福山大学工学部紀要
第30巻　2006年12月

DFTによる悪条件行列の改善

小林　富士男*　　尾関　孝史*　　筒本　和広**

Improving the Property of Ill-Conditioned Matrix by Means of DFT

Fujio KOBAYASHI*　Takashi OZEKI*　Kazuhiro TSUTSUMOTO**

ABSTRACT

A system specified by ill-conditioned equations has the property that small changes in the coefficients give rise to large changes in the solution. In fact, if the coefficients of ill-conditioned equations are given by some experiments, then no information at all may be, in general, available about the solution. In this case, the coefficient matrix is near singular. As the system is unstable, it is advisable to change the system into the stable one which is equivalent to the original system. This subject is important not only in numerical calculations but also in engineering problems. Let us consider the following system represented by linear equations.

$$\left.\begin{array}{l} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots\cdots + A_{1n}x_n = B_1 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots\cdots + A_{2n}x_n = B_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \cdots\cdots + A_{nn}x_n = B_n \end{array}\right\} \quad (1)$$

If the each column of coefficients in above equations is transformed by DFT (Discrete Fourier Transform) method respectively, the Fourier coefficients obtained can be arranged so as to make the following simultaneous equations.

$$\left.\begin{array}{l} a_{01}x_1 + a_{02}x_2 + \cdots + a_{0n}x_n = a_0 \\ a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = a_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{N1} + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{Nn}x_n = a_N \\ b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \cdots + b_{1n}x_n = b_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ b_{N-11}x_1 + b_{N-12}x_2 + \cdots + b_{N-1n}x_n = b_{N-1} \end{array}\right\} \quad (2)$$

where a_{ij}, a_i are Fourier cosine coefficients, b_{ij}, b_i are Fourier sine coefficients and $n = 2N$. In this paper, we will prove that the set of equation (1) is entirely equivalent to equation (2). Next, it will be described that even if the equation (1) ill-conditioned, the transformed equation (2) may become to be well-conditioned.

キーワード　：悪条件行列の改善，良条件行列，悪条件連立１次方程式，離散的フー

*工学部情報処理工学科　　**人間文化学部環境情報学科

リエ変換，高速フーリエ変換，条件数

Keywords : Improving the property of ill-conditioned matrix, well-conditioned matrix, ill-conditioned linear equations, DFT, FFT, condition number

1．まえがき

近年，物理的あるいは化学的方法に基づいた計測装置の発達により，大量の計測データが容易に得られるようになった．一方，ディジタル計算機の発達により，データ処理の理論面の開発が一層重要なものとなった．実験などで得られる測定値を取り扱うとき，それらに含まれた雑音が問題になることがしばしばある．そのようなとき，測定値をそのまま扱うより，フーリエ変換によって周波数領域における表現にした方が，統計的性質によりデータ処理が容易になる場合が多い．また，高速フーリエ変換（ＦＦＴ）[1],[2]の開発により，フーリエ変換に要する計算時間が短縮され，各方面に応用されるようになった．

連立１次方程式を実際に物理的な方面へ応用するとき，悪条件（連立１次方程式の問題に関して）になることがしばしば起きる[3]．例えば，積分方程式を差分近似したときは，各行が比例関係に近くなり悪条件となることがよくある．このような悪条件の連立１次方程式を数値的に解くとき，入力データの丸め誤差あるいは演算の段階で発生する丸め誤差，桁落ちなどが解に著しい影響を与える．それらの丸め誤差，桁落ちは演算の有効桁数を増すことによって減らすことはできる．しかし，与えられた方程式が近似式あるいは測定値ならば，一般に誤差が含まれているから有効桁数を増しても解決されない．悪条件の場合には，連立１次方程式が誤差を含むと，たとえ僅かでも，いかなる解法を用いても一般によい結果は得られなく，データ処理の観点から特に具合が悪い．それ故，悪条件の連立１次方程式を解くときは，それらの条件を改善した等価な方程式を求めることが重要となる．また，行列の悪条件は不安定であるから，工学的にはそのような系を構成することは好ましくなく，それと等価で安定な系を構成することが望ましい．この種の問題は単なる数値計算だけでなく工学的にも重要である．

本論文では，連立１次方程式の係数に対して離散的フーリエ変換（ＤＦＴ）を施したとき得られる係数で連立１次方程式を作っても，それは元の連立１次方程式と等価であることを述べている．また，離散的フーリエ変換を行うと，悪条件が改善されることがあるが，それらについて考察し，その有効性と限界および数値例を示している．

連立１次方程式を解くとき，いきなり解かないで，係数に尺度変換を行ったり，行および列の入れ換え，枢軸要素の選択をする計算技術上の問題あるいは誤差解析などについては従来報告されている[4]～[8]．しかし，その性質を改善する方法については見当たらない．本論文は，そのような改善をする１つの方法といえよう．

2．連立１次方程式の離散的フーリエ変換

一般に，周期2πをもつ周期関数$f(t)$は，区間$[0,2\pi]$において次のようにフーリエ級数に展開することができる．

$$f(t)=\frac{1}{2}a_0+\sum_{k=1}^{\infty}\left(a_k\cos kt+b_k\sin kt\right) \tag{1}$$

ただし，その係数は次式で与えられる．

$$\left.\begin{aligned} a_k&=\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}f(t)\cos kt\,dt\\ b_k&=\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}f(t)\sin kt\,dt\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

関数$f(t)$が解析的な式として与えられたときは，上述のようにして$f(t)$のフーリエ級数展開を行うことができる．しかし，$f(t)$が数値またはグラフとして与えられた場合には，標本点を等間隔にした離散的フーリエ変換によって次のように表される．

$$f(t)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{N-1}\left(a_k\cos\frac{\pi}{N}kt+b_k\sin\frac{\pi}{N}kt\right)+\frac{a_N}{2}\cos\pi t \tag{3}$$

$$\left.\begin{aligned} a_k&=\frac{1}{N}\sum_{t=0}^{2N-1}f(t)\cos\frac{\pi}{N}kt,(k=0,1,2,\cdots,N)\\ b_k&=\frac{1}{N}\sum_{t=0}^{2N-1}f(t)\sin\frac{\pi}{N}kt,(k=1,2,\cdots,N-1)\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

ただし，tは区間$[0,2\pi]$の２N等分点とする．

連立１次方程式に，この離散的フーリエ変換を適用すると，次の定理が得られる．

［定理］

連立１次方程式

$$\left.\begin{array}{l} A_{01}x_1 + A_{02}x_2 + \cdots + A_{0n}x_n = B_0 \\ A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n = B_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ A_{n-11}x_1 + A_{n-12}x_2 + \cdots A_{n-1n}x_n = B_{n-1} \end{array}\right\} \quad (5)$$

が与えられたとき，左辺側の係数 A_{ij} および右辺側の定数 B_i の各列に対して離散的フーリエ変換を施し，得られたフーリエ係数を a_{kj}, b_{kj} および a_k, b_k とする．これらの係数から次のような連立１次方程式を作る．

$$\left.\begin{array}{l} a_{01}x_1 + a_{02}x_2 + \cdots + a_{0n}x_n = a_0 \\ a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = a_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{Nn}x_n = a_N \\ b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \cdots + b_{1n}x_n = b_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ b_{N-11}x_1 + b_{N-12}x_2 + \cdots + b_{N-1n}x_n = b_{N-1} \end{array}\right\} \quad (6)$$

すると，式(6)は式(5)と等価である．
ただし，$n = 2N$ で，式(5)および式(6)の係数行列は正則とする．勿論，連立１次方程式の性質から，式(6)の各式の順序を入れ換えても差し支えない．

［証明］

標本点の１つとして，$i = \hat{i}$ に対する A_{ij} を特に $A_{\hat{i}j}$ とすれば，

$$\begin{aligned} A_{\hat{i}j} &= \frac{a_{0j}}{2} + \sum_{k=1}^{N-1}\left(a_{kj}\cos\frac{\pi}{N}k\hat{i} + b_{kj}\sin\frac{\pi}{N}k\hat{i}\right) \\ &\quad + \frac{a_{Nj}}{2}\cos\pi\hat{i} \\ &= \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{2N-1} A_{ij}\left\{\frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{N-1}\left(\cos\frac{\pi}{N}ki\cos\frac{\pi}{N}k\hat{i}\right.\right. \\ &\quad \left.\left. + \sin\frac{\pi}{N}ki\sin\frac{\pi}{N}k\hat{i}\right) + \frac{1}{2}\cos\pi i\cos\pi\hat{i}\right\} \\ &= \frac{1}{2N}\sum_{i=0}^{2N-1} A_{ij}\left\{1 + \sum_{k=1}^{N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i})\right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i}) + \cos\pi i\cos\pi\hat{i}\right\} \end{aligned} \quad (7)$$

となる．ところが，

$$\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i}) = \cos\frac{\pi}{N}(2N-k)(i-\hat{i}) \quad (8)$$

であるから，

$$\begin{aligned} A_{\hat{i}j} &= \frac{1}{2N}\sum_{i=0}^{2N-1} A_{ij}\left\{1 + \sum_{k=1}^{N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i})\right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=N+1}^{2N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i}) + \cos\pi i\cos\pi\hat{i}\right\} \end{aligned} \quad (9)$$

となり，一方

$$\cos\frac{\pi}{N}0\left(i-\hat{i}\right) = 1 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \cos\frac{\pi}{N}N\left(i-\hat{i}\right) &= \cos\pi i\cos\pi\hat{i} + \sin\pi i\sin\pi\hat{i} \\ &= \cos\pi i\cos\pi i \end{aligned} \quad (11)$$

であるから，

$$A_{\hat{i}j} = \frac{1}{2N}\sum_{i=0}^{2N-1} A_{ij}\left\{\sum_{k=0}^{2N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i})\right\} \quad (12)$$

が得られる．また，次の式(13)が成立するので，

$$\sum_{k=0}^{2N-1}\cos\frac{\pi}{N}k(i-\hat{i}) = \begin{cases} 2N, (i=\hat{i}) \\ 0, \quad (i \neq \hat{i}) \end{cases} \quad (13)$$

$$A_{\hat{i}j} = \frac{1}{2N}A_{\hat{i}j}2N = A_{\hat{i}j} \quad (14)$$

となる．ただし，$j = 1, 2, \cdots, n$ である．

右辺の定数に関しても全く同様である．一方，フーリエ変換が線形変換に属することから，$f_1(t), f_2(t), \cdots, f_n(t)$ を関数とすれば次式が成立することは自明である．

$$\begin{aligned} &\Im\left[K_1 f_1(t) + K_2 f_2(t) + \cdots + K_n f_n(t)\right] \\ &= K_1\Im\left[f_1(t)\right] + K_2\Im\left[f_2(t)\right] + \cdots + K_n\Im\left[f_n(t)\right] \end{aligned} \quad (15)$$

ただし，$\Im$ はフーリエ変換を表し，$K_1, K_2, \cdots, K_n$ は定数である．それ故，仮定から式(6)は式(5)と等価である．

［証明終］

3．離散的フーリエ変換の有効性とその限界

式(5)の係数 A_{ij} を次のように表す．

$$A_{ii} = C_i + V_{ii}, (i = 0, 1, 2, \cdots, n-1) \quad (16)$$

ただし，$C_j = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} A_{ij}$ を定数項，V_{ij} を変動項とし，それぞれ各 j に対して，係数および変動を表すものとする．式(16)を離散的フーリエ変換すると，

$$\Im(A_{ij}) = \Im(C_j) + \Im(V_{ij}) \quad (17)$$

となるが，C_j は定数項であるから，

$$\Im(C_j) = \frac{a_{0j}}{2} \quad (18)$$

となり，V_{ij} は変動項であるから，

$$\begin{aligned} \Im(V_{ij}) &= \sum_{k=1}^{N-1}\left(a_{kj}\cos\frac{\pi}{N}ki + b_{kj}\sin\frac{\pi}{N}ki\right) \\ &\quad + \frac{a_{Nj}}{2}\cos\pi i \end{aligned} \quad (19)$$

となる．式(16)において，V_{ij} に対して $C_j,(j=1,2,\cdots,n)$ の値(絶対値)が大きい場合は，各方程式によって表される超平面が平行に近くなる．従って，C_j の値が増加するにつれて，式(5)は次第に悪条件となる．ところが，離散的フーリエ変換をして得られる式(6)は，C_j の値が大きくなっても，式(17)，(18)から明らかなように a_{0j} の値が大きくなるだけである．

一方，C_j の絶対値が V_{ij} に対して小さいときにも，式(5)は特異に近くなり悪条件となる．しかし，C_j の値が小さくなれば，離散的フーリエ変換によって得られる式(6)の a_{0j} の値が小さくなるだけである．係数行列が特異に近いとき，連立１次方程式は悪条件になるが，方程式の両辺に定数を乗ずると行列式の値が変わるので，係数行列そのままの行列式の値は悪条件の尺度として適当でない．しかし，i 行の各要素 A_{ij} を $\left(\sum_{j=1}^{n} A_{ij}^{\ 2}\right)^{1/2}$ で割って正規化すれば，条件が最もよい直交行列の場合，行列式の値（絶対値）は１となり，零ではないどのような定数を方程式に乗じてもその値は変わらないので，正規化した行列式の値は悪条件の尺度として使用できる．

そこで，a_{0j} の絶対値の大小は，離散的フーリエ変換によって得られる式(6)を評価する悪条件の尺度に対して余り問題にならない．それ故，C_j の絶対値が V_{ij} の絶対値に対して大きいか，あるいは小さいような行列に対して本方法は有効である．また，式(6)は a_{0j} で１つの行が構成され，V_{ij} は $a_{kj}(k\neq 0)$，b_{kj} によって表されるので，離散的フーリエ変換によって得られる行列は１つの行だけを C_j で構成し，その他の全ての要素を V_{ij} で構成する行列のもつ条件程度まで改善される．

4．連立１次方程式の誤差の影響

4.1　右辺の定数に誤差が含まれた場合

連立１次方程式をベクトルで表し，

$$Ax=b \tag{20}$$

とする．ただし，A は正則とする．右辺 b に誤差 Δb が含まれたとき，得られる解の誤差を Δx とすれば，

$$A(x+\Delta x)=b+\Delta b \tag{21}$$

となる．式(20),(21)より，

$$\Delta x=A^{-1}\Delta b \tag{22}$$

であるから，両辺のノルムをとれば次式のようになる．

$$\|\Delta x\|=\|A^{-1}\Delta b\|\le\|A^{-1}\|\|\Delta b\| \tag{23}$$

一方，

$$\|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\|x\| \tag{24}$$

であるから，相対誤差として，次式が得られる．

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}\le\|A\|\|A^{-1}\|\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \tag{25}$$

4.2　係数行列に誤差が含まれた場合

左辺の係数行列に誤差 ΔA が含まれたとき，得られる解の誤差を Δx とすれば，

$$(A+\Delta A)(x+\Delta x)=b \tag{26}$$

となる．ただし，$A+\Delta A$ は正則とする．式(20)の関係から式(26)は次のようになる．

$$\Delta x=-A^{-1}\Delta A(x+\Delta x) \tag{27}$$

式(27)において，両辺のノルムをとれば次式が得られる．

$$\|\Delta x\|\le\|A^{-1}\|\|\Delta A\|\|x+\Delta x\| \tag{28}$$

上式の両辺を $\|x+\Delta x\|$ で割れば，

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x+\Delta x\|}\le\|A^{-1}\|\|\Delta A\| =\|A\|\|A^{-1}\|\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \tag{29}$$

となる．

4.3　両辺に誤差が含まれた場合

左辺の係数行列および右辺の定数に，それぞれ誤差 ΔA，Δb が含まれたとき，得られる解の誤差を Δx とすれば，

$$(A+\Delta A)(x+\Delta x)=b+\Delta b \tag{30}$$

となる．式(20)の関係から，式(30)は次のようになる．

$$\Delta Ax+(A+\Delta A)\Delta x=\Delta b \tag{31}$$

一般に，

$$A+\Delta A=A(I+A^{-1}\Delta A) \tag{32}$$

ただし，I は単位行列である．

であるから，$A, A+\Delta A$ が正則ならば，$I+A^{-1}\Delta A$ も正則である．それ故，式(31)は次のように表される．

$$\Delta x=(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}A^{-1}(-\Delta Ax+\Delta b) \tag{33}$$

いま，誤差 ΔA が十分小さく，次式が成立するものと仮定する．

$$\|A^{-1}\|\|\Delta A\|<1 \tag{34}$$

すると，式(33)において両辺のノルムをとれば，

$$\|\Delta x\| \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\|\Delta A\|\|x\|+\|\Delta b\|\right) \qquad (35)$$

となる．

また，式(24)の関係から，相対誤差として次式が得られる．

$$\begin{aligned}\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} &\le \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}\right)\\ &= \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1-\|A\|\|A^{-1}\|\dfrac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}\right) \qquad (36)\end{aligned}$$

式(25),(29),(36)から，行列の条件数 [5], [9], [10] $cond(A)=\|A\|\|A^{-1}\|$ の値が大きいと，係数行列 A あるいは右辺の定数 b に含まれる僅かな誤差 $\Delta A, \Delta b$ が解に大きな誤差 Δx をもたらすことが分かる．これまでの議論では，演算過程で生ずる桁落ち，丸め誤差については触れておらず，データの誤差に起因した不可避的に生ずる解の誤差について議論した．実際に計算する場合には，計算過程で発生する誤差も結果に影響を及ぼす．しかし，それらの計算過程で発生する誤差の影響分だけ係数行列あるいは右辺の定数を変化させたものを正確に計算したとみなすこともできるので，条件数が行列の性質を表す値として重要なものとなる．それ故，連立１次方程式を解く場合は，その係数行列の条件数が小さな値をもつ等価な方程式に変換してから，解を求めるのが望ましい．

5．　数 値 計 算

5.1　悪条件の行列

次の行列は悪条件の行列である．

$$\begin{bmatrix} 1001 & 1002 & 1002 & 1003 & 1003 & 1003 & 1003 & 1004\\ 1002 & 1002 & 1003 & 1003 & 1003 & 1003 & 1004 & 1004\\ 1002 & 1003 & 1003 & 1003 & 1003 & 1004 & 1004 & 1004\\ 1003 & 1003 & 1003 & 1003 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004\\ 1003 & 1003 & 1003 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004\\ 1003 & 1003 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004\\ 1003 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004\\ 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1004 & 1005 \end{bmatrix} \qquad (37)$$

式(37)の各列に対して，離散的フーリエ変換(Cooley-Tukey 法の高速フーリエ変換) [1] をし，列方向に各々の余弦の０次，１次，２次，…，正弦の１次，２次，…，係数を配列すれば，次式のようになる．

$$\begin{bmatrix} 2.005\times10^{3} & 2.006\times10^{3} & 2.007\times10^{3} & 2.007\times10^{3} & 2.007\times10^{3} & 2.008\times10^{3} & 2.008\times10^{3} & 2.008\times10^{3}\\ -5.000\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -4.268\times10^{-1} & -4.268\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0}\\ -2.500\times10^{-1} & -5.000\times10^{-1} & -5.000\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & 0.000\times10^{0} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0}\\ -5.000\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & -7.322\times10^{-2} & -7.322\times10^{-2} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0}\\ -7.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & -5.000\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0}\\ -6.036\times10^{-1} & -6.036\times10^{-1} & -6.036\times10^{-1} & -6.036\times10^{-1} & -4.268\times10^{-1} & -1.768\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & 0.000\times10^{0}\\ -5.000\times10^{-1} & -5.000\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & 0.000\times10^{0} & -2.500\times10^{-1} & -2.500\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & 0.000\times10^{0}\\ -1.036\times10^{-1} & -1.036\times10^{-1} & -1.036\times10^{-1} & -1.036\times10^{-1} & 7.322\times10^{-2} & -1.768\times10^{-1} & 0.000\times10^{0} & 0.000\times10^{0} \end{bmatrix}$$

（ただし，有効数字５桁目を四捨五入）

(38)

式(37)を正規化し，その行列式の値を求めると，2.4×10^{-25} で，その値は１と比較して小さい．行列の条件数 $cod(A)$ は，ノルムの定義に依存するが，計算が容易なユークリッドノルム $\|A\|_E=\left(\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=1}^{n}A_{ij}{}^2\right)^{1/2}$ を採用し，式(37)を正規化した条件数を求めると，4.1×10^{4} となる（以後，ノルムはユークリッドノルムを採用し，条件数はすべて正規化した行列の条件数を意味する）．この値は１と比較してかなり大きいので，式(37)は悪条件であることが分かる．一方，式(38)の各要素を正規化した行列式の値(絶対値)および条件数は，それぞれ $9.0\times10^{-3}, 2.1\times10^{1}$ であるから，離散的フーリエ変換によって悪条件が改善されていることが分かる．

V_{ij} で構成する行列のうち，各行において V_{ij} の絶対値の総和が最大なもの，すなわち，$\max_i\left(\sum_{j=1}^{n}|V_{ij}|\right)$ に対する行を，C_j で構成した行列を正規化したものから，離散的フーリエ変換によって得られる行列を正規化した行列式の値(絶対値)および条件数を推定すると，それらは，$1.2\times10^{-2}, 2.5\times10^{1}$ となる．以後，このようにして求めた推定値を＜＞内の数字で示す．

5.2　悪条件の連立１次方程式

次の連立１次方程式は悪条件の例である．

$$
\left.\begin{aligned}
100006x_1+100009x_2+100002x_3+100005x_4+100004x_5+100002x_6+100001x_7+100005x_8&=800034\\
100001x_1+100001x_2+100000x_3+100003x_4+100000x_5+100002x_6+100002x_7+100009x_8&=800018\\
100007x_1+100003x_2+100001x_3+100009x_4+100003x_5+100008x_6+100000x_7+100005x_8&=800036\\
100005x_1+100007x_2+100009x_3+100004x_4+100005x_5+100008x_6+100000x_7+100005x_8&=800043\\
100003x_1+100004x_2+100000x_3+100009x_4+100000x_5+100005x_6+100002x_7+100007x_8&=800030\\
100004x_1+100002x_2+100002x_3+100006x_4+100009x_5+100003x_6+100004x_7+100006x_8&=800036\\
100008x_1+100001x_2+100008x_3+100006x_4+100009x_5+100002x_6+100007x_7+100004x_8&=800045\\
100009x_1+100005x_2+100000x_3+100006x_4+100009x_5+100001x_6+100005x_7+100008x_8&=800043
\end{aligned}\right\} \quad \textbf{(39)}
$$

式**(39)**の正解は$x_1 \sim x_9 = 1.0$であるが，有効数字約７桁（**10**進）の計算機を用いて消去法（ガウスジョルダン法）によって解くと，**表１**の**No.1**欄のようになり正解とはかけ離れた解が得られる．次に，式**(39)**の左辺の係数および右辺の定数を各列に対して，離散的フーリエ変換をし，列方向に各々余弦の**0**次，**1**次，２次，…，正弦の１次，２次，…係数を配列すれば，次の式**(40)**のようになる．

$$
\left.\begin{aligned}
&2.000\times10^{+5}x_1+2.000\times10^{+5}x_2+2.000\times10^{+5}x_3+2.000\times10^{+5}x_4+2.000\times10^{+5}x_5+2.000\times10^{+5}x_6+2.000\times10^{+5}x_7+2.000\times10^{+5}x_8= 1.600\times10^{+6}\\
&9.268\times10^{-1}x_1+7.197\times10^{-1}x_2-1.445\times10^{+0}x_3-1.177\times10^{+0}x_4+1.161\times10^{-1}x_5-2.164\times10^{+0}x_6+2.803\times10^{-1}x_7+5.607\times10^{-1}x_8=-2.182\times10^{+0}\\
&-1.500\times10^{+0}x_1+2.250\times10^{+0}x_2-1.750\times10^{+0}x_3-2.500\times10^{-1}x_4-2.000\times10^{+0}x_5-7.500\times10^{-1}x_6-1.000\times10^{+0}x_7+7.500\times10^{-1}x_8=-4.250\times10^{+0}\\
&5.732\times10^{-1}x_1+1.780\times10^{+0}x_2+2.445\times10^{+0}x_3-8.232\times10^{-1}x_4+1.884\times10^{+0}x_5+6.642\times10^{-1}x_6-7.803\times10^{-1}x_7-1.561\times10^{+0}x_8= 4.182\times10^{+0}\\
&1.250\times10^{+0}x_1+5.000\times10^{-1}x_2+0.000\times10^{+0}x_3+2.500\times10^{+0}x_4-1.750\times10^{+0}x_5+7.500\times10^{-1}x_6-2.500\times10^{-1}x_7-1.750\times10^{+0}x_8= 1.250\times10^{+0}\\
&-1.487\times10^{+0}x_1+6.768\times10^{-1}x_2-5.126\times10^{-1}x_3-1.339\times10^{-1}x_4-3.798\times10^{+0}x_5+2.561\times10^{+0}x_6-2.987\times10^{+0}x_7+2.500\times10^{-1}x_8=-5.432\times10^{+0}\\
&-2.250\times10^{+0}x_1-2.250\times10^{+0}x_2-1.750\times10^{+0}x_3-2.500\times10^{-1}x_4-1.250\times10^{+0}x_5-1.000\times10^{+0}x_6+2.500\times10^{-1}x_7+5.000\times10^{-1}x_8=-8000\times10^{+0}\\
&-9.874\times10^{-1}x_1-3.232\times10^{-1}x_2+2.987\times10^{+0}x_3-1.634\times10^{+0}x_4-7.981\times10^{-1}x_5-4.393\times10^{-1}x_6+5.126\times10^{-1}x_7-2.500\times10^{-1}x_8=-9.320\times10^{-1}
\end{aligned}\right\}
$$

（ただし，有効数字５桁目を四捨五入）

(40)

式**(39)**を解いたときと同じプログラムによって式**(40)**を解くと，表１の**No.2**欄のようになり正解が得られる．式**(39)**を正規化した行列式の値（絶対値）および条件数はそれぞれ$5.9\times10^{-35}, 2.2\times10^{7}$であり，式**(40)**を正規化した行列式の値（絶対値）および条件数は1.9×10^{-3} $<1.2\times10^{-3}>$，$6.4\times10^{2}<8.0\times10^{2}>$であるから，離散的フーリエ変換により，悪条件が相当改善されることが分かる．

表１　計算結果

未知数	No.1 元の方程式	No.2 離散的フーリエ変換をした方程式	No.3 正　解
x_1	1.088	1.000	1.000
x_2	0.418	1.000	1.000
x_3	2.238	1.000	1.000
x_4	2.653	1.000	1.000
x_5	1.433	1.000	1.000
x_6	−0.827	1.000	1.000
x_7	−1.440	1.000	1.000
x_8	2.436	1.000	1.000

６．考　察

$n\times n$の行列$A_1=\left[\beta+\alpha_{ij}\right]$において$\beta$の値（絶対値）を大きくすると，その行列は次第に悪条件となる．いま，$n=8$とし，０～９の１桁の一様乱数を発生させ，それらの値をα_{ij}とし，$\beta=0$，10^1，10^2，…とその値を大きくする．このようにして行列を作り，**10**個の正規化した行列式の値（絶対値）および条件数の平均値を求めると**表２**の**No.1**欄のようになり，βの値の増加と共に，次第に行列は悪条件となる．しかし，離散的フーリエ変換によって得られる行列を正規化した行列式の値お

よび条件数は，同表 No.2 欄のようになり，β の値に殆ど影響されることなくほぼ一定となる．その理由は，β の値が変化しても，離散的フーリエ変換を行うと，0 次の余弦係数の値が影響を受けるだけであり，正規化した行列式の値および条件数には殆ど影響を及ぼさないからである．

行列 $A_2=\left[\beta_j+\alpha_{ij}\right]$，$A_3=\left[\beta_i+\alpha_{ij}\right]$ とし，範囲 0～9 の 1 桁の数字を無作為に取り出したものを α_{ij} とする．いま，$\beta_1=1000$, $\beta_2=2000$, $\beta_3=3000$, $\beta_4=4000$, $\beta_5=5000$, $\beta_6=6000$, $\beta_7=7000$, $\beta_8=8000$ とする．次の式(41), (42)は，それぞれ A_2，A_3 の例である．

$$\begin{bmatrix} 1006 & 2001 & 3008 & 4006 & 5006 & 6005 & 7003 & 8007 \\ 1006 & 2005 & 3000 & 4004 & 5005 & 6007 & 7007 & 8001 \\ 1000 & 2004 & 3003 & 4004 & 5002 & 6000 & 7008 & 8004 \\ 1009 & 2008 & 3009 & 4006 & 5009 & 6003 & 7005 & 8004 \\ 1001 & 2008 & 3005 & 4005 & 5004 & 6006 & 7009 & 8003 \\ 1007 & 2003 & 3004 & 4000 & 5009 & 6000 & 7009 & 8009 \\ 1007 & 2003 & 3003 & 4002 & 5002 & 6004 & 7006 & 8003 \\ 1002 & 2008 & 3005 & 4006 & 5005 & 6009 & 7009 & 8004 \end{bmatrix} \tag{41}$$

$$\begin{bmatrix} 1000 & 1007 & 1009 & 1009 & 1005 & 1005 & 1000 & 1004 \\ 2000 & 2000 & 2001 & 2006 & 2004 & 2007 & 2004 & 2009 \\ 3004 & 3009 & 3005 & 3006 & 3001 & 3000 & 3004 & 3002 \\ 4003 & 4004 & 4000 & 4009 & 4008 & 4003 & 4001 & 4002 \\ 5005 & 5003 & 5007 & 5005 & 5003 & 5007 & 5005 & 5000 \\ 6001 & 6008 & 6005 & 6003 & 6008 & 6001 & 6006 & 6007 \\ 7002 & 7008 & 7005 & 7004 & 7001 & 7005 & 7002 & 7000 \\ 8006 & 8004 & 8006 & 8008 & 8004 & 8009 & 8006 & 8002 \end{bmatrix} \tag{42}$$

これらの式を正規化した行列式の値（絶対値）および条件数は，式(41)では 4.7×10^{-25}，1.3×10^{5} であり，式(42)では 1.0×10^{-23}，1.4×10^{5} である．一方，離散的フーリエ変換をしたときのそれらの値は，式 (41) では 2.1×10^{-2} $<1.0\times10^{-2}>$，6.8×10^{1} $<8.3\times10^{1}>$ であり，式 (42) では $3.6\times10^{-22}<9.4\times10^{-22}>$，$7.3\times10^{4}<1.0\times10^{5}>$ である．このようにして作った 10 個の行列の正規化した行列式の値（絶対値）および条件数の平均値は，それぞれ

$\det(A_2)=1.2\times10^{-24}$，$cond(A_2)=1.3\times10^{5}$，

$\det(A_3)=1.4\times10^{-23}$，$cond(A_3)=1.1\times10^{5}$ である．また，離散的フーリエ変換をした場合のそれらの値は，

$\det(\Im A_2)=3.8\times10^{-2}<1.9\times10^{-2}>$，

$cond(\Im A_2)=6.9\times10^{1}<9.4\times10^{1}>$，

$\det(\Im A_3)=5.0\times10^{-22}<1.3\times10^{-21}>$，

$cond(\Im A_3)=7.5\times10^{4}<7.7\times10^{4}>$ である．$\det(A_2)$ の値と $\det(A_3)$ の値および $cond(A_2)$ と $cond(A_3)$ の値は，ほぼ同じ程度であるが，$\det(\Im A_2)$ と $\det(\Im A_3)$ の値または $cond(\Im A_2)$ と $cond(\Im A_3)$ の値は大きく異なっている．すなわち，A_2 の場合には，離散的フーリエ変換をすると行列の悪条件は大きく改善されるが，A_3 の場合には，殆ど改善されない．A_2 の場合，列方向では，β_j の値が一定であるから，フーリエ変換をすると，β_j の値は 0 次の余弦係数の値に影響を及ぼすのみである．それ故，離散的フーリエ変換をして得られる行列は悪条件が改善

表2　β の値に対する正規化した行列式の値（絶対値）および条件数 $cond(A)=\|A\|_E\|A^{-1}\|_E$

A は正規化，< > 内の数字は推定値　　　$n=8$ (10 個の平均値)

β	No.1 (元の行列)		No.2 (離散的フーリエ変換をした行列)			
	行列式の値	条件数	行列式の値		条件数	
0	1.5×10^{-3}	1.7×10^{2}	3.9×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	7.9×10^{1}	$<1.0\times10^{2}>$
10^1	1.1×10^{-6}	3.6×10^{2}	4.0×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	6.3×10^{1}	$<8.0\times10^{1}>$
10^2	1.2×10^{-12}	2.4×10^{3}	4.1×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	6.0×10^{1}	$<7.5\times10^{1}>$
10^3	1.6×10^{-19}	2.3×10^{4}	4.1×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	5.9×10^{1}	$<7.4\times10^{1}>$
10^4	1.6×10^{-26}	2.2×10^{5}	4.1×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	5.9×10^{1}	$<7.4\times10^{1}>$
10^5	1.6×10^{-33}	2.2×10^{6}	4.1×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	5.9×10^{1}	$<7.4\times10^{1}>$
10^6	1.6×10^{-40}	2.2×10^{7}	4.1×10^{-2}	$<2.8\times10^{-2}>$	5.9×10^{1}	$<7.4\times10^{1}>$

される．A_3 の場合には、列方向に見ると A_{ij} は線形に近くなっており，式(16)の V_{ij} の絶対値が C_j のそれに対してかなり大きいので，離散的フーリエ変換をしても改善されない．次に，$A_4=\left[\alpha_{ij}\right]$ とし，$-9999\sim9999$ の範囲内で４桁の乱数を発生させ，それらの値を α_{ij} とする．次の式(43)は A_4 の例である．

$$\begin{bmatrix} 4072 & 2634 & 4877 & -2500 & 6913 & -2212 & 1163 & -991 \\ -1365 & -6147 & -2460 & 8808 & 576 & -2104 & -3184 & -684 \\ -6602 & 2960 & 4203 & -2074 & 6129 & 8024 & 479 & -2475 \\ -939 & 1158 & -1224 & -1866 & 873 & -2778 & -3948 & -1457 \\ -7286 & -8714 & 3529 & -849 & 5456 & -2560 & 806 & -2249 \\ -1713 & 1494 & -819 & -1540 & -9891 & 7548 & -4542 & 8059 \\ -7060 & 1702 & 2934 & -2332 & -4228 & -2354 & 121 & -1814 \\ -2287 & 1810 & -1503 & 8675 & 1435 & -3136 & -5216 & -2725 \end{bmatrix} \tag{43}$$

式(43)を正規化した行列式の値（絶対値）および条件数は，それぞれ 2.7×10^{-2}，5.8×10^{1} であり，離散的フーリエ変換をしたそれらの値は $2.1\times10^{-2}<2.4\times10^{-2}>$，$5.4\times10^{1}<5.7\times10^{1}>$ である．このようにして作った 10 個の行列の正規化した行列式の値（絶対値）および条件数の平均値は $\det(A_4)=2.0\times10^{-2}$，$cond(A_4)=6.7\times10^{1}$ であり，離散的フーリエ変換をしても，その値は $\det(\Im A_4)=2.0\times10^{-2}<1.4\times10^{-2}>$，$cond(\Im A_4)=5.8\times10^{1}<6.9\times10^{1}>$ である．従って，元の行列および離散的フーリエ変換によって得られる行列を正規化した行列式の値（絶対値）および条件数は，ほぼ同程度である．

一方，式(16)の各 $C_j=\sum_{i=0}^{n-1}A_{ij}$ の絶対値が，V_{ij} の絶対値に対して非常に小さい場合は，行列は特異に近くなり悪条件となる．しかし，C_j の絶対値が V_{ij} の絶対値に対して小さい場合には，離散的フーリエ変換を行うと，0 次の余弦係数の値（絶対値）が小さくなるだけである．それ故，元の行列がたとえ特異に近くても，すべての C_j が零でない限り，離散的フーリエ変換によって得られる行列は，一般に特異に近いとはいえない．そこで，C_j の値を一定とする条件の下に，正負の乱数（小数点以上４桁）を発生させ，8×8 の行列を作った．**表３**はこのようにして得られた行列を正規化し，その行列式の値および条件数を求めたものである．**同表**から，C_j の値が小さくなると，元の行列は悪条件となるが，離散的フーリエ変換を行って得られた行列は悪条件とならない様子が分かる．

以上の結果から，C_j の絶対値が V_{ij} の絶対値に対して大きいか，あるいは小さいような行列に対して本方法は有効である．またそのような場合一般に，１つの行だけを C_j で構成し，その他のすべての要素を V_{ij} で構成した行列のもつ条件程度まで改善されることが明らかである．

上述では，$n=2N$ としたときについて述べたが，それらを $2N+1$ とした場合にも同様に求めることができる．ただし，式(3)，(4)に対応する式はそれぞれ次の式(44)，(45)のようになる．

表３　C_i の値に対する正規化した行列式の値（絶対値）および条件数 $cond(A)=\|A\|_E\|A^{-1}\|_E$

A は正規化，＜　＞内の数字は推定値　　　$n=8$（10 個の平均値）

C_i ($j=1,2,\cdots,8$)	No.1（元の行列）		No.2（離散的フーリエ変換をした行列）			
	行列式の値	条件数	行列式の値		条件数	
10^3	2.7×10^{-3}	1.6×10^{2}	1.4×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^2	2.6×10^{-4}	1.4×10^{3}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^1	2.6×10^{-5}	1.4×10^{4}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^0	2.6×10^{-6}	1.4×10^{5}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^{-1}	2.6×10^{-7}	1.4×10^{6}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^{-2}	2.6×10^{-8}	1.4×10^{7}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$
10^{-3}	2.6×10^{-9}	1.4×10^{8}	1.3×10^{-2}	$<2.4\times10^{-2}>$	7.5×10^{1}	$<5.6\times10^{1}>$

$$f(t)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{N}\left(a_k\cos\frac{2\pi}{2N+1}kt\right.$$
$$\left.+b_k\sin\frac{2\pi}{2N+1}kt\right) \tag{44}$$

$$\left.\begin{aligned}a_k&=\frac{2}{2N+1}\sum_{t=0}^{2N}f(t)\cos\frac{2\pi}{2N+1}kt,\\&\qquad(k=0,1,2,\cdots,N)\\b_k&=\frac{2}{2N+1}\sum_{t=0}^{2N}f(t)\sin\frac{2\pi}{2N+1}kt,\\&\qquad(k=1,2,\cdots,N)\end{aligned}\right\} \tag{45}$$

7．むすび

条件の悪い連立１次方程式を解くとき，反復法を用いると収束が遅く，また直接法を用いると丸め誤差の影響が大きく，一般にどのような解法を採用してもあまり思わしくない．連立１次方程式が悪条件になるのは，各方程式によって表される超平面の幾つかが平行近いとき，すなわち係数行列が特異に近い場合である．

本論文では，連立１次方正式の係数に離散的フーリエ変換を施して得られる係数で連立１次方程式を作ると，それは元の連立１次方程式と等価であることを述べた．次に，離散的フーリエ変換により悪条件が改善されることを述べ，その有効性と限界および数値例を示した．高速フーリエ変換の開発により，離散的フーリエ変換が容易になったので，本方法は十分役立つものと思われる．

参考文献

[1] J. W. Cooley and J. W. Tukey : An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series, Math. Comp., 19, 90, p.297(April 1965).

[2] G. D. Bergland : The fast Fourier transform recursive equations for arbitrary length records, Math. Comp., 21, 98, p.236(April 1967).

[3] 小林，山口：制約条件を付加した条件の悪い連立１次方程式の解法，情報処理，16, 9, p.789(1975-09).

[4] J. von Neumann and H. H. Goldstine : Numerical inverting of matrices of high order, Bull. Amer. Math. Soc., 53, 11, p.1021(Nov. 1947).

[5] A. M. Turing : Rounding-off errors in matrix processes, Quart. J. Mech. Appl. Math., 1, p.287(1948).

[6] J. H. Wilkinson : Error analysis of direct methods of matrix inversion, J. Assoc. Comp. Mach., 8, 3, p.281(July 1961).

[7] J. H. Wilkinson : Rounding errors in algebraic processes, Her Britannic Majesty's Stationery Office(1963).

[8] 大原，石原：条件の悪い連立１次方程式の誤差解析における数値実験，情報処理，14，2，p.135(1973-02).

[9] J. Todd : The condition of a certain matrix, Proc. Cambridge Phil. Soc., 46, 1, p.116(Jan. 1950).