応用線形代数

東京工業大学　大学院　情報理工学研究科　数理・計算科学専攻
理学部　情報科学科
福田光浩

２０１４年度前期

【講義概要】

線形代数の基本的な概念から出発し，より（計算機による）計算に役立つ理論を掘り下げる.

【講義の目的】

線形代数の基礎知識を復習しながら今後，他科目で登場する関連話題との結びつきを図る.

【講義計画】

1. 概論
2. n 次元 Euclid 空間
3. 線形方程式系の表現
4. 行列式，線形方程式系の解法，逆行列計算
5. MATLAB 演習
6. 次元，基底，直交補空間
7. 中間試験
8. 直交射影（線形部分空間，最小２乗法）
9. 線形方程式系に関する補足，直和
10. 2 次形式と固有値
11. Gersgorin の円
12. ベクトルノルムと行列ノルム
13. 期末試験

【中間試験と期末試験】

中間試験は５月２６日（予定），期末試験は７月２８日（予定）である.

【教科書・参考書など】

特に指定しない.

【関連科目・履修の条件など】

線形代数学第一・第二および線形代数学演習第一・第二を履修していることが望ましい.

【成績評価】

中間試験と期末試験およびレポートによる.

【担当教員の一言】

この講義との 重複申告は認めません.

OCW で公開されている補足資料の演習問題は自習用であり，講義の時間内でカバーできなかった演習による理解を助けるものである. よって，必ず解いてみること.

【TA】

伊藤 勝 ，椎橋 怜史

1　概論

線形代数の基本的な概念を理解するには

- 図を描くこと，
- 簡単な例において記号ではなく，実際に数字を入れてみること

が望ましい. 定義や結果の丸暗記は忘れてしまいますが，幾何学的な理解は持続します.

1.1　線形方程式系と２次形式

この講義では以下のように 線形方程式系 を表す.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

ただし，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A} &= [a_{ij}] \ : \ m \times n \quad \text{（定数）行列，} \\
\boldsymbol{b} &= \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \ : \ m \text{ 次元列（縦）（定数）ベクトル，} \\
\boldsymbol{x} &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \ : \ n \text{ 次元列（縦）（変数）ベクトル.}
\end{aligned}$$

また，２次形式 とは以下のようなものを指す.

$$g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} q_{ij} x_i x_j$$

ただし，

$$\begin{aligned}
T &\ : \ \text{ベクトルもしくは行列の転置，} \\
\boldsymbol{Q} &= [q_{ij}] \ : \ n \times n \text{（定数）行列，} \\
\boldsymbol{x} &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \ : \ n \text{ 次元列（縦）（変数）ベクトル.}
\end{aligned}$$

1.2　Newton 法

まず $n = 1$ とし，次の非線形方程式 $f(x) = 0$ を数値的（かつ近似的）に解きたいとする. ただし，$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を連続微分可能な関数とする.

Newton 法

手順１： $x^0 \in \mathbb{R}$ を初期点（適当な近似解）とする． k を反復の回数とし，$k := 0$ とする．

手順２： 点 x^k において関数 f を線形近似（Taylor 展開）する．

$$f(x) = f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) + \text{誤差}.$$

手順３： 近似方程式

$$f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) = 0$$

を解いてその解を x^{k+1} とする. すなわち，

$$x^{k+1} := x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}$$

ただし，$f'(x^k) \neq 0$ とする．

手順４： $k := k + 1$ とし，手順２へもどる．

[問題 01-01] 方程式 $(x)^2 - 3x + 2 = 0$ に Newton 法を適用せよ．ただし，初期点 $x^0 = 4$ として，２回反復し，x^2 まで求めよ．

今度は Newton 法を多変数の連立方程式系に拡張をする．

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ \vdots & \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \end{cases}$$

もしくは，ベクトル形式で次のように書ける．

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}. \tag{1}$$

ただし，$\boldsymbol{f}:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ である.

ここで，Jacobi 行列

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_j}\right] \ : \ n \times n \text{ 行列}$$

を導入すると，(1) の（線形）近似方程式系は

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k) = \boldsymbol{0},$$

または，

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$$

となるので，この解は Jacobi 行列が正則である場合

$$\boldsymbol{x}^{k+1} := \boldsymbol{x}^k - [\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)]^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k) \tag{2}$$

となる. この式によって $\boldsymbol{x}^{k+1}$ を計算するには

× Cramer の公式　　◎ 消去法

(2) が定義されるためには，$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)$ が正則，すなわち，$\det(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k)) \neq 0$ でなければならない. もしくは，$\det(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k))$ が 0 でなくても，非常に小さいと数値計算が不安定になる.

行列式 $\det(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^k))$ の計算は

× 行列式の展開　　◎ 行列の基本変形

[問題 01-02] 方程式系

$$\begin{cases} x + y - 2 = 0 \\ x^2 - 2y - 3 = 0 \end{cases}$$

を点 $(x, y) = (0, 0)$ で線形近似し，近似された方程式系を解け.

1.3 輸送問題

ある 1 種類の製品を m 箇所にある工場から n 箇所にある倉庫に輸送する問題を考える．それぞれの工場に生産能力があり，同様に倉庫にはそれぞれ最大在庫容量が決まっている．さらに，製品あたりの工場から倉庫への輸送費用が分かっているとする．この時，輸送費用を最小にするにはどのようにしたらよいかを考える．

工場番号	生産能力	倉庫番号	最大在庫容量
1	a_1	1	b_1
2	a_2	2	b_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
m	a_m	n	b_n

ただし，次の仮定をおく：

$$\sum_{i=1}^{m} a_i \leq \sum_{j=1}^{n} b_j$$

さらに，

$$\begin{array}{lcl} c_{ij} & : & \text{工場 } i \text{ から倉庫 } j \text{ への製品 1 単位あたりの輸送費用} \\ x_{ij} & : & \text{工場 } i \text{ から倉庫 } j \text{ への製品の輸送量} \end{array}$$

とすると，次のような数学的なモデルが考えられる．

$$\left\{ \begin{array}{llllll} \text{目的} & : & \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij} & \longrightarrow & & \text{最小化} \\ \text{条件} & : & \sum_{j=1}^{n} x_{ij} = a_i & i = 1,2,\ldots,m & & \text{工場 } i \text{ での生産能力} \\ & & \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_j & j = 1,2,\ldots,n & & \text{倉庫 } j \text{ の在庫容量} \\ & & x_{ij} \geq 0 & i = 1,2,\ldots,m; & j = 1,2,\ldots,n & \end{array} \right.$$

このような問題を線形計画問題と呼ぶ．
この問題をさらにベクトル・行列形式として書くと，

$$\left\{ \begin{array}{llll} \text{目的} & : & \langle \boldsymbol{C}, \boldsymbol{X} \rangle & \longrightarrow \quad \text{最小化} \\ \text{条件} & : & \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_n = \boldsymbol{a} & \\ & & \boldsymbol{e}_m^T \boldsymbol{X} = \boldsymbol{b}^T & \\ & & x_{ij} \geq 0 & i = 1,2,\ldots,m;\ j = 1,2,\ldots,n \end{array} \right.$$

となる．ただし，$\langle \cdot, \cdot, \rangle$ は行列同士の内積であり，$\boldsymbol{e}_n \in \mathbb{R}^n$ はすべての要素が 1 のベクトルである．

[問題 01-03] 以下の数値で与えられる輸送問題を数学的モデルに定式化し，解け．

$$\begin{array}{llll} m = 2, & a_1 = 7, & a_2 = 8, & \\ n = 2, & b_1 = 4, & b_2 = 11, & \\ & c_{11} = 15, & c_{12} = 8, & c_{21} = 10, \quad c_{22} = 12 \end{array}$$

1.4 ２次元平面上の最大化問題

[問題 01-04] 1 次元の最大化：連続微分可能な関数 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を最大化する x を求める問題に関してどのようなことを知っているか記せ．

2 階連続微分可能な関数 $g : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ を最大にする $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}$ を求めたい.

山を登るには等高線に対して"直角" に登るのが効率が良さそうである．したがって，現在地を $\boldsymbol{x}^k$ として，この点で g を線形近似すると

$$g(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{x}^k) + \nabla g(\boldsymbol{x}^k)^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k) + \text{誤差}$$

が得られる. ただし

$$\nabla g(\boldsymbol{x}^k) = \left.\begin{pmatrix} \frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{pmatrix}\right|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^k}.$$

点 $\boldsymbol{x}^k$ における等高線との接線は以下のように現せる.

$$\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2 \mid \underbrace{\nabla g(\boldsymbol{x}^k)^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k)}_{\text{内積}} = 0\}.$$

したがって，$\nabla g(\boldsymbol{x}^k)$ 方向に少し進む.

$$\boldsymbol{x}^{k+1} := \boldsymbol{x}^k + \alpha^k \nabla g(\boldsymbol{x}^k) \quad (k = 0, 1, \ldots)$$

ただし，$\alpha^k > 0$ は歩み幅（ステップサイズ）と呼ばれる．このような方法を <u>最急降下法</u> と呼ぶ.

$\boldsymbol{x}$ は山頂であるための必要条件は $\nabla g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ である. すなわち

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} &= 0 \end{aligned}\right\} \text{連立方程式系}$$

そこで $\nabla g : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ の根を Newton 法で求めたい. Newton 法の反復式は

$$\boldsymbol{x}^{k+1} := \boldsymbol{x}^k - [\boldsymbol{H}g(\boldsymbol{x}^k)]^{-1} \nabla g(\boldsymbol{x}^k) \qquad (k = 0, 1, \ldots)$$

となる. ただし,

$$\boldsymbol{H}g(\boldsymbol{x}^k) = \left.\left[\frac{\partial^2 g(\boldsymbol{x})}{\partial x_i \partial x_j}\right]\right|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^k} : \text{Hesse 行列（}2 \times 2\text{ 対称）}$$

$\boldsymbol{H}g(\boldsymbol{x}^k)$ は関数 g の 2 次微分の情報を持っている.

点 $\boldsymbol{x}^k$ での g の 2 次近似は

$$g(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{x}^k) + \nabla g(\boldsymbol{x}^k)^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{H}g(\boldsymbol{x}^k)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k) + \text{ 誤差}$$

となるので，ここで 2 次形式が登場する.

$\nabla g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ となる $\boldsymbol{x}$ は関数の “山頂”，“谷底”，“鞍点” に相当する. つまり極値である. また，$\boldsymbol{H}g(x)$ の固有値がこの極値の形状を決める.

2　n 次元 Euclid 空間

$\mathbb{R}$ を実数の集合とする.

$\mathbb{R}^n$ を n 次元の（列）（縦）ベクトルの集合（空間）とする.

2.1　ベクトル空間

定義： ある集合 V が 実ベクトル空間 であるためには，その集合にて以下の条件を満たすベクトル和とベクトルのスカラー (実数）積が定義されていなければならない.

ベクトル和

$\forall \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c} \in V$,

(i) $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{a}$ （交換則）

(ii) $(\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) + \boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} + (\boldsymbol{b} + \boldsymbol{c})$ （結合則）

(iii) $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{0} = \boldsymbol{a}$ となる零ベクトル $\boldsymbol{0} \in V$ が存在する. （零ベクトルの存在）

(iv) $\boldsymbol{a} + \bar{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{0}$ となる逆元 $\bar{\boldsymbol{a}} \in V$ が存在する. （逆元の存在）

スカラー (実数）積

$\forall \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in V$, $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$,

(v) $(\alpha\beta)\boldsymbol{a} = \alpha(\beta\boldsymbol{a})$ （スカラー積の結合則）

(vi) $(\alpha + \beta)\boldsymbol{a} = \alpha\boldsymbol{a} + \beta\boldsymbol{a}$ （スカラーの分配則）

(vii) $\alpha(\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) = \alpha\boldsymbol{a} + \alpha\boldsymbol{b}$ （ベクトルの分配則）

(viii) $1\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}$ （$\mathbb{R}$ の単位元 1 とのスカラー積）

例：$\mathbb{R}^n$, $\mathbb{R}^{n\times m}$, $\mathbb{R}[x]$, $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ など.

定義：ベクトル空間 V の任意のベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ とスカラー $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ を用いて新たに定義するベクトル $\displaystyle\sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{a}_i$ をベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ の線形結合（もしくは一次結合）と呼ぶ.

よって，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ の線形結合はそのベクトル空間に属する.