〔研究ノート〕

あるテスト行列について

出　口　洋　三*

§1

試作物ができたとき，それがどの程度実用に耐えることができるかをみるために，その作物の出来具合をいろいろの角度から検討する必要が生じる。

棚を取付けたときは，その上にいくつかの品物を乗せてみる。スピーカのようなものであればマイクを通してうまく音がでるかを調べてみる。スキー競技で使用されるジャンプ台のような大掛りのものであれば，その安全性を確認するために，実際にジャンパーに飛んでもらうといったことになろう。それは，ジャンパー個人の飛行能力をみるのでなく，目的はあくまでもジャンプ台の出来具合の方にあるので，ジャンパーに課せられた条件は，彼自身が競技会で要求されるものとは自ずから異なるものになるであろう。

コンピュータ上で走るプログラムもまた1つの作品であると考えたとき，その完成度を調べるために，我々はほぼ同様の試行実験をそのプログラムに課することになる。

ある特定の目的をコンピュータを使って成し遂げようとする。そのためには，その目的に添った実行可能なプログラムを用意する必要が生じる。1つのプログラムは，通常数多くの副プログラムといわれるもの（いわゆる部品とでもいうべきものに相当する）から成り立っている。そこで副プログラムの各々に対して，それらが信頼できる作品であるか否かの検査が厳しく行われる。そして，これらの部品が，検査のために設けられた関門をひとつひとつくぐり抜けられることを確認し，最後に，全体の流れにそって各データがプログラム単位間を過不足なく，正常に，堅牢に受渡され変換されることを再確認する。

たとえばそれが科学技術計算上よく使用されるプログラムであれば，必要とされる有効桁数まで正しく計算できるかどうか，計算に要する時間が許容の範囲内に収っているかどうか，誤動作の可能性がまったく無いといえるかどうかなどがテストされる。

このようにして，試作品としてのプログラムの信頼性，安全性，妥当性を検討する際に時として必要になるデータがある。これを我々はテスト・データと呼んでいる。

---

* 理学部講師

§ 2

ここでは，科学技術計算のひとつの柱となっている線形計算のある部分で使用されるテスト・データを紹介し，その特質についていくつか述べる。線形計算で扱われるデータは，行列として与えられることが多いので，テストのためのデータをテスト行列という。

いま次のような行列 $A_n=[a_{ij}^{(n)}]$ を考える。

$$a_{1j}^{(n)}=a_{j1}^{(n)}=k\fallingdotseq 0 \quad (i=1,2,\ldots,n)$$

$$a_{ij}^{(n)}=a_{i-1,j}^{(n)}+a_{i,j-1}^{(n)} \quad (i,j=2,3,\ldots,n)$$

$k=1$, $n=6$ のときの A_6 具体形は

$$A_6=[a_{ij}^{(6)}]=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 3 & 6 & 10 & 15 & 21 \\ 1 & 4 & 10 & 20 & 35 & 56 \\ 1 & 5 & 15 & 35 & 70 & 126 \\ 1 & 6 & 21 & 56 & 126 & 252 \end{pmatrix}$$

となる。

この行列 A_n は，k の値，n の値を適当に決めることによって，ある意味で似通った行列をいくつも作ることができる。A_n の各要素を具体的に与える2つの式の中で，後者のものは，順列や組合せの数を数えるときによく現われるパスカルの三角数と実質同じものである。従ってこのようにして得られる行列 A_n を総称してパスカル行列（Pascal's Matrix）と呼んでいる。

n 次のパスカル行列については，次に示されるような興味深い性質をもつことが知れている[注1]。

1° A_n の行列式を $\det A_n$ で表わすとき $\det A_n=k^n$ が成立つ。

2° $|k|\leqq 1$ で，k がある整数の逆数として与えられているとき A_n の逆行列（これを A_n^{-1} で表わす）の全ての要素は整数となる。

A_6 についていえば

$$\det A_6=1$$

であり，

$$A_6^{-1}=[b_{ij}^{(6)}]=\begin{pmatrix} 6 & -15 & 20 & -15 & 6 & -1 \\ -15 & 55 & -85 & 69 & -29 & 5 \\ 20 & -85 & 146 & -127 & 56 & -10 \\ -15 & 69 & -127 & 117 & -54 & 10 \\ 6 & -29 & 56 & -54 & 26 & -5 \\ -1 & 5 & -10 & 10 & -5 & 1 \end{pmatrix}$$

となっている。

性質 1° および 2° は例えば A_n にガウスの消去法を適用し，上三角行列に変形することによって直ちに確められる。

この2つの性質は一目瞭然であり，パスカル行列をテスト行列とするに適しいものといえる。この他にパスカル行列の特徴といったものをもう少しあげてみよう。

3° A_n の各要素を与える部分が，n の値の如何を問わず，非常に簡単な計算によっている。すなわち，A_n を次々と容易に作り出すことができる。

4° $k=1$ のとき，A_n の各要素の中で絶対値最大のものの大きさは，n の増大にも拘わらず，比較的ゆっくりと変化してくれる。実はこの性質は A_n^{-1} についてもあてはまることが数値実験によって示すことができる。

この 3°，4° の性質も，テスト行列の候補としてはある意味で適しいものである。性質 4° において，A_n^{-1} の各要素が k および n の関数として簡単に書き表わすことができるならばこれに越したことはないが，残念ながら一部の要素を除いて，私にはできていない(注2)。

§ 3

ここでは『任意の正方行列の逆行列を求めるプログラムを作れ』といった問題に対して，まったく異なる方法（アルゴリズム）によって作成された2つのプログラムが提示されたとして，その両者の優劣を判定する材料のひとつとして，パスカル行列の逆行列が正確に計算されるかどうかによってみることにしよう。もちろん，2つの方法は，理論的な側面から，そして数値実験的な側面から，できうる限り詳細に比較検討されることが望ましいことは論をまたないが，ここでの目的はテスト行列とアルゴリズムのあいだに横たわる問題の一端を明らかにすることにあるので，この一点に絞って簡単な説明を試みることにする。

まったく異なる2つのアルゴリズムとして，ここでは，ガウスの消去法と分割法(注3)を採りあげる。そして両方法のプログラム化に際し次のような条件を設定する。

設定条件比較表

条件＼方法	ガウス消去法	分割法
◎プログラミング言語	FORTRAN 77	FORTRAN 77
◎変数の型	実数型	整数型
◎変数の精度	標準精度(注4)	標準精度(注5)
◎出力の形式	F13.1	I13

これによって実際にプログラムを作成し，パスカル行列 A_n の逆行列 A_n^{-1} を，n を2から1づつ変化させながら最後は25まで計算を行ってみた。

結果において著しいものはおよそ次のような点にあった。

1°　$n=2$ から $n=14$ までは，両方法の結果はまったく同一である。

2°　$n=15$ になって，両方法の結果に差異が生じる（これ以降の結果はすべて異なる）。$n=15$のときの結果を示すと，

（a）　ガウスの消去法（$n=15$）

$$A_{15}^{-1}=\begin{pmatrix} 12.3 & -69.5 & 235.1 & -529.1\cdots\cdots \\ -69.5 & 539.6 & -2057.1 & 4883.7\cdots\cdots \\ 235.1 & -2057.1 & 8352.9 & -20345.5\cdots\cdots \\ -529.1 & 4883.7 & -20345.6 & 49373.6\cdots\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0.0 & -0.3 & 2.0 & -7.5\cdots\cdots \end{pmatrix}$$

（b）　分割法（$n=15$）

$$A_{15}^{-1}=\begin{pmatrix} 15 & -105 & 455 & -1365\cdots\cdots \\ -105 & 1015 & -5005 & 16107\cdots\cdots \\ 455 & -5005 & 26663 & -90181\cdots\cdots \\ -1356 & 16107 & -90181 & 316251\cdots\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & -14 & 91 & -364\cdots\cdots \end{pmatrix}$$

となっている。

なんという大きな違いであることか。

3°　確かめ算として $A_nA_n^{-1}=I$（単位行列）が成立しているかを調べたが，ガウスの消去法の場合は当然のことながら $n=15$ から崩れてしまうが，分割法の場合 $n=25$ までですなわち最後まで崩れていないことがわかった。

4°　3° によると，分割法の結果は最後まで正しく計算されているようにみえるが，分割法による A_{19}^{-1} の計算結果には，明らかな誤りが検出できる。

5°　$A_n^{-1}=(b_{ij}^{(n)})$ とおくとき，すべてのnに対し $b_{nn}^{(n)}\equiv 1$ が成立つ。

さてこれまで掲げた 1° から 5° の結果を更に仔細に眺めることによって，両方法の差異についてどんな事が明らかになるのであろうか。

まず第一に，ガウスの消去法は実数型標準精度計算であり，分割法は整数型標準精度計算であることに注目すると，有効桁数としては分割法の３分の２程度のガウスの消去法であるが，結果としてより小さなnまでしか正しく逆行列を計算していないように見受けられるのは不思議といえば不思議なことである。しかし，これは，コンピュータ内部の整数や実数の数値表現法がどのようになっているか，そして分割法における逆行列の求解手順はどうか，パスカル行列の逆行列の各要素の

符号が規則的に交互に並んでいることなどを想起すれば，ほぼ正確にその理由が察知できよう。このようにして同程度の有効桁数でもってより精度の高い結果を得ることのできる数値計算法があるらしいことは考究に値する。

次に分割法にあっては，$n=19$ において A_{19}^{-1} の結果は明らかに正しくないと判明しているのに，確かめ算 $A_{19}\cdot A_{19}^{-1}$ の結果がどうして正しい単位行列を与えるのかといった疑問が残る。これについても上にあげたようなことが原因であろうとは考えられるが，判然としない部分もかなりある。

第三に，数値計算の結果を読むことによって，全く別の数学的興味が生ずることがあることがわかった。$A_n^{-1}=(b_{i,j}^{(n)})$ の $b_{n,n}^{(n)}$ 要素がつねに1であることから，パスカル行列の特性として掲げられた $\det A_n=1(k=1)$ や A_n^{-1} の要素がすべて整数値を取るということの別証明が得られること（これは分割法そのものと深く関わっている），またこの導出過程を追うことによって，逆行列の要素がすべて整数値となる新たな行列の作成法に一抹の光明を見出すことができそうであるといった点である。

§ 4

スキーのジャンプ競技におけるテスト・ジャンパー達によって，公式の競技会そのものの内容とは何の関わりを持つものではないが，眼前のジャンプ台が，いままさに競技を行うに値する装置（道具）であることを，衆人の誰れの目にも明らかにするために行われる試技ジャンプは，これは必要な所作であるように思える。

「ソフトウェアの危機」が謳われてからすでに久しい。ソフトウェアの作成と保持に対し多大の関心を持たざるを得ない人々はいま底知れぬ不安の念に懸られている。

1つの作品，1つのプログラムが使用するに値するほどの堅固さと安全性と効能を持っていることを明らかにするために，我々は幾度となくそのテストを継続してゆかねばならないように思う。そして，そのために，それに適しいテスト・データ，テスト行列，テスト関数を充分すぎるほど用意しておかねばならないと感ずるのであるが，いかがなものであろうか。

（注1） Caffrey, John “Another Test Matrix for Determinants and Inverses” Comm ACM 6 (1963), 310.

（注2） $A_n^{-1}=(b_{i,j}^{(n)})$ としたとき

$$b_{1,2}^{(n)}=b_{2,1}^{(n)}=kn(n-1)/2$$

などはわかる。

（注3） 新谷尚義著〝数値計算I〟朝倉書店（基礎数学シリーズ16）

（注4） 本学にある FACOM M-360では 標準精度の実数は32ビットを使って表現され，そのうち仮数部（有効桁数に関わる部分）は24ビットである。これを10進数に換算するとおよそ8ケタ余りとなる。

（注5） FACŌM M-360では，標準精度の整数は32ビットを使って表現される。これを10進数に換算して10ケタ強となる。