応用線形代数

東京工業大学　情報理工学院　数理・計算科学系
福田光浩

２０１７年度 第１クォーター

【講義概要】

前半では，まず定義に重点をおいた線形代数の基本的な概念を簡潔に復習する．ベクトルの線形独立性・従属性，線形写像など重要項目については，定義を用いた応用問題を通して理解度を確認する．また，初歩的な線形方程式系の数値解法を通して，ソフトウェア実装における問題点などを解説し，今後，高度な数値解法を学習する際にスムーズな理解ができるようにする．後半では，より工学的な応用も意識し，ベクトルの部分空間などへの射影を通して最小２乗法の再解釈を行うなど，線形代数の概念を基礎にした発展内容の理解を深める．最後に２次形式や行列の固有値問題など，数学，計算数学などで必ず議論される知識を解説する．

【講義の達成目標】

数学および計算数学における基本的な概念である有限次元ベクトル空間に関する知識を演習問題などを通して確実に習熟すること．また，それらの概念を応用した線形方程式系や行列に関する数値解法の導入にあたり，基本的な問題点を把握し，より高度な解法が理解できるようになることである．

【講義計画（予定）】

1. 概要
2. n 次元ベクトル空間　（１）ベクトル空間，線形独立・従属性，部分空間，線形写像
3. n 次元ベクトル空間　（２）ベクトル・行列ノルム，内積
4. 線形方程式系の表現
5. 行列式，線形方程式系の数値解法
6. 線形方程式系の数値解法，逆行列の計算
7. MATLAB による線形演算
8. 理解度確認総合演習
9. n 次元ベクトル空間の次元，基底，直交補空間
10. 直交射影（部分空間，最小２乗法）

11. 線形方程式系に関する補足，部分空間の演算（直和）

12. ２次形式と固有値

13. ２次形式の等高線，行列の対角化

14. 固有値の数値計算

15. 複素行列，行列の応用

16. 期末試験

【中間試験と期末試験】

中間試験は５月９日（火）（予定），期末試験は６月６日（火）（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（４０％)、期末試験（４０％）およびレポート（２０％）による．

【担当教員の一言】

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．

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うが，幾何学的な理解は持続する．

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　応用例１：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．

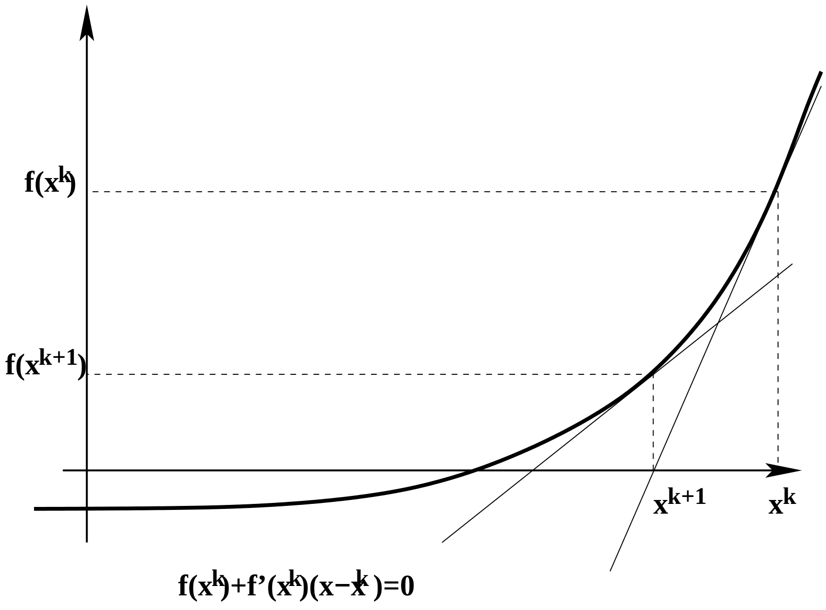

図 1: $n = 1$ における Newton 法の概要.

[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．

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

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

数値例：

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + x_2^2 - 1 \\ f_2(x_1, x_2) &= (x_1 + 1)^2 + x_2^2 - 1 \end{cases}, \qquad \boldsymbol{Df}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2(x_1 - 1) & 2x_2 \\ 2(x_1 + 1) & 2x_2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{x}^0 - [\boldsymbol{Df}(x_1, x_2)\,|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^0}]^{-1}\,\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

[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　応用例２：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：

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

さらに，

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

とすると，次のような数学的なモデルが考えられる.

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

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，

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

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 応用例３：２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．

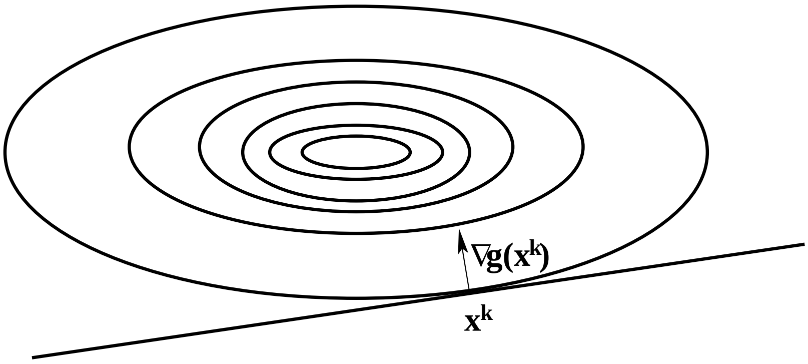

図 2: $n=2$ における関数 $g(\cdot)$ の等高線．直線は $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^2 \mid \nabla g(\boldsymbol{x}^k)^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^k)=0\}$ に表す．

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．このような方法を最急降下法と呼ぶ．

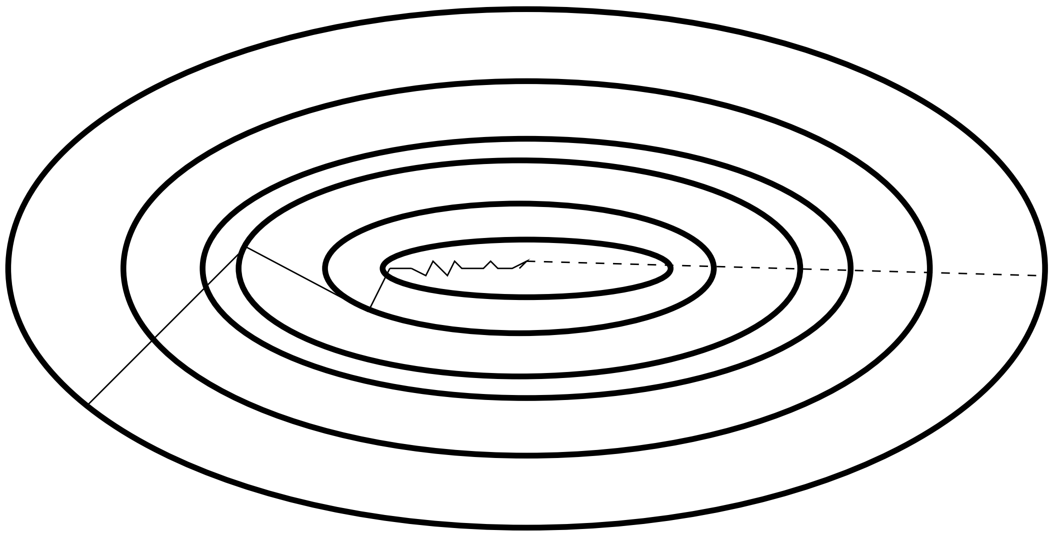

図 3: $n=2$ における関数 $g(\cdot)$ の等高線およびこの関数に対する最急降下法.

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

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，

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

$\boldsymbol{H}g(\boldsymbol{x}^k)$ 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．