いて、 $|\delta \bar{x}_1|$, $\delta \lambda_1, \delta_1, \delta_1, \alpha_2, \alpha_3, f$ 及び $\cos \Omega$ を計算する。

手順 6: 固有値 λ_1 をキザミ幅だけ増加させる。 λ_1 が変化域内であれば、手順 3へ移る。 λ_1 が変化域を越えていれば、テストは終了である。

これらテスト手順により、我々は最終的に固有値の系統的変化と $|\delta \bar{x}_1|, \delta \lambda_1, \delta_1, \delta_1, \alpha_j, f$ 及び $(1 - \cos \Omega)$ の変化を知ることができる。これらの手順を流れ図に示したものが **Fig. 1** である。

ここに示したテスト手順により、実際に既存のプログラム⁸⁾をテストした結果を **Fig. 2** (次頁参照) **a, b** 及び **c** に示した。 X は $(\varphi, \theta, \psi) = (45^\circ, 20^\circ, 45^\circ)$ で与えられる。また、 $\lambda_2 = 1.1$ 及び $\lambda_3 = 0.9$ とした。Fig. 2a, b 及び c において、横軸は λ_1 の値である。今、便宜のため、 $\lambda_1 \leq 0.1$ 及び $\lambda_1 \geq 10$ では対数目盛りとし、 $0.8 \leq \lambda_1 \leq 1.2$ では等間隔の目盛りとした。

Fig. 2a と b の縦軸は対数目盛りである。Fig. 2a には、 $|\delta \bar{x}_1|, \delta_1$ 及び $\sqrt{1 - \cos \Omega}$ が示されている。Fig. 2b には、 $\delta \lambda_1, f$ 及び δ_1 が示されている。Fig. 2c には、 α_2 及び α_3 が示されている。図中で $0.845 \leq \lambda_1 \leq 0.950$ 及び $1.045 \leq \lambda_1 \leq 1.555$ の範囲が空白になっているが、これは縮退のために被テスト・プログ

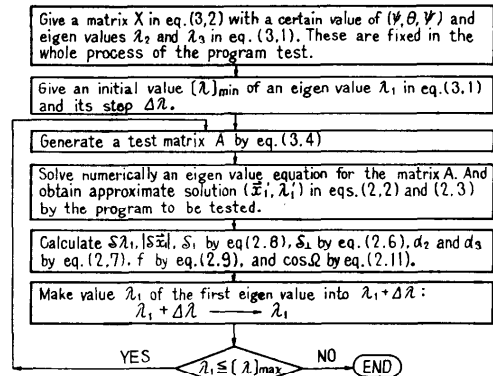


Fig. 1 Test procedure for a program of eigen value equations. The program test is executed in accordance with the flow chart. Before one begins the test, he has to determine a condition for matrices X and A . At the end of the test, the results of the test are illustrated in such graphs as figures 2a, 2b and 2c. Here, $(\lambda)_{\min}$ and $(\lambda)_{\max}$ are values of the boundary for λ_1 .

ラムによる出力解が得られなかった領域である。

さて、ここでテストに使った計算機 (NEAC 2200 シリーズ・モデル 700) は、単精度実数の有効桁数が 10 桁である。Fig. 2a に見るように、 λ_1 が最小固有値の場合、 $|\delta \bar{x}_1|$ 及び δ_1 の値は 10^{-8} の大きさにまでしか下らない。また、縮退近傍での $|\delta \bar{x}_1|$ 及び δ_1 の値は、余りにも大きい (約 10^{-4} の大きさ)。一方、テスト行列に余り依存しないはずの $\sqrt{1 - \cos \Omega}$ の値が、 λ_1 の値に強く依存しており、さらにその大きさが 10^{-10} に比較して 3~4 桁も大きい。(なお、他のプログラムのテスト例では、縮退近傍で $|\delta \bar{x}_1|$ が 10^{-8} 程度に大きくなって、 $\sqrt{1 - \cos \Omega}$ の値は、ほぼ 10^{-10} 程度に安定していた。) この Fig. 2a に示されたテスト結果から見て、固有ベクトル解法手順の不手際さを予測させる。

次に Fig. 2b を見る。ここでも最小固有値に対する $|\delta \lambda_1|$ 及び f の値が、 λ_1 の小さい極限において急速に大きくなっている。また $\lambda_1 \approx 1.1$ の近傍で δ_1 が 10^{-9} 程度に大きくなっている点も目立つ。しかし、 λ_1 が余り小さくない限り (今の場合 $\lambda_1 \geq 0.1$)、最大有効桁数 10 桁に比較して、 λ_1 の精度は大体満足すべき値のようである。この時、 f の値が 10^{-10} 程度にほぼ安定していることから、固有値に対する解法手順の信頼性は保証されるだろう。

Fig. 2c において、 α_2 及び α_3 によって誤差ベクト

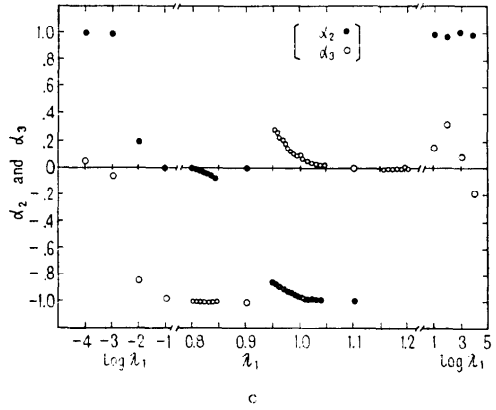
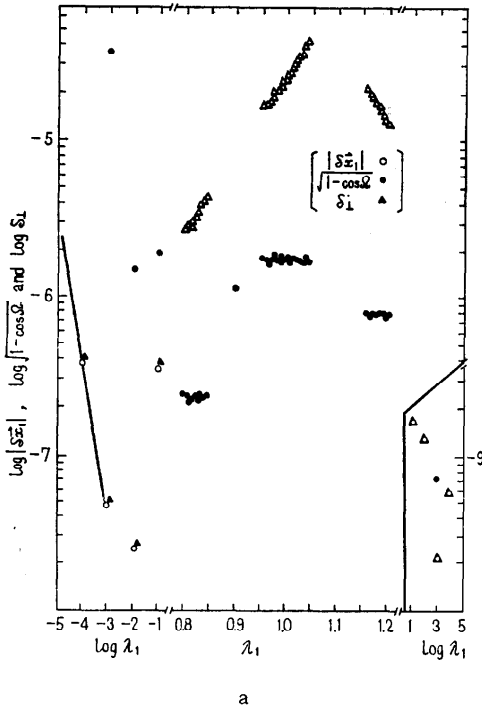
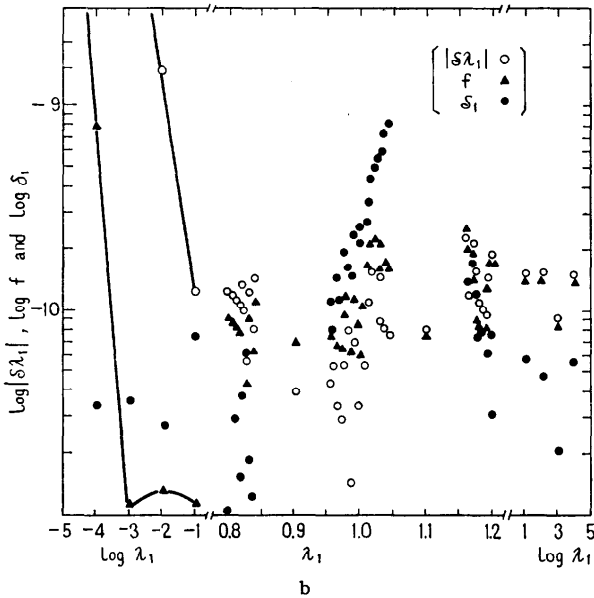


Fig. 2a, 2b and 2c Results of the test for a sub-program¹⁾. These figures show the errors of approximate solutions (\bar{x}_1', λ_1') with the variation of an eigen value λ_1 . here, $(\varphi, \theta, \psi) = (45^\circ, 20^\circ, 45^\circ)$, $\lambda_2 = 1.1$ and $\lambda_1 = 0.9$. These values are fixed in the whole process of the test. In figure 2a, the values of $|\delta\bar{x}_1|$, $\sqrt{|1-\cos\Omega|}$ and δ_1 are shown. In figure 2b, the values of $|\delta\lambda_1|$, f and δ_1 are shown. Figure 2c shows the values of α_2 and α_3 . In these figures, the horizontal axes give values of the eigen value λ_1 . For $\lambda_1 \leq 0.1$ and $\lambda_1 \geq 10$, the λ_1 is scaled on logarithm. And, for $0.8 \leq \lambda_1 \leq 1.2$, the λ_1 is scaled on equal interval. The vertical axes in figures 2a and 2b are scaled in logarithm.



ル $\delta\bar{x}_1$ の中の \bar{x}_2 及び \bar{x}_3 成分の占める割合を示している。縮退近傍において、 α_2 及び α_3 の大きさが大きく変る点が目立つ。特に注目すべき点は、ベクト

ル \bar{x}_1' の成分中に、縮退関係にあるベクトルの成分を誤差として多く含むことである。この傾向は、縮退近傍へ接近するにつれて徐々に顕著になっている。

以上のテスト結果により、固有方程式プログラムにおける固有値の変化と誤差の関連性を定量的に知ることができる。また、Fig. 2a, b 及び c を見ながら、プログラムの信頼性を具体的に観察することもできる。

5. まとめ

ここに示した固有方程式数値解法プログラムのテスト方法は、プログラム内の詳細なアルゴリズムには全く立入ることなく、単に使用説明書を見るだけでおこなえる。したがって、プログラム開発者以外の者がプログラム・テストを実施する場合に便利である。

また、様々な内容を引き出せることから、プログラム開発者自身が自分のプログラムをテストする場合にも、テスト・データとして用いることができる。

特に、プログラム利用者の立場に立った場合、ここに示したテスト方法で得られる結論は、彼自身がそのプログラムを利用して得るであろう数値解に対する信頼性の目安を与える。例えば、Fig. 2a, b 及び c に見るように、縮退近傍での数値解誤差の特異な状態や、その被テスト・プログラムでは数値解が得られない状況等について、それを直接に図式化して理解可能にすることができる。

このテスト方式は、誤差解析に際して、近似解の内の、注目しているただ1つの解 (\bar{x}_i', λ_i') のみで行うことができる。したがって、行列 A の固有値・固有ベクトルの内の1部分のみを計算するプログラムに対するテストであっても何ら不都合はなく、有効である。特に、この場合には、式 (3.1) の行列 A を与える際に、注目している固有値 λ_1 を第1行目だけでなく、第2、第3行目に置いてテストする必要がある。これは、例えば固有値の大きい方から数個求める場合のテストならば、そのためのテスト行列 A の生成の方法において、上記の自由度が残るからである。この点は、すべての固有値・固有ベクトルを求めるプログラムのテストの場合でも同じである。

また、ここに示したテスト方式は、主として解法アルゴリズムの基本的な点での正しさ及び固有方程式における行列 A の数学的特徴と誤差の関係を調べるためのものである。したがって、特に大次元行列に対して問題となる数値計算の過程で累積してくる丸め誤差の影響については、十分に吟味することはできない。

この丸め誤差の累積の影響については、別の角度から調べる必要がある、現在残された問題である。

ともかく、テストすべき事項とその手法については、ここに示した方法により、第1章に述べた達成目標は成功しているであろう。

参 考 文 献

- 1) W. J. Cody: Program Test Method, pp. 121. edited by William C. Hetzel, Prentice-Hall, Inc., Engelwood, New Jersey, (1972).
- 2) Y. Isomoto, K. Morita: Information Processing in Japan, Vol. 13 (1973), Information processing society of Japan.
- 3) L. E. フラー著, 田中穰二・前田功雄訳: 計算機のための行列算法の基礎, サイエンス社, (1970).
- 4) L. A. パイプス・S. A. ホバネシアン著, 清水留三郎訳: 電算機による行列算法の応用, サイエンス社, (1971).
- 5) C. W. Gear: Math. Comp. 23, pp. 119~125, (1969), R. T. Gregory and D. L. Karney: A collection of matrices for Testing Computational Algorithms, Wiley-Interscience, New York, (1969).
- 6) 佐武一郎: 行列と行列式, 数学選書 1, 裳華房, (1961).
- 7) 山内恭彦: 回転群とその表現, 岩波書店(1973).
- 8) 大阪大学大型計算機センター・ニュース, No. 8, pp. 44~47 (1972).

(昭和50年2月5日受付)

(昭和50年5月19日再受付)