

統計解析における線型計算

多 賀 保 志

(1959年6月受付)

Linear Computations in Statistical Analysis

Yasushi Taga

In this report, the development of various methods for linear computations in the last several years is outlined, mainly in relation to the statistical analysis, based on our research for making the best use of the automatic digital relay computer FACOM-128 A in the Institute of Statistical Mathematics. And, at the same time, some appraisals for the methods of computations are made from the stand point of practical utility on the automatic computer. It is to be desired that the readers would try, in case of need, to make up the deficiencies in the details by referring the papers in appendix.

§ 0 Introduction

§ 1 Solving systems of linear equations

§ 2 Inversion of matrices

§ 3 Eigenvalues and eigenvectors of matrices

§ 4 Computing error

Institute of Statistical Mathematics

§ 0. はじめに

この報告においては、統計解析に関連した線型計算の理論と方法に関する最近数年間の発展状況を概観的に記述し、かつ高速自動計算機に対する実用性の観点より各方法の評価を行つてみた。なおこの点に関しては、統計数理研究所に設置されているリレー計算機 FACOM-128 A を利用して、各方法に十分検討を加えた経験にもとずいて結論を出した。要約的に述べられたために、記述の不十分な点もあると思われるが、詳細については、参考文献によつて補われることを希望しておく。

§ 1. 連立一次方程式の解法

連立一次方程式の解法と行列の逆転法については、現在までにさまざまな方法が考案されており、それらに関する文献は非常に多い。G. E. Forsythe はそれらを7つの主要なカテゴリー（くわしくいうと 2 3 項目）に分類する提案を行い、それにもとずいて 1953 年（前半）以前の関係論文・著書を総括的に分類列挙した¹⁾。その分類法にはいくらかの問題点があるけれども、彼の試みは極めて有意義なものであり、この報告の中でもしばしば引用してゆくつもりである。その分類基準について、簡単に説明してみると、

I. 直接法——Gauss 消去法によつて代表されるもので、直接正確な解を目指す方法（そのほか直交ベクトル法, Doolittle 法, Crout 法, Cholesky 法, 三角化法, などがある）。

II. 中間法——共軛勾配法, Lanczos 法など有限回の近似で正確な解に到達する一種の逐次近

似法。

Ⅲ. 間接法——Gauss-Seidel 法によつて代表されるもので、無限回の近似によつて、正確な解には到達できないが、理論的にはいくらかでも精度のよい近似解をうる逐次近似法。

この規準の外、計算過程にふくまれる計算方式が一定か否かによつて、

α. 定常過程——Newton 法, Gauss-Seidel 法にみられる過程。

β. 部分的定常過程——定常過程の所々に加速操作 (たとえば δ^2 -process) が加味される過程。

γ. 非定常過程——無限に多くの計算式が用いられる過程で、毎回異つた多項式近似を用いる方法、毎回サンプル数を変えるモンテ・カルロ法などがこれに属する。

以上、2通りの規準が考えられるが、これらを組合せて (ただし無意味な組合せを除く)、I α, II α, II β, III α, III β, III γ の7つの分類カテゴリーがきめられた。

1.1 直接法

L. Fox は連立一次方程式解法および行列の逆転法に関する代表的な諸方法について、実用的見地よりそれらを要領よくとりまとめて報告している²⁾。とくに、Gauss, Jordan, Doolittle, Crout による消去法が、いずれも係数行列 A の三角行列への分解と考えられ、それら相互の内的連関を明かにした点は、高く評価されてよい。その要旨を簡単に述べてみよう。

連立一次方程式を $Ax=b$ で表わしておく、たとえば Gauss 消去法の場合は、行列 A の左側から (A の対角線より下の部分を消去する) 適当な行列 L をかけて $(LA)x=Lb$ と変形すれば、あとは代入法により比較的簡単に方程式の根が求められる。消去法においては、上の過程の前半 ($A \rightarrow LA=U$) が大切であり、 L は下三角行列、 U は上三角行列となっている。下三角行列の逆行列もまた下三角行列であるから、この消去過程は、実は行列 A を $A=L^{-1}U$ なる2つの三角行列の積に分解する過程と考えてもよい。他の消去法についても、同様な考察ができるから、それらをまとめてみると、

a. Gauss 法 $L_G A = U_G$ 即ち $A = L_G^{-1} U_G$ (L_G は単位下三角行列——対角要素がすべて1の下三角行列)

b. Doolittle 法 $A = L_D U_D$ (L_D は単位下三角行列)

c. Crout 法 $A = L_C U_C$ (U_C は単位上三角行列)

となる。ところで、A. M. Turing によれば³⁾、任意の正方行列 A は、一意的に $A = LDU$ (L, U はそれぞれ単位上三角行列、単位下三角行列、 D は対角行列) として表わされるから、

$A = L(DU)$, L は対角要素がすべて1だが、 DU はそうでない。

$A = (LD)U$, U は対角要素がすべて1だが、 LD はそうでない。

$A = (LD^{\frac{1}{2}})(D^{\frac{1}{2}}U)$, $LD^{\frac{1}{2}}$ も $D^{\frac{1}{2}}U$ も単位三角行列でない。

とかきかえることができる。これらと、上に述べた3方法の場合における A の分解方式と比較すれば、容易に

$$L_G^{-1} = L_D = L_C D^{-1}, U_G = U_D = D U_C$$

なる関係が成立つことが理解される。ただし、Jordan 法では、三角行列への分解を通り越して、いきなり $JA=D$ と変形してしまうから、上記3方法との関連はつかないことになる。

このように、各種の消去法が本質的には係数行列 A の三角行列への分解を基礎としているのであるから、初めからそのような分解を目指した方法を論ずることもできるわけである。

すなわち、 $A=LU$ なる分解を考えると、 $LUx=b$ となる。したがつて、まず上のような A の分解された三角行列 L, U を求め、次に $Ly=b$ をといて補助ベクトル y を求める。最後に $Ux=y$ をといて、解ベクトル x を求めればよい。Doolittle, Dwyer, Waugh と Fox は L を単位三角行列に、Crout と Banachiewicz は U を単位三角行列にえらんでいる⁴⁾。

さらに、対称行列の場合における直交ベクトル法に言及し、この方法も $XAX^T=D$ すなわち $A=X^{-1}D(X^T)^{-1}$ なる分解に相当することを明かにしている。したがつて、一般の分解 $A=$

LDL^T)と比較して、 $X=L^{-1}$ なることがわかる。実際の解法としては、まず $(XAX^T)\alpha=Xb$ をみたすベクトル α を求め、次に $x=X^T\alpha$ を計算すればよい。

また、行列の直交法においては、 $A=LB$, $(BB^T=D)$, なる分解を行うと、元の方程式は $LBx=b$ とかけるから、 $Bx=L^{-1}b$ をうる (実際には A と b に対して L^{-1} を同時に作用させるから B と $L^{-1}b$ が同時にえられる)。 $x=B^T y$ とおけば、上の式は $BB^T y=L^{-1}b$ すなわち $Dy=L^{-1}b$ となるから、容易に $y=D^{-1}L^{-1}b$ がえられる。

以上が Fox の報告の部分的要約であるが、色々と豊富な計算例が詳細に付け加えられており、各方法を具体的に理解し、実際の計算に利用するにも、大変便利にまとめられている。ただ、これらの方法を自動計算機 (automatic computer) に利用する場合、どのような利害得失があるか (演算回数と記録すべき数字の個数および計算精度の比較) についての記述が十分でないことが惜しまれる。とくに、行列の不良度 (condition of matrix) と各消去法による解の精度との関係を明かにすることは、線型計算における主要な課題であり、最近各種の試し行列 (不良度の高い test matrix) の逆転と関連した研究が行われているが、まだ明確な結論に到達していないようである。われわれは、この問題に対して、近く 16 桁演算を行って十分検討を行う予定である。

1・2 間接法 (逐次近似法)

Fox は間接法に属するものとして、単純反復法、Gauss-Seidel 反復法、弛緩法 (Relaxation method) の3つを上げているが、これらはいずれも無限回の反復を行つた時に、その極限として解ベクトルがえられるものであり、Forsythe の分類における $\text{II}\alpha$ 型に含まれる。この外に、Hestenes, Stiefel の共軛勾配法⁵⁾も有限回で正確な解ベクトルに到達する反復法 ($\text{II}\alpha$)に含めた方が適当であろう。簡単にこれらの方法にふれてみよう。

a) 単純反復法

係数行列 A を $A=D+W$ (D は A の対角要素をとって作られる対角行列) にわけ、

$$Dx^{(k+1)}=b-Wx^{(k)} \quad \text{or} \quad x^{(k+1)}=D^{-1}\{b-Wx^{(k)}\}=D^{-1}\left\{I-\sum_{i=1}^k(-WD^{-1})^i\right\}b$$

なる式によつて、逐次的にベクトル $x^{(k)}$ を求めてゆく。実は解ベクトル x は、

$$x=D^{-1}(I+WD^{-1})^{-1}b=D^{-1}\left\{I-\sum_{i=1}^{\infty}(-WD^{-1})^i\right\}b$$

とかけるから、 $x^{(k)}$ が x に収斂するには、 WD^{-1} のすべての固有値の絶対値が1より小さいことが必要である (すなわち、対角要素の絶対値が他の要素のそれより十分大きいことが必要)。

b) Gauss-Seidel 反復法

$A=L+M$ (L は A の対角要素を含む下三角行列、 M は対角要素を含まない上三角行列) のようにわけ、

$$Lx^{(k+1)}=b-Mx^{(k)} \quad \text{or} \quad x^{(k+1)}=L^{-1}(b-Mx^{(k)})=L^{-1}\left\{I-\sum_{i=1}^k(-ML^{-1})^i\right\}b$$

として、ベクトル $x^{(k)}$ を逐次的に求める。解ベクトル x は、

$$x=L^{-1}\left\{I-\sum_{i=1}^{\infty}(-ML^{-1})^i\right\}b$$

とかけるから、 $x^{(k)}$ が x に収斂するためには、 ML^{-1} の固有値の絶対値がすべて1より小さいことが必要である。

c) 弛緩法

この方法にはさまざまな形があり、要約して述べることはむづかしい (残差のとり方によつて方法が異なる)。それだけに応用範囲が広く、使用するに当つては相当の熟練を必要とする⁶⁾。

d) 共軛勾配法 (method of conjugate gradients)

考え方としては直交ベクトル法に似た所がある。 A 直交*するベクトルの系列 p^0, p_1, p_2, \dots を

* $p_i^T A p_j = 0$ なるとき、ベクトル p_i と p_j は A 直交する (互に共軛) という。

逐次的に作つてゆき、それらの一次結合として解 h を求める。計算のルーティン*を示すと、

1° 任意のベクトル x_0 を与え、 $p_0=r_0=b-Ax_0$ を求める。

2° 一般に、第 i 近似解 x_i がすでに求められたとき、 $(i+1)$ 番目の近似解 x_{i+1} と方向ベクトル p_{i+1} を次のように定める：

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + a_i p_i, & a_i &= |r_i|^2 / p_i^T A p_i \\ r_{i+1} &= r_i - a_i A p_i, & (r_i \text{ は残差 } b - A x_i \text{ のこと}) \\ p_{i+1} &= r_{i+1} + b_i p_i, & b_i &= |r_{i+1}|^2 / |r_i|^2 \end{aligned}$$

3° 第 m 近似を行つたとき、 $r_m=0$ となれば ($m \leq n$)、 x_m が求める解となる。

さて、われわれの経験によると、単純反復法あるいは Gauss-Seidal 法は、よほど行列の A 状態がよい（対角要素が非対角要素よりずっと大きい）場合以外は、収斂が遅いのであまり実用的とはいえない（収斂の速さを予め知ることがむづかしい）。しかし、対角線に近い要素は 0 でなく他の要素は 0 というような帯状行列に対しては有効であろうと思われる。また、必要に応じて解の精度を適当に高めることができる点に特長がある。一般に、単純反復法より Gauss-Seidel 法の方が収斂は早い、後者の収斂条件が複雑なため、ある種の行列については、かえつて収斂が悪くなることもある。なお、H. Hotelling は単純反復法を加速する方法を試みている⁷⁾。共軛勾配法は、有限回の逐次近似によつて、正確な解に到達しうること、係数行列が任意（もちろん非特異）なものに適用できること、消去法に比して解の精度がよいことにすぐれた特色がある。しかし、計算過程がやや複雑で、消去法の数倍の計算時間を必要とし、状態のよい行列については解の精度が消去法と余り変わらないこと（状態の悪い行列に対してどの位精度がよくなるかについては一般的な結論は出ていない**）、などの問題があり、なお検討の必要があろう。

一般に、方程式 $Ax=b$ が与えられたとき、どの計算方法を適用したらよいであろうか。 A が特殊な形をしているため、それに適した方法が一見して明かな場合は別として、まず消去法（ A が非対称ならば Gauss 法、対称ならば Doohittle 法あるいは Crout 法）を用いて解 x_0 を求め、残差 $r=b-Ax$ を吟味してみる。 r が十分小ならば、 x_0 を求める解としてよいし、 r の大きさが必要精度を満足しないときは、さらに逐次近似法を利用して近似解 x_0 の精度を高めたり、あらためて計算過程における数値の桁数をふやして消去法を用いるなど適当な対策を考えることが大切である。

§ 2. 行列の逆転

A の逆行列 A^{-1} を求める過程は、 n 個の単位ベクトル e_1, e_2, \dots, e_n を常数項にもつ n 組の方程式 $Ax=e_j$ ($j=1, 2, \dots, n$) を解くことと同じであるから、§1 で述べた各種の方法がそのまま適用できる。しかし、 n 個の方程式の係数行列がすべて同じであるため、消去法によると n 個の解が同時に求められ、その手順も 1 個の方程式をとく場合とあまり変わらないから（手数は約 3 倍になるが）、間接法に比してずっと有利である。とくに Aitken 法は計算過がすべて前進的に行われるので、ルーティンがきわめて単純となり、自動計算機に適した方法といえる⁹⁾。そこで、それ以外の方法で実用性のあるものを眺めてみよう。

2・1 逆行列を求める方法

a) 三角行列分解法——§1 で述べた三角行列の分解を利用して、行列の逆転が比較的簡単に行える。例えば、 $A=L_G^{-1}U_G$ であつたから、 $A^{-1}=U_G^{-1}L_G$ となり、 A^{-1} が容易に求められる（三角行列の逆転は簡単である）。とくに、 A が対称なる場合は、 $A=BB^T$ ($B=LD^{\frac{1}{2}}$) となるから、 $A^{-1}=(B^{-1})^T B^{-1}$ を求めることは更に簡単になる。

b) Doyle 法——やはり、三角行列分解を利用しているのであるが、行列の対称性を巧みに利用

* A が対称の場合のルーティンであり、非対称のときは $A^T Ax=A^T b$ と変形すればよい。

** 共軛勾配法における誤差伝播については、宇野利雄氏の研究がある（文献 8 参照）。

して、逆転操作を一切必要としない点がすぐれた特色である¹⁰⁾。

それによると、Gauss の消去過程を表わす行列を、 U_1, U_2, \dots, U_n とし、それらの積を $U = U_1 U_2 \dots U_n$ で表わすと、 $U^T A U = D$ となるから、 $A^{-1} = U D^{-1} U^T$ とかける。実際の計算は次の順序で行われる：

1° 消去法の要領で U_i, D の要素 $u_{ij} (j=i+1, \dots, n)$, d_i を求める。ただし、 $u_{ij} = -a_{ij}^{(i)} / a_{ii}^{(i)}$, $a_{jk}^{(i+1)} = a_{jk}^{(i)} - \frac{a_{ik}^{(i)} a_{ji}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}} (j, k=i+1, i+2, \dots, n)$, U_i の対角要素はすべて 1, その他の要素はすべて 0 とする。

2° u_{ij} を利用して、 $U = U_1 U_2 \dots U_n$ の要素 η_{ij} を求める。

3° $A^{-1} = U D^{-1} U^T$ を求める。

ところでこの方法の特色として、必要とする記憶装置の数が少いこと ($\frac{1}{2} n(n+1) + n + 1$ でよい)、有限ヒルベルト行列のように不良度の高い行列を逆転してもかなり精度のよいものがえられることであろう (浮動小数点 9 桁で計算すると $n=4$ の時 5 桁まで正しい逆行列と一致する)。また計算時間もかなり早い。

a) 逐次近似法

まず、 A の近似逆行列 C_0 を求め、

$$\begin{aligned} I - A C_i &= D_i \\ C_{i+1} &= C_i + C_i D_i \end{aligned}$$

なる方式によつて、逐次により精密な近似逆行列の系列 $\{C_i\}$ を求めてゆく方法である。 C_0 としては、単位行列 I をとつてもよいし、 A の対角要素の絶対値が他に比して大きいときは、 $C_0 = (a_{ij}^{-1} \delta_{ij})$ としてもよい。この方法の特色は、逆行列の計算精度を適当に高めることができることにあるが、その反面では 1 回の反復に含まれる演算数が多いため、よほど収斂の早い行列 (対角要素が他に比して大きい) でないと、計算時間が長くなり、ルーティンもやや複雑となるのが欠点である。

一般的にいって、非対称行列の逆転には、Aitken の消去法、対称行列には Doolittle 法または Doyle 法を用いるのが適当である。いわゆる試し行列 (test matrix) の逆転や逆行列の精度については、§4 で述べることにする。

2・2 投入産出分析への応用

投入係数行列 L (Leontief 行列) から作られる行列 $A = I - L$ の逆行列を求めることが、投入産出分析においては重要な一課題となつている。数値計算の立場からみると、行列 A の次数が大きいに、記憶容量の許す範囲内で計算時間を最短にする計算方式の選定や逆行列の精度の測定など様々な問題が起るのであり、それらの問題を効果的に処理する方法の研究が重要な狙いとなるわけである。われわれは、通産省および経済企画庁において作成された種々のレオンチェフ行列の逆転を行つたが、その結果を要約してみると次の通りである^{11), 12)}。

1) 計算誤差——レオンチェフ行列の性質が比較的よいため、消去法・逐次近似法・共軛勾配法のいずれを用いても、計算誤差の大きさは同じ程度である。たとえば、60 次の行列を逆転した場合、残差行列 $A^{-1} A - I$ の各要素の order は、 10^{-9} 程度 (最大で 10^{-8}) で、 $n=10 \sim 30$ の場合と比べても大体同じ程度であつた。

2) 計算時間——9 次の行列を逆転するに要した時間を比較すると (準備時間を含まない machine time), 消去法で 9 分, 共軛勾配法 360 分, 逐次近似法 240 分となり, 問題なく消去法によるのが最も早い。消去法によつて $n=20, 32, 60$ なる 3 種類の行列を逆転してみたが, その時の所要時間は, それぞれ 80 分, 330 分, 2400 分で, ほぼ n^3 に比例する。

3) 計算方式の選定——20 次以上の行列の逆転を行うには, かなりの計算時間がかかるから, 消去法を採用せざるをえなかつた。また, プログラミング単純化するためには, Aitken 法が望ましい。

§ 3. 行列の固有値と固有ベクトル

統計解析においては、実数を係数とする正方行列 A についての固有方程式 $Ax = \lambda x$ をみたすスカラー λ (A の固有値) と列ベクトル x (λ に対応する A の固有ベクトル) を求める必要がしばしばある。たとえば、因子分析法においては対称行列、マルコフ過程 (Markov chain) では非対称行列の固有値と固有ベクトルが問題となる。また、多次元解析におけるカノニカル相関係数、あるいは数量化法における数値計算に際しては、いずれも、 $Hx = \lambda Fx$ (H, F は対称行列) なる形の方程式をといて、絶対値最大の固有値 λ_1 と固有ベクトル u_1 を求めることが必要となる^{13), 14)}。さて、これらの方程式をみたす 0 でない解ベクトルが存在するためには、よく知られているように、 $|A - \lambda I| = 0$ または $|H - \lambda F| = 0$ なる関係をみたすことが必要十分である。この関係式の左辺を展開すれば、 λ についての n 次の代数方程式となるから、これをとけば n 個の根 (A または H の固有値) $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ がえられるわけである。これが最も古典的な方法であり、行列式の展開には、trece 法・間接法・Frame 法・Lanczos 法など様々な方法が考えられている。しかし、いずれにしてもその展開にかなりの手間を必要とし、さらにえられた代数方程式が 5 次以上になると、その根を求めることが非常に複雑である。その上、展開過程において方程式の係数に丸めの誤差が入り、根の精度に悪い影響を与える。以上のような理由で、 $n \leq 4$ なる場合以外、この方法は実用的とはいえない。とくに、自動計算機を利用する場合、代数方程式をとく方法が、場合によって一定しないから、計算途中で人による判断が必要となり、計算機を使つただけの効果が上らない点も考慮すべきであろう。これに反して、累乘法 (Power method) は計算方法が単純で計算速度が早いので自動計算機に向いている。これも古くから利用されてきた方法で、 n 個の固有値の中で絶対値の最大なものを求めるのには便利であるが、すべての固有値がほしい時にはあまり向いていない。また、非対称行列の固有値は必ずしも実数とは限らないが、複素数の固有値を累乘法で求めることはできない。それを若干修正すれば、理論的には複素数の固有値も求められるが¹⁵⁾、一般に収斂がきわめておそく、あまり実用的とはいえない。廻転法 (rotation method) は Jacobi によつて見出された方法であるが、きわめて単純な行列の変換の繰返し過程で、すべての固有値と固有ベクトルが同時に求められるので、自動計算機の発達につれて、再びその利用価値が有出された¹⁶⁾。さらに、これを非エルミートの複素数行列の場合に拡張した方法が最近発表された¹⁷⁾。これらはいずれも因子分析法やカノニカル相関係数の計算に向いている¹⁸⁾。また $Hx = \lambda Fx$ をとくには、 $F^{-1}Hx = \lambda x$ と変形し、行列 $F^{-1}H$ (これは非対称!) について累乘法を適用してもよいが、そのような変形を行わずに、逐次近次法により固有値と固有ベクトルを求める方法も考えられている¹⁹⁾。

Forsythe の分類法を参照すると、固有方程式を代数方程式に変形して固有値を求める方法が直接法にあたり、累乘法や廻転法は間接法に属すると考えてよい。連立一次方程式の場合と異なり、固有値問題では間接法が実用的であり、自動計算機向きでもある。以下、後者について概観してみたい。

3.1 固有値と固有ベクトルを求める諸方法

a) 累乘法 (Power method)

行列 A の固有値を絶対値の大ききの順に並べたものを $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ とする ($|\lambda_k| \geq |\lambda_{k+1}|$)。 λ_i に対応する固有ベクトルを u_i とすれば、 $Au_i = \lambda_i u_i$ となることは明かである。 A が対称ならば、 λ_i は実数となり、異なる固有値 λ_i, λ_j に対応する固有ベクトル u_i, u_j は直交することはよく知られている。 A が非対称ならば、 λ_i に対応する固有ベクトルが 2 つあり、

$$\begin{aligned} Au_i &= \lambda_i u_i, & v_i^T A &= \lambda_i v_i^T \\ (u_i, v_j) &= 0, & \lambda_i &\neq \lambda_j \end{aligned}$$

なる関係をみたす。累乘法はこれらの関係を巧みに利用したもので、次のような過程により行わ

れる：

- 1° 最初のベクトル x_0 の選定 (多くの場合任意).
- 2° $x_{k+1} = \mu_{k+1} A x_k$ によつて新しいベクトル x_{k+1} を求める (μ_{k+1} は寸法をそろえるための係数)
- 3° 上の操作をくりかえし, μ_k が十分 λ_1 に (x_k が u_1 に) 収斂したとき停止する.
- 4° A が非対称の時は, さらに $y_{k+1}^T = \nu_{k+1} y_k^T A$ によつて, $y_k \rightarrow v_1$ とする.
- 5° つぎの λ_2, u_2, v_2 が欲しいときには, u_1, v_1 を長さ1のベクトルに規準化した上で, $A_1 = A - \lambda_1 u_1 v_1^T$ なる行列を作ると, A_1 の固有値は $0, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ となるから, A_1 の最大固有値が λ_2 となり, 1°~4° の方順で求められる.

この方法は計算式がきわめて単純な繰返しとなつていて、一つの固有値を求める過程で行列が固定されているから誤差の入る余地が少いこと、記録すべき数値の数が少いことなどの点ですぐれている。しかし、実際には $\{\mu_k\}$ の収斂の速さが問題であり、これは初めのベクトル x_0 の選び方 (なるべく u_1 に近い方向にとればよい) と、絶対値の大きい 2 つの固有値の比 $|\lambda_2/\lambda_1|$ の大きさによつてきまる (この比の値が 1 に近いときは収斂がきわめて遅い)。Bodewig は 4 次の対称行列の例を示し、累乗法の無反省な利用に警告を与えた²⁰。 ($|\lambda_2/\lambda_1| = 0.988$ で x_0 がほとんど u_1 に直交している)。また、行列 A が対称でない場合は、 μ_k の収斂そのものが保証されないから (λ_1 が複素数の場合)、上記 1°~5° の過程を行つても無意味である (λ_1 が実数という保証があれば問題はないが)。そこで累乗法を若干修正して、 λ_1 が複素数の場合にも有効な結果がえられるような試みが、Mendelsohn によつて行われている¹⁵。以下、その方法を略述してみよう。

A を n 次の実数行列とし、 $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$ と仮定する。 $|\lambda_1| = |\lambda_2|$ が成立つのは $\lambda_1 = -\lambda_2$ または $\lambda_1 = \bar{\lambda}_2$ の時であるが、 $\lambda_1 = -\lambda_2$ の時は数列 $\{\mu_k\}$ が収斂するから問題はない、 $\lambda_1 = \bar{\lambda}_2$ ($\lambda_1 \neq \lambda_2$) なる時は、 $\{\mu_k\}$ が振動して一定の値に収斂しないが、この場合には次のような数列 $\{\nu_k\}$, $\{\sigma_k\}$ を平行して求めてゆく：

$$\nu_k = \frac{1}{2} \mu_{k+1} \frac{\mu_k - \mu_{k+2}}{\mu_k - \mu_{k+1}}, \quad \sigma_k = \mu_k \mu_{k+1} \frac{\mu_{k+1} - \mu_{k+2}}{\mu_k - \mu_{k+1}}$$

すると、 $\nu_k \rightarrow \alpha, \sigma_k \rightarrow \rho^2$ となることが証明される (ただし、 $\lambda_1 = \alpha + i\beta, \beta = \sqrt{\rho^2 - \alpha^2}$)。Mendelsohn はこの事実を利用して、実係数の代数方程式の解法を考えた。それによると、

$$f(x) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + c_{n-2}x^{n-2} + \dots + c_n = 0$$

の n 個の根を $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n (|\lambda_i| \geq |\lambda_{i+1}|)$ とすれば、行列 (これを $f(x)=0$ のコンパニオン行列 companion matrix という)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -c_n & -c_{n-1} & \dots & \dots & -c_2 & -c_1 \end{pmatrix}$$

の固有値が、 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ に一致する。即ち $|A - \lambda I| = f(x)$ となる。したがつて、 n 次の代数方程式 $f(x)=0$ をとく代りに、行列 A の固有値を上の方法で求めてもよい。ただし、 $x^n - 1 = 0$ のように、2 対以上の複素根が同じ大きさの絶対値をもつときには、上の方法も役に立たないが、それを少し改良すればよい^{21), 22)}。

さて、われわれは Mendelsohn 法を、そのまま 15 次の代数方程式に利用してみたところ、 μ_k, ν_k, σ_k の振動が大きく、30 回余りの反復を行つても収斂する様子を見せなかつた。一般に、次数 n が大きい ($n > 5$) 代数方程式については、その係数の状態にもよるが、そのような大きな振動が現われる可能性が強いと考えられる (とくに最高次の項の係数が他に比してずつと大きい時)。この点に関しては、さらに理論的ならびに実証的な研究が必要である。

また、Mendelsohn は連立一次方程式 $Ax=b$ の解法を、行列の固有値を求める問題に帰着させる方法を考えた²³⁾。それによると、コンパニオン行列の作り方に難点がある（定符号行列の場合にのみ安心して適用できる）。

b) 廻転法 (rotation method)

実対称行列 A を考えると、ある直交行列 S が存在して、 $S^TAS=A$ (対角行列) となることはよく知られている。 A の対角要素が A の固有値、 S の列ベクトルが固有ベクトルを表わす。しかし、数値計算においては、実際にそのような直交行列を見出す方法が問題となる。Jacobi は対角線以外の要素を順次 0 にするような直交変換を表わす行列の無限系列を作り、それらの積の極限によって S を求める方法を考えた。これがいわゆる廻転法である。たとえば、 A の要素 a_{km} を 0 にするような直交変換は、

$$S_{(km)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cos \theta & -\sin \theta & \\ & \sin \theta & \cos \theta & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \tan 2\theta = \frac{2a_{km}}{a_{kk} - a_{mm}}$$

で表わされる。ただし、 $S_{(km)}$ は (k,k) , (k,m) , (m,k) , (m,m) の4要素がそれぞれ $\cos \theta$, $-\sin \theta$, $\sin \theta$, $\cos \theta$ で、その他の要素は単位行列と一致する。このような直交変換を、対角線以下の $n(n-1)/2$ 個の要素について行つた時、これを「一回の反復」とよぶことにする。Gregory が各種の行列について実験してみたところ、収斂の速さは行列の次数 n にはあまり関係がなく、7回の反復で10桁まで収斂したという¹⁶⁾。われわれの実験では、 $n=3$ の時3~4回の反復で、 $n=4$ の時、4~5回の反復で8桁まで収斂した（精度の点では初めの6桁まで正確）。Greenstadt は上に述べた方法を一般の複素行列（非エルミート行列）の場合に拡張した¹⁷⁾（直交行列の代りにユニタリー行列を使つて、対角線より下の要素を順次 0 にする変換を行なえば、対角線上に固有値が現われてくる）。われわれが4次の代数方程式 $f(x)=x^4-4x^3-73x^2+260x+568=0$ （すべての根が実数）のコンパニオン行列について、Greenstadt の方法を適用してみたところ、7回の反復によつて有効数字5桁まで正しく収斂した。さらに、複素根をもつ代数方程式の解法についても、Mendelsohn 法よりもすぐれた実用的価値をもつてであろうと考えられるが、その点については検討の余地がある。

一般的にいうと、与えられた行列が実対称（またはエルミート）で、最大（またはそのつぎ位まで）の固有値と固有ベクトルのみが欲しい場合には、累乘法を用いるのがよく、すべての固有値が欲しい時には廻転法を用いるのがよい（因子分析法などにおいて）。また、非対称（非エルミート）行列の場合には、Greenstadt 法が適しているであろう。とくに、 $|\lambda_2/\lambda_1| \approx 1$ の場合には累乘法を適用しても収斂は遅いから、廻転法の方が実用的である。

3・2 線型判別函数への応用

いわゆる数量化法においては、 $Ax=\lambda Bx$ (A, B は対称) なる形の固有方程式をといて、最大固有値 λ_1 (あるいは大きい順に少数個のもの) とそれに対応する固有ベクトル u_1 を求めることが必要とされる²⁴⁾。従来、この種の方方程式をとく方法としては、 $(B^{-1}A)x=\lambda x$ と変形して行列 $B^{-1}A$ の固有値と固有ベクトルを求める問題に帰着させたり、 $\mu(x)=(x, Ax)/(x, Bx)$ を最大ならしめるベクトル x_1 と $\mu(x_1)$ を近似的に求める方法（一種の弛緩法）などがあつた。赤池は勾配法の考え方にもとづいた一種の逐次近似法を考えた²⁵⁾。それによると、

0°. N 次元空間においてベクトル x が与えられたとき、次の2つの条件をみたす k 個のベクトル $\xi_1(x), \dots, \xi_k(x)$ を考える：

1) $x, \xi_1(x), \dots, \xi_k(x)$ は互に一次独立

2) $\max_{(\alpha_1, \dots, \alpha_k)} \mu(\alpha x + \sum_{i=1}^k \alpha_i \xi_i(x)) > \mu(x)$

上記の最大値を与える係数 $\{\alpha_i\}$ を, $\alpha(x), \alpha_1(x), \dots, \alpha_k(x)$ とかく ($\|\alpha x + \sum_{i=1}^k \alpha_i \xi_i(x)\|^2 = 1$ として). 計算手順は次のように進行する.

1° 第 $(n-1)$ 近似 $x^{(n-1)}$ が与えられると, それから $\xi_1(x^{(n-1)}), \dots, \xi_k(x^{(n-1)})$ を計算する.

2° 係数 $\alpha(x^{(n-1)}), \alpha_1(x^{(n-1)}), \dots, \alpha_k(x^{(n-1)})$ をみつけて, $x^{(n)} = \alpha(x^{(n-1)})x^{(n-1)} + \sum_{i=1}^k \alpha_i(x^{(n-1)}) \xi_i(x^{(n-1)})$ を求める.

3° $x^{(0)}$ から出発して, 1° と 2° の段階をくりかえすことによりベクトル系列 $\{x^{(n)}\}$ をうる.

さて, 実際の計算に当つては, $\{\xi_i(x)\}$ のきめ方と, $\alpha(x), \alpha_1(x), \dots, \alpha_k(x)$ の計算方式を定めておくことが必要となる. $A(x)\alpha = \eta B(x)\alpha$ をみたす最大固有値 η_{\max} に対応する固有ベクトルが正しく上の $\alpha(x), \alpha_1(x), \dots, \alpha_k(x)$ となる. ただし,

$$A(x) = \begin{pmatrix} (x, x)_A, (x, \xi_1)_A, \dots, (x, \xi_k)_A \\ (\xi_1, x)_A, (\xi_1, \xi_1)_A, \dots, (\xi_1, \xi_k)_A \\ \vdots \\ (\xi_k, x)_A, (\xi_k, \xi_1)_A, \dots, (\xi_k, \xi_k)_A \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{pmatrix}$$

で, $B(x)$ も $A(x)$ と同様に定義されるものとする. 適当に小さい k をえらぶと, 上の方程式をとくことは容易である. とくに, $k=1$ のとき, $|A(x)^{-1}A(x) - \eta I| = 0$ は η についての 2 次式となるから, はつきりととける. また, ξ の求め方にはいろいろあるが,

1. $\xi = P^{-1}(Ax - \mu(x)Bx)$, P は正値行列

2. $\xi = Ax - m(x)Bx$, $m(x) = (Ax, Bx)/(Bx, Bx)$

の 2 例が示されている. この方法は $B^{-1}A$ を計算することなしに, 逐次近似的に固有値と固有ベクトルが求められるから解の精度がよくなること, カノニカル相関係数の計算にも向いていること, 収斂が遅い場合には加速できること, 最大固有値とそれに対応する固有ベクトルのみが欲しい時は $P=B$ とすればよいことなど, いくつかのすぐれた特長をもっている.

また, 植松は数量化法において, $Hx = \lambda Bx$ なる形の固有方程式をとく場合, $H = ANA'$ (A は $p \times s$, N は $s \times s$ なる行列)なる特殊な形を利用して, 次元の低い固有方程式に変形して解を求める方法を提案した.²⁶⁾ すなわち, $n_1 \mathfrak{U}_1 + \dots + n_s \mathfrak{U}_s = 0$ なる関係がある (\mathfrak{U}_i は A の第 i 列を表わす列ベクトル) ことを利用して, 与えられた固有方程式を $Fz = \lambda z$, ただし $F = M(\mathfrak{U}_1 \cdots \mathfrak{U}_{s-1})^T B^{-1}(\mathfrak{U}_1 \cdots \mathfrak{U}_{s-1})$, なる形に変形することができる. H は $p \times p$ の行列, F は $(s-1) \times (s-1)$ の行列となるが, 実用的には $s-1 \leq 5$ であるのに反して, p はかなり大きい ($p \geq 10$) から, 後の固有方程式をとく方が有利であろうと考えられる. $s=2, 3$ なる場合は $Fz = \lambda z$ をとくことはきわめて容易である. 計算手順をまとめてみると,

1) $B y_i = \mathfrak{U}_i (i=1, 2, \dots, s-1)$ をといて y_i を求める.

2) $F = M(\mathfrak{U}_1, \dots, \mathfrak{U}_{s-1})^T (y_1, \dots, y_{s-1})$ を計算する. ただし, $M = \begin{pmatrix} n_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & n_{s-1} \end{pmatrix}$

3) $Fz = \lambda z$ をといて λ_1, z_1 を求める.

4) $x = c_1 y_1 + \dots + c_{s-1} y_{s-1}$ を計算する. ただし, $z_1 = (C_1, \dots, C_{s-1})$

また, $B^{-1} = Q'Q$ (Q は上三角行列) なる分解を考えると, 上の固有方程式は,

$$M(\mathfrak{U}_1^*, \dots, \mathfrak{U}_{s-1}^*)^T (\mathfrak{U}_1^*, \dots, \mathfrak{U}_{s-1}^*) z = \lambda z$$

となるから, 手数はさらに短縮される.

3・3 固有値の限界

これは与えられた行列の固有値を含むなるべく小さい領域を決める問題で, これについてさまざまな論文が発表されている. その歴史的展望については, Browne, Taussky, Parker にくわしく

述べられているから^{27),28),29)}, ここでは主として 1950 年以後の重要な成果についてふれてみたい。

任意の n 次正方行列 $A=(a_{k\lambda})$ について $P_k=\sum_{\substack{\lambda=1 \\ \lambda \neq k}}^n |a_{k\lambda}|$ とおけば, A の固有値は n 個の円 $|z-a_{kk}| \leq P_k (k=1, 2, \dots, n)$ の少くとも 1 つの円の内部またはその境界上にあることはよく知られているが, **A. Brauer** はそれを拡張して, A の固有値は, $n(n-1)/2$ 個の卵形 (ovals) $|z-a_{kk}| |z-a_{\lambda\lambda}| \leq P_k P_\lambda (k, \lambda=1, 2, \dots, n; k \neq \lambda)$ の少くとも 1 つの卵形の内部または境界上に含まれることを示した³⁰⁾. 更に彼は, $P_{k\lambda}=|a_{k\lambda}|P_\lambda + |a_{\lambda k}|(P_k - |a_{k\lambda}|) + \sum_{\nu} |a_{k\nu}a_{\lambda\nu}| + \sum_{\nu < \mu} |a_{k\nu}a_{\lambda\mu} + a_{k\mu}a_{\lambda\nu}| (k, \lambda, \mu, \nu=1, 2, \dots, n; k \neq \lambda; \mu \neq k, \lambda; \nu \neq k, \lambda)$ とおくことにより, $n(n-1)/2$ 個の卵形.

$$|z-a_{kk}| |z-a_{\lambda\lambda}| \leq P_{k\lambda} (k, \lambda=1, 2, \dots, n; k \neq \lambda)$$

の少くとも 1 つの卵形の内部または境界上に A の固有値が含まれることも証明した ($P_{k\lambda} \leq P_k P_\lambda$). さらに, 各 k に対して考えられる上のような $(n-1)$ 個の卵形を単純に連結してえられる領域 H_k が, その他の同様なすべての領域 H_λ と共通点をもたない場合には, H_k は丁度 1 個の A の固有値を含むことも示した. これらの結果をストカスティック行列に適用して, 次の諸定理を導いている.

[1] ストカスティック行列 $A=(a_{ij})$ の対角要素の中で最小の 2 つを a_{ii}, a_{jj} とすれば, A のすべての固有値は $|z-a_{ii}| |z-a_{jj}| \leq (1-a_{ii})(1-a_{jj})$ なる領域に含まれる.

[2] η を 1 でないストカスティック行列 A の固有値とし, η に対応する固有ベクトルを $y=(y_1, y_2, \dots, y_n)$ とすれば, $\sum_{i=1}^n y_i=0$ となる.

[3] A を分解されないストカスティック行列 (unreduced stochastic matrix), $\{h_1, h_2, \dots, h_n\}$ を任意の数とすれば, 行列 $B=(a_{k\lambda}-h_\lambda)$ は trivial な固有値 $\omega'=1-\sum_{\lambda=1}^n h_\lambda$ と, A のそれと一致する non-trivial な固有値をもつ ($|a_{pm}-a_{om}|$ が小なるとき有効).

[4] b が A の 1 つの対角要素で, b を含む列の他の要素がすべて c ならば, $b-c$ は A の固有値である ([3] の特殊な場合).

以上が **A. Brauer** の最近の論文の要旨である³¹⁾.

また, **K. Fan** と **A. J. Hoffman** は行列の位 (rank) と固有値の関係を明かにし, それを利用して固有値の限界を論じている³²⁾. それによると,

[1] 任意の正方行列 $A=(a_{ij})$ の位を r とすれば $\sum_{i=1}^n (a_{ii}^2 / \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2) \leq r$ となる.

[2] 任意の正方行列 A について,

$$\sum_{i=1}^n \left\{ \left(\sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right)^q / \left(\sum_{j \neq i} |a_{ij}|^p \right)^{q/p} \right\} \leq \alpha^q (1 + \alpha^q)$$

$$\text{ここで } p > 1, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$

をみたす α に対して, A の 1 つの固有値 λ は, $|\lambda-a_{ii}| \leq \alpha \left(\sum_{j \neq i} |a_{ij}|^p \right)^{1/p}, (1 \leq i \leq n)$ なる n 個の円の少くとも 1 つの領域内に含まれる.

[3] A の固有値 λ に対応する一次独立な固有ベクトルの数を s , n 個の正数 β_1, \dots, β_n が $\sum_{i=1}^n 1 + \beta_i \leq s$ をみたすとすれば, λ は n 個の円 $|\lambda-a_{ii}| \leq \beta_i \left(\sum_{j \neq i} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}, (1 \leq i \leq n)$ の中の少くとも 1 つに含まれる.

[5] また [4] の条件の下で, $|\lambda-a_{ii}| \leq \beta_i \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, (1 \leq i \leq n)$ としてもよい.

また, **K. Fan** はエルミート行列の固有値に関するいくつかの不等式も与えている³³⁾.

§ 4. 計算の精度

線型計算における計算誤差については, **J. von Neumann** と **Goldstine** の論文を初め³⁴⁾, 行列計算における誤差の一般論を述べた **P. S. Dwyer** の論文³⁵⁾ (それ以前の文献についてはこれにく

わしい) などがある. 実用的数値解析の立場からみると, 不良度の低い (well-conditioned) 行列を扱う計算についてはそれほど心配する必要はないのであり, 不良度の高い (ill-conditioned) 行列についてとくに注意を払うことが大切であろう. 不良度の高い行列としては, ヒルベルト行列が最も代表的なものであり, その逆行列や固有値について詳細な研究が行われている ($n \leq 10$ なる場合の確な逆行列の表と固有値・固有ベクトルがえられている). これらは, ある種の確率過程の平均値関数を推定するのに役立つし, また自動計算機で行列を逆転する過程を吟味するための“試し行列”としても有用である^{36),37)}. また, それに伴つて, 行列の不良度を測るための尺度がいろいろ工夫されている^{38),39),40)}. ここでは, J. Todd にしたがつて, ヒルベルト行列の不良度を眺めてみよう⁴¹⁾. 有限ヒルベルト行列 H_n は, $H_n = \{(i+j-1)^{-1}\}$, $i, j = 1, 2, \dots, n$ によつて定義されるが, その正確な逆行列 $T_n = H_n^{-1}$ を利用して, 行列 H_n の状態を表わしてみる. まず, 一般の n 次の正方行列 $A = (A_{ij})$ について, Turing は

$$M(A) = n \max_{i,j} |A_{ij}| \max_{i,j} |A_{ij}^{-1}|, \quad (A_{ij}^{-1} \text{ は } A^{-1} \text{ の } ij \text{ 要素})$$

を A の M -不良度 (M-condition number) と定義した (それが大きいほど状態が悪い). $A = H_n$ の場合, 明かに $\max_{i,j} |H_{ij}| = 1$ であるが, $\max_{i,j} |T_{ij}|$ は近似的に $T_{ii} = \frac{1}{2l-1} \left[\frac{(n+l-1)!}{(n-1)!(l-1)!(l-1)!} \right]^2$, $l-1 = n/\sqrt{2}$ で与えられる. スターリングの公式を使つて, $\max |T_{ij}| \sim An^{-1} \exp(nB)$ (A, B は常数) となるから,

$$M(H_n) \doteq A \exp(nB)$$

をうる. また, Turing は $N(A) = n^{-1} \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$, $\|A\| = \sqrt{\sum \bar{a}_{ij}^2}$ なる尺度も与えており, Neumann と Goldstine は $P(A) = \lambda(A)/\mu(A)$ (λ, μ はそれぞれ A の固有値の絶対値の最大値と最小値を示す) をすすめているが, これら 3 種類の尺度の間には,

$$n^{-2} M(A) \leq N(A) \leq M(A), \quad n^{-1} M(A) \leq P(A) \leq nM(A)$$

なる関係がある. さらに, H_n の性質から $\lambda(H_n) = \pi + O(1/n)$ なることが知られているから⁴²⁾, 近似的に

$$\pi n^{-1} M(H_n) < P(H_n) < \pi M(H_n)$$

とかける. 実は, これらの不良度の実際的な意味が大切なのであるが, 次の例をみれば一応その点が明確になる.

Neumann と Goldstine は消去法を用いて (range ± 1 , 42 bits), n 次正方行列 A の近似逆行列 \bar{A}^{-1} を求めた時の残差行列 $E = A\bar{A}^{-1} - I$ について,

$$\lambda(E) \leq 14.24 \times 2^{-42} \times n^2 \times P(A)$$

なることを示したが³⁴⁾, この結果を H_{10} に適用すると, $\lambda(E) \doteq 2 \times 10^6$ なることが示され, したがつて H_{10} の逆転はむづかしいと考えられる. 実際, SEAC によつて計算したところ, H_4 までうまくいったが H_5 については失敗した. また, H_n に適当な常数をかけてすべての要素を整数とした行列 H_n^* (丸めの誤差を含まない!) を用いて, 同じ消去法に計算したところ, H_6^* までうまく逆転できたが, H_7^* では失敗した. したがつて, H_{10} の逆転がうまくいかないのは, 単に丸めの誤差の影響のみによるものでないことは明かにされたが, 同時にこの種の不良度の高い行列を扱う際には, データ誤差についても細心の注意を払うことが大切であることもわかつた. また, 行列の対称化 AA^T によつて, 不良度はかえつて悪くなる (とくに $H_n = B_n B_n^T$ については著しい) ことも注意すべきこと, および $\det(A)$ も古くから不良度として用いられてきたが, $\det(T_n) \sim 2^{-2n^2}$ なることも示されている.

M. Lotkin はヒルベルト行列を若干変形した試し行列 A_n について, $\det(A_n) = [1!2! \cdots (n-1)!]^4 / [1!2! \cdots (2n-1)!] = (-1)^{n-1} n \cdot \det(T_n) \sim c_0 n^2 \cdot 3^n \cdot 2^{-2n(n-1)}$ なること, および $M(A_n) \sim c_2 n 2^{5n}$, $P(A_n) \sim c_3 2^{5n} \log n$ なることを示した⁴²⁾.

また, D.H. Lehmer は, 試し行列として $(p-1)$ 次の正方行列 M (p は奇素数を与えた⁴⁴⁾.
ただし $M=(M_{ij})$, $M_{ij}=a+b\chi(i)+c\chi(j)+d\chi(ij)$, (a, b, c, d は任意). ここで

$$\chi(n) = \begin{cases} 0 & (p \text{ が } n \text{ をわりきる場合}) \\ -1 & (x^2 \equiv n \pmod{p} \text{ とはなりえない場合}) \\ 1 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

この試し行列は, $p=3$ の時以外は行列式が 0 であり, 逆行列は存在しない. 固有値は,

$$(p-1)\rho_1, (p-1)\rho_2, 0, \dots, 0 \quad (\text{ただし, } \rho_1, \rho_2 \text{ は行列 } \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \text{ の固有値})$$

で与えられ, $p=3$ の場合の逆行列は

$$M^{-1} = \frac{1}{4(ad-bc)} \begin{pmatrix} a-b-c+d & -a-b+c+d \\ -a+b-c+d & a+b+c+d \end{pmatrix}$$

で与えられる.

また, 同じ函数 $X(n)$ を用いて, 第2種の試し行列 $A_p = \{c + X(\alpha + i + j)\}$ (c は任意の常数, α は整数) を作りその性質を調べた. A_p は M より複雑な性質をもつが A_p の固有値は

$$p^{\frac{1}{2}}, \dots, p^{\frac{1}{2}}, -p^{\frac{1}{2}}, \dots, -p^{\frac{1}{2}}, \sigma_1, \sigma_2$$

である. ただし, $p^{\frac{1}{2}}$ と $-p^{\frac{1}{2}}$ の重複度は $\frac{1}{2}(n-3)$ で, σ_1, σ_2 は $\lambda^2 - [c(p-1) - \chi(\alpha)]\lambda - cp\chi(\alpha) - 1 = 0$ の根である. また $c = -1/p\chi(\alpha)$ ならば, A_p は非特異で, 逆行列 A_p^{-1} の i, j 要素 a_{ij}^{-1} は,

$$a_{ij}^{-1} = \frac{1}{pB} \{\chi(\alpha) - \chi(\alpha+i) - \chi(\alpha+j) - cp\chi(\alpha+i)\chi(\alpha+j) + B\chi(\alpha+i+j)\},$$

$$B = cp\chi(\alpha) + 1$$

で与えられる.

最小自乗に表われる正規方程式をとく際に, しばしば係数行列として不良度の高いものが現われるが, J.D. Riley は $Ax=B$ をとく代わりに $CY=B$, ($C=A+kI$), なる不良度の改良された行列 C に関する方程式をとく方法を考えた⁴⁶⁾. 実際, 数値計算に適用するに当つては, いろいろ技術的な難点が見受けられるが, 興味ある試みといえる.

統計数理研究所

Appendix

- 1) G.E. Forsythe, Tentative classification of methods and bibliography on solving systems of linear equations, NBS Appl. Math. Series, **29**, 1~28, (1953).
- 2) L. Fox, Practical solution of linear equations and inversion of matrices, NBS Appl. Math. Series, **39**, 1~54, (1954).
- 3) A.M. Turing, Rounding-off errors in matrix processes, Quart. J. Mech. Appl. Math., **1**, 287~308, (1948).
- 4) L. Fox and J.G. Hays, J. Roy. Stat. Soc., **12**, 83~91, (1950).
- 5) M.R. Hestenes and E. Stiefel, Method of conjugate gradients for solving linear systems, NBS Report, **1659**, March 10, (1952).
- 6) L. Fox, Quart. J. Mech. Appl. Math., **1**, 253~280, (1948).
- 7) H. Hotelling, Ann. Math. Stat., **14**, 1~21, (1934).
- 8) 宇野利雄, 誤差の伝播と情報の保存 (数値計算への一考察), 日本数学会 (May, 1958) で発表.
- 9) A.C. Aitken, Proc. Roy. Soc. Edinburgh, **57**, 172~181, (1937).
- 10) T.C. Doyle, Inversion of symmetric coefficient matrix of positive-definite quadratic form, MTAC, **11**, April, 55~58, (1957).
- 11) 多賀保志, リレー計算機による線型計算について, 統計数理研究所彙報, 5巻1号, 32~48, (1957).

- 12) 多賀保志・藤原長司, 高次レオンチエフ行列の逆転について, 統計数理研究所彙報, 5巻2号, 171~182, (1958).
- 13) H. Hotelling, Relation between two sets of variates, *Biometrika*, **28**, 321~377, (1936).
- 14) C. Hayasi, On the prediction of phenomena from qualitative data and the quantification of qualitative data from the mathematico-statistical point of view, *Ann. Inst. Stat. Math.*, **3**, 69~98, (1952).
- 15) N.S. Mendelsohn, The computation of complex proper values and vectors of a real matrix with application to polynomials, *MTAC*, **11**, April, 91~94, (1957).
- 16) R.T. Gregory, Computing eigenvalues and eigenvectors of a symmetric matrix on the ILLIAC, *MTAC*, **7**, 237~239, (1953).
- 17) J. Greenstadt, A method for finding roots of arbitrary matrices, *MTAC*, **9**, April, 47~52, (1955).
- 18) M.J.R. Healy, A rotation method for computing canonical correlations, *MTAC*, **11**, April, 83~86, (1957).
- 19) M.R. Hestenes, Determination of eigenvalues and eigenvectors of matrices, *NBS Appl. Math. Series*, **29**, 89~94, (1953).
- 20) Bodewig, A practical refutation of the iteration method for the algebraic eigenproblem, *MTAC*, **8**, October, 237~239, (1954).
- 21) A.C. Aitken, On Bernoulli's numerical solution of algebraic equations, *Roy. Soc. Edinburgh, Proc.*, **46**, 289~305, (1925~1926).
- 22) H. Rutishauser, Anwendungen des Quotienten-Differenzen-Algorithmus, *Zeit. angew. Math. Physik*, **5**, 496~508, (1954).
- 23) N.S. Mendelsohn, An iterative method for the solution of linear equations based on the power method for proper vectors, *MTAC*, **11**, April, 88~91, (1957).
- 24) C. Hayasi, Multidimensional quantification —with application to analysis of social phenomena, *Ann. Instit. Stat. Math.*, **5**, 121~143, (1954).
- 25) H. Akaike, On a computation method for eigenvalue problems and its application to statistical analysis, *Ann. Instit. Stat. Math.*, **10**, 1~20, (1958).
- 26) T. Uematu, Note on the numerical computation in the discrimination problem, *Ann. Instit. Stat. Math.*, **10**, *Ann. Instit. Stat. Math.*, **10**, 131~135, (1959).
- 27) E.T. Browne, Limits to the characteristic roots of a matrix, *Ann. Math. Monthly*, **46**, 252~265, (1939).
- 28) O. Taussky, A recurring theorem on determinants, *Ann. Math. Monthly*, **56**, 672~676, (1949).
- 29) W.V. Parker, Characteristic roots and fields of values of a matrix, *Bull. Am. Math. Soc.*, **57**, 103~105, (1951).
- 30) A. Brauer, Limits for the characteristic roots of a matrix, *Duke Math. J.*, **13**, 387~395, (1946).
- 31) A. Brauer, Bounds for characteristic roots of matrices, *NBS Appl. Math. Series*, **29**, 101~106, (1953).
- 32) K. Fan and A.J. Hoffman, Lower bounds for the rank and location of the eigenvalues of a matrix, *NBS Appl. Math. Series*, **39**, 117~130, (1954).
- 33) K. Fan, Inequalities for eigenvalues of Hermitian matrices, *NBS Appl. Math. Series*, **39**, 131~139, (1954).
- 34) J. von Neumann and Goldstine, Numerical inverting of matrices of high order, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **53**, 1021~1099, (1947).
- 35) P.S. Dwyer, Errors of matrix computations, *NBS Appl. Math. Series*, **29**, 49~58, (1953).
- 36) R. Savage and E. Lukacs, Tables of inverses of finite segments of the Hilbert matrix, *NBS Appl. Math. Series*, **39**, 105~108, (1954).
- 37) R.A. Fairthorne and J.C.P. Miller, Hilbert's double series theorem and principal latent roots of

- the resulting matrices, MTAC, **3**, 399~400, (1949).
- 38) O. Taussky, Note on the condition of matrices, MTAC, **4**, 111~112, (1940).
 - 39) J. Todd, The condition of certain matrices, I, Quart. J. Mech. Appl. Math., **2**, 469~472, (1949).
 - 40) J. Todd, The condition of a certain matrix, Proc. Camb. Phil. Soc., **46**, 116~118, (1949).
 - 41) J. Todd, The condition of the finite segments of the Hilbert matrix, NBS Appl. Math. Series, **39**, 109~116, (1954).
 - 42) O. Taussky, A remark concerning the characteristic roots of the finite segments of the Hilbert matrix, Quart. J. Math., **20**, 80~83, (1949).
 - 43) M. Lotkin, A set of test matrices, MTAC, **9**, 153~161, (1955).
 - 44) D.H. Lehmer, On certain character matrices, Pacific J. Math., **6**, 491~499, (1956).
 - 45) J.D. Riley, Solving systems of linear equations with a positive definite, symmetric, but possibly ill-conditioned matrix, MTAC, **9**, 96~101, (1955).