

工学部における線形代数

東京大学大学院・情報理工学系研究科 室田 一雄

Kazuo Murota

Graduate School of Information Science and Technology, University of Tokyo

1 工学的線形代数の論点

工学部の学生を対象に、数理的な手法の基礎となる数学の講義を10年程担当してきた。線形代数については、既に一通り習った学生に対して、工学への応用を念頭においた要点を解説している。

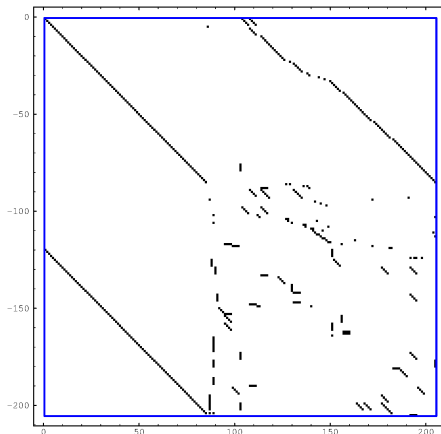
授業の始めに学生に聞くことは、

「 n 次行列の n は、どのくらいと思っていますか？」

である。教科書で習う行列といえば

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 3 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 & 2 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & -1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

のようなイメージであり、学生の想定している n の値もごく小さい。しかし、現実の行列は、教科書の紙面には入りきれないほど大きい。例えば、簡単な工学システム（化学工学の例題）を記述する行列は



のようになる($n = 205$)。白いところの要素は0であり、点に見えるのが非零の行列要素

である。このように、現実の行列は大規模であり、また、疎行列である。

講義で次に言うことは、行列が教科書の中の虚構ではなくて、現実中存在するものであるということである。工学部の初年次の学生に専門的な話をするのは難しいが、インターネット検索の背後では超大規模な行列に関する計算が行われていると言えば、興味をもってもらえることが多い。

以上のようなことを学生に伝えた上で、学生自身が卒業研究で扱うであろう行列の大きさは、 $n = 100, n = 1000, n = 10000, \dots$ になることを告げる。それによって教科書とは別の次元で行列を意識するように誘導できる。それと同時に、今までの学習が無駄だった訳ではなく、むしろ、もっと理論を理解して欲しいという意図をもって、

「 $n = 2, 3, 4$ くらいと思って理解した定理は、 $n = 10000$ に対しても成り立つ」と言うことにしている。

数学としての線形代数 [3, 4] を勉強した後で、その先にどのような世界が展開されるのかを早い段階に見せること、そして、基礎理論を正しく深く理解することの動機づけを与えることが、工学部における線形代数の教育において大切であると考えている。

工学部で線形代数を教える（あるいは学ぶ）際のポイントとして、次の4点を意識することが有効である。

1. 行列はどのように生じるか？

既に述べたように、行列は教科書の中の虚構ではなく、現実中存在する実体である。その実体には、工学システムの記述や推移確率の記述など、いろいろな形があるが、一つの典型例は微分方程式の離散化によるものである（第2節）。

2. どのような行列が生じるか？

現実の行列は「大規模行列」であり、また、「疎行列」である。これらの概念は、数学的に厳密に定義できるものではないが、応用の観点からは重要な特性である。対角優位性なども、応用の観点から生まれた有用な概念である。また、通常線形代数では、実数や複素数を要素とする行列やベクトルを扱うが、非負行列、整数行列、多項式行列なども応用では重要である（第5節）。

3. どのような特性を知りたいか？

線形代数を工学に生かすためには、線形代数で習う、階数、固有値、特異値、正定値性などの概念が工学的に何に対応しているのかを知る必要がある。正定値行列について、その実例を第4節で述べる。

4. どのように計算するか？

ここでいう「計算」には、数値計算法だけでなく、理論展開における操作的・構成的方法を含む。例えば、行列式の展開公式、基本変形、Cramerの公式、Gram-Schmidtの直交化、固有値の評価式（Gershgorinの定理、Courant-Fischerの定理）などである。定理を計算にどのように生かすかを示す例を第3節に述べる。行列の数値計算法については[5]などを参照されたい。

2 行列はどのように生じるか

「行列はどのように生じるか」の典型例として、微分方程式の差分近似は講義に最適である。まずは、行列が大規模で疎であることを見るのが狙いであるが、その後に、差分スキームの実行可能性が行列の正則性によって保証されるという対応関係を通じて、「正則性」の概念とその計算法を説明することもできる。

単位正方形領域

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1] = \{(x, y) \mid 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$$

における Dirichlet 問題を考える。 Ω の境界 Γ 上で定義された関数 $g(x, y)$ が与えられたとき、 Ω の内部で Laplace 方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad ((x, y) \in (0, 1) \times (0, 1)) \quad (1)$$

を満足し、境界 Γ 上で Dirichlet 境界条件

$$u(x, y) = g(x, y) \quad ((x, y) \in \Gamma)$$

を満たす関数 $u(x, y)$ を求める問題である。

この問題の近似解を離散化（差分法）によって求めるには、次のようにする。 x 方向、 y 方向をそれぞれ $h = 1/N$ 刻みで N 等分して単位正方形 Ω にメッシュを入れ、 $u(ih, jh)$ に対する近似解を u_{ij} とおく。偏導関数を

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1}}{h^2}$$

と近似すると、 u_{ij} ($1 \leq i, j \leq N-1$) に関する線形方程式系

$$4u_{ij} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} = 0 \quad (1 \leq i, j \leq N-1) \quad (2)$$

が得られる。ただし、 $u_{0j}, u_{Nj}, u_{i0}, u_{iN}$ ($1 \leq i \leq N-1$) は境界条件から既知の量である。

未知数 u_{ij} ($1 \leq i, j \leq N-1$) を並べた $n = (N-1)^2$ 次元ベクトル

$$\mathbf{u} = (u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1,N-1}; u_{21}, u_{22}, \dots, u_{2,N-1}; \dots; u_{N-1,1}, \dots, u_{N-1,N-1})^T$$

として、対角行列

$$D = \text{diag} \left(\overbrace{d_1, \dots, d_1}^{(N-1) \text{ 個}}; \overbrace{d_2, \dots, d_2}^{(N-1) \text{ 個}}; \dots; \overbrace{d_{N-1}, \dots, d_{N-1}}^{(N-1) \text{ 個}} \right)$$

を定義すると、 AD が狭義優対角行列になる。このことから、 A の正則性が導かれる。

3 定理をどう使うか

線形代数に限らないが、工学部の学生に数学を教える際には、定理はどう使えるのか、を適切に説明することが大切である。Sylvester の慣性則を例としてこのことを説明したい。

Sylvester の慣性則は、固有値の符号に関する基本定理であり、次のような内容である。対称行列 A の固有値のうち、正、0、負のもの個数を $\nu_+(A)$, $\nu_0(A)$, $\nu_-(A)$ と書く。重複固有値はその重複度分だけ数えることにするので、 A が n 次行列ならば、 $\nu_+(A) + \nu_0(A) + \nu_-(A) = n$ が成り立つ。

Sylvester の慣性則 : A を実対称行列、 S を正則行列として、 $B = S^T A S$ とおくと、

$$\nu_+(A) = \nu_+(B), \quad \nu_0(A) = \nu_0(B), \quad \nu_-(A) = \nu_-(B)$$

が成り立つ。

変換行列 S が直交行列ならば、 $B = S^T A S$ の固有値は A の固有値と同じ値であるが、 S が一般の正則行列のときには、別の値になる。しかし、符号の情報は保存されるというのが Sylvester の慣性則の主張である。

Sylvester の慣性則の意義について、以下の二つの説明を比較されたい。もちろん、両方とも正しいのであるが、どちらが学生にとって面白いか、ということである。

Sylvester の慣性則 \implies 平方完成 Sylvester の慣性則は、2次形式 $\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ の平方完成

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \sum_k c_k (x_1, x_2, \dots, x_n \text{ の } 1 \text{ 次式})^2$$

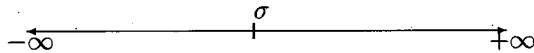
において、係数 c_k の正、負のもの個数が平方完成の仕方に依らずに一定であることを示している。たとえば、 $A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$ の定める2次形式 $x_1^2 - 4x_1x_2 + 2x_2^2$ に対して

$$x_1^2 - 4x_1x_2 + 2x_2^2 = (x_1^2 - 4x_1x_2 + 4x_2^2) - 2x_2^2 = (x_1 - 2x_2)^2 - 2x_2^2,$$

$$x_1^2 - 4x_1x_2 + 2x_2^2 = 2(x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2) - x_1^2 = 2(x_1 - x_2)^2 - x_1^2$$

などとなるが、いずれの場合にも、正のものが $\nu_+(A) = 1$ 個、負のものが $\nu_-(A) = 1$ 個である。

Sylvester の慣性則 \implies 固有値計算法 Sylvester の慣性則は、対称行列の固有値の数値計算に利用される。対称行列 A の固有値は実数であるから、任意の実数 σ に対して、 σ より大きい固有値、 σ に等しい固有値、 σ より小さい固有値のそれぞれの個数がわかれば、 σ を変化させることによって、行列 A のすべての固有値の存在範囲をどんどん狭めていくことができる。



具体的には、実数 σ を任意に選んで、 $A - \sigma I$ を下三角行列 L と対角行列 D を用いて $A - \sigma I = LDL^T$ の形に分解する（これは Gauss の消去法と同様にして実行できる [5]）。Sylvester の慣性則により、 $A - \sigma I$ と D の符号指数は等しい。 $A - \sigma I$ の符号指数 $(\nu_+(A - \sigma I), \nu_0(A - \sigma I), \nu_-(A - \sigma I))$ は、行列 A の固有値のうち、 σ より大きいもの、 σ に等しいもの、 σ より小さいものの個数に等しい。一方、対角行列 D の符号指数 $(\nu_+(D), \nu_0(D), \nu_-(D))$ は、行列 D の対角要素の正、0、負の個数に等しいから、これは直ちにわかる。区間 (σ_1, σ_2) に含まれる固有値の個数がわかったとき、新たな σ として、この区間の midpoint $(\sigma_1 + \sigma_2)/2$ を採用することが多い。このようにして対称行列の固有値の近似値を数値的に求める方法は、2分法（バイセクション法）とよばれる。

私の経験からすると、平方完成の不変性よりも、固有値の数値計算アルゴリズムへの応用の方が工学部の学生には受け入れやすいようである。

4 概念の実例を教える

正定値行列という概念は、応用において重要である。その定義と判定条件に加えて、どのような行列が正定値なのか、を説明することが大切であると考えている。本節ではその解説の例を示そう（[1] の記述を簡略にしたものである）。最初の二つは確率変数に関係する例であり、その次は構造力学の例である。

例 1. 互いに相関のある確率変数 X_1, X_2, \dots, X_n に対して、それぞれの期待値 $m_i = E[X_i]$ と分散 $V_i = E[(X_i - m_i)^2]$ が存在する（有限値である）と仮定すると、共分散 $E[(X_i - m_i)(X_j - m_j)]$ ($i \neq j$) も存在するので、

$$c_{ij} = E[(X_i - m_i)(X_j - m_j)] \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

を (i, j) 要素とする共分散行列 $C_i = (c_{ij})$ を考えることができる。共分散行列は半正定値対称行列である。実際、確率変数を成分にもつベクトル

$$Y = [X_1 - m_1, X_2 - m_2, \dots, X_n - m_n]^T$$

を考えると、 $C = E[YY^T]$ であり、任意のベクトル $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ に対して、

$$\mathbf{u}^T C \mathbf{u} = \mathbf{u}^T E[YY^T] \mathbf{u} = E[\mathbf{u}^T YY^T \mathbf{u}] = E[(Y^T \mathbf{u})^2] \geq 0$$

となる。確率が非負の実数で表されることの帰結として、半正定値行列が生じている。

例 2. 確率変数 X に対して、実数値変数 t についての複素数値関数

$$\varphi(t) = E[\exp(\sqrt{-1} tX)]$$

を X の特性関数という。特性関数 $\varphi(t)$ は確率分布の Fourier 変換であり、 $\varphi(0) = 1$ 、 $\varphi(-t) = \overline{\varphi(t)}$ を満たす。任意の実数 t_1, t_2, \dots, t_n を選んで、 $\varphi(t_i - t_j)$ を (i, j) 要素とする複素行列

$$\Phi = (\varphi(t_i - t_j) \mid i, j = 1, 2, \dots, n)$$

を考えると、行列 Φ は対角要素がすべて 1 の Hermite 行列である。さらに、行列 Φ は半正定値である。実際、任意の複素ベクトル \mathbf{u} に対して、

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* \Phi \mathbf{u} &= \sum_{i,j} \bar{u}_i u_j \varphi(t_i - t_j) \\ &= E\left[\sum_{i,j} \bar{u}_i u_j \exp(\sqrt{-1} (t_i - t_j)X)\right] \\ &= E\left[\left(\sum_i \bar{u}_i \exp(\sqrt{-1} t_i X)\right) \left(\sum_j u_j \exp(-\sqrt{-1} t_j X)\right)\right] \\ &= E\left[\left|\sum_j u_j \exp(-\sqrt{-1} t_j X)\right|^2\right] \geq 0 \end{aligned}$$

となる。

このように、 $\varphi(t)$ が特性関数ならば、任意の n と任意の実数 t_1, t_2, \dots, t_n に対して、行列 $\Phi = (\varphi(t_i - t_j))$ は半正定値 Hermite 行列である。この性質は特性関数の本質であり、関数 $\varphi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ がこの性質（と $t = 0$ における連続性）をもつならば、 $\varphi(t)$ はある確率変数の特性関数である（Bochner の定理）。確率密度関数の正值性（非負性）が、特性関数においては行列 Φ の半正定値性に反映されると理解できる。

例 3. トラス構造に現れる半正定値行列を述べよう。図 1 に示したような平面トラスを考える。このトラスは、9 本の部材から成り、 $n = 4$ 個の自由節点（節点 1 ~ 4）と 2 個の支点（固定された節点 5, 6）から成る。

まず、1 本の部材に着目し、その両端の節点を i, j とする。また、その弾性係数を $E = E_{ij}$ 、部材長を $L = L_{ij}$ 、断面積を $A = A_{ij}$ とする。節点 i, j の変形前の座標値を $(x_i^0, y_i^0), (x_j^0, y_j^0)$ とすると、

$$L = \sqrt{(x_i^0 - x_j^0)^2 + (y_i^0 - y_j^0)^2}$$

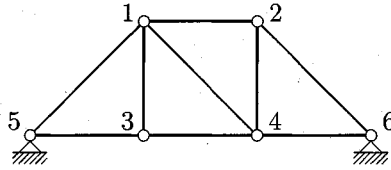


図 1: トラス構造

である。節点 i, j の変形後の座標値を

$$(x_i, y_i) = (x_i^0 + u_i, y_i^0 + v_i), \quad (x_j, y_j) = (x_j^0 + u_j, y_j^0 + v_j)$$

とすると、部材の伸び ΔL は

$$\Delta L = \sqrt{((x_i^0 + u_i) - (x_j^0 + u_j))^2 + ((y_i^0 + v_i) - (y_j^0 + v_j))^2} - L$$

で与えられる。微小変形理論では、これを $(u_i, v_i), (u_j, v_j)$ の原点の周りで 1 次式で近似する。すなわち、

$$\Delta L \approx \begin{bmatrix} -\alpha & -\beta & \alpha & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ u_j \\ v_j \end{bmatrix} = \mathbf{b}^\top \mathbf{u}$$

とする。ここで

$$\alpha = \frac{x_j^0 - x_i^0}{L}, \quad \beta = \frac{y_j^0 - y_i^0}{L} \quad (3)$$

は、節点 i から節点 j に向かうベクトルの方向余弦を表し、 $\mathbf{b} = (-\alpha, -\beta, \alpha, \beta)^\top$, $\mathbf{u} = (u_i, v_i, u_j, v_j)^\top$ である。弾性エネルギーは

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{EA}{L} \cdot (\Delta L)^2 = \frac{1}{2} \cdot \mathbf{u}^\top \left(\frac{EA}{L} \cdot \mathbf{b}\mathbf{b}^\top \right) \mathbf{u} = \frac{1}{2} \mathbf{u}^\top \mathbf{K} \mathbf{u}$$

となる。この 2 次形式を定める行列

$$\mathbf{K} = \frac{EA}{L} \cdot \mathbf{b}\mathbf{b}^\top = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} -\alpha \\ -\beta \\ \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\alpha & -\beta & \alpha & \beta \end{bmatrix} = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} \alpha^2 & \alpha\beta & -\alpha^2 & -\alpha\beta \\ \alpha\beta & \beta^2 & -\alpha\beta & -\beta^2 \\ -\alpha^2 & -\alpha\beta & \alpha^2 & \alpha\beta \\ -\alpha\beta & -\beta^2 & \alpha\beta & \beta^2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

は、一つの部材の剛性を表す行列で、階数が 1 の半正定値対称行列である。 \mathbf{K} が半正定値行列であることは、ばね定数が非負の実数であることに対応している。

トラス構造全体を考えるには、各部材に対応する行列 K を以下のように重ね合わせればよい。図1のトラスでは、自由節点が $n = 4$ 個なので、 $2n = 8$ 次行列の中に式(4)の形の行列を埋め込む。たとえば、節点 $i = 1$ と $j = 3$ を結ぶ部材に対応して、8次行列

$$K^{(1,3)} = \frac{EA}{L} \times \begin{array}{c} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ u_3 \\ v_3 \\ u_4 \\ v_4 \end{array} \left[\begin{array}{cc|cc|cc|cc} \alpha^2 & \alpha\beta & & & -\alpha^2 & -\alpha\beta & & \\ \alpha\beta & \beta^2 & & & -\alpha\beta & -\beta^2 & & \\ \hline & & & & & & & \\ \hline -\alpha^2 & -\alpha\beta & & & \alpha^2 & \alpha\beta & & \\ -\alpha\beta & -\beta^2 & & & \alpha\beta & \beta^2 & & \\ \hline & & & & & & & \\ & & & & & & & \end{array} \right]$$

を定義する (α, β は式(3)で $(i, j) = (1, 3)$ としたものであり、 $E = E_{13}$, $A = A_{13}$, $L = L_{13}$ である)。このとき、トラス全体の剛性行列は、各部材の剛性行列の和として、

$$\tilde{K} = \sum_{(i,j)} K^{(i,j)}$$

で与えられる。自由節点の変位を表すベクトルを $\tilde{\mathbf{u}} = (u_1, v_1, u_2, v_2, \dots, u_n, v_n)^T$ とすると、剛性行列 \tilde{K} の定める2次形式

$$\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{K} \tilde{\mathbf{u}}$$

が、トラス全体の弾性エネルギーを表す。各 $K^{(i,j)}$ は半正定値行列であり、半正定値行列の和は半正定値だから、全体の剛性行列 \tilde{K} も半正定値行列である。剛性行列がわかれば、構造物の釣合い解析（静的解析）を行うことができる。

固有振動数などの解析（動的解析）を行うには、剛性行列に加えて、質量行列も必要である。質量行列は、モデル化の仕方によっていくつかの変種がある。平面トラスの場合、一つの部材に対応する質量行列として、集中質量行列

$$M_L = \frac{\rho AL}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

や整合質量行列

$$M_C = \frac{\rho AL}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

が用いられる。ここで、 ρ は部材の密度を表す。いずれの質量行列も、正定値対称行列である。質量行列が正定値行列であることは、質点の質量が正の実数であることに対応している。

5 応用に直接結びつく話題

線形代数の中心的な話題は、実数や複素数を要素とする行列やベクトルに関する方程式や固有値の理論であるが、基本的な話題から外れたところにあるが応用に直接結びつく話題として、以下のような項目が考えられる [2]。このような項目についても、工学部においては4年次（あるいは修士課程）において、適宜教える必要がある。

1. 行列とグラフ（有向グラフ，2部グラフ）

数値情報を捨象して構造情報だけに着目した手法である。非負行列の固有ベクトル (Markov 連鎖の定常分布) に関する理論に利用されるだけでなく、工学においては、大規模システムの分解や数値計算の効率化にも利用される。

2. 非負行列（Perron-Frobenius の定理，確率行列，M 行列，二重確率行列）

実数に特有の性質である符号（正と負）を加味した理論である。確率は非負であるから、非負行列の理論は、確率的手法の基礎となる。また、電圧を上げれば電流も増えるという類の単調性は、システムの特性を理解する際の最も基本的な概念の一つであるが、この種の単調性は非負行列の変種である M 行列の概念に対応する。

3. 線形不等式系（Fourier-Motzkin の消去法，線形不等式系の解，線形計画法）

等式関係（方程式）ではなく、不等式関係の理論である。不等式は最適化問題における制約式を表現するためなどに利用され、不等式の理論は線形計画法の理論的基礎を与える。数学的には、双対性とよばれる興味深い事実がある。

4. 整数行列（単模行列 (ユニモジュラ行列)，Hermite 標準形，Smith 標準形 (単因子標準形)，線形方程式系の整数解・整数性)

（実数ではなく）整数を要素とする行列の理論である。数学的には「整除関係（割り算）」が問題となる。工学においても、個数や人数を数えたり、化学反応を記述したりする際に整数が必要である。また、ネットワーク構造は整数行列と密接な関係をもつ。

5. 多項式行列（単模行列，Hermite 標準形，Smith 標準形 (単因子標準形)，線形方程式系の多項式解，行列束)

(実数や複素数のような数ではなく)多項式という関数を要素とする行列の理論である。この場合にも「整除関係(割り算)」が問題となり、数学的な構造は整数行列に似ている。工学においては、Laplace変換を通じて多項式行列が登場する。微分方程式の数値解法(動的システムのシミュレーション)や制御理論においては、多項式行列の理論が有用である。ここに挙げた内容をさらに深めた理論は、制御理論の現代的な道具として利用される。

6. 一般逆行列(最小ノルム型, 最小2乗型, Moore-Penrose型)

長方形行列や正則でない正方形行列に対しても逆行列と似たものが定義できることを示している。統計学における回帰分析や構造工学などにおいて、変数と方程式の自由度が不整合の場合に多用される便利な道具である。

7. 群表現論(対称性と群, 群表現の性質, ブロック対角化)

群論的対称性という要素を加味した線形代数の理論である。群論的対称性をもつ行列は、ブロック対角形に分解可能である。システムが(何らかの意味で)対称であるという直観を数式の形にすることで、その特性を利用できるようになる。対称性に着目する手法は、物理、化学を始めとして、構造工学、最適化など多くの分野において利用される。

6 おわりに

工学部における線形代数の役割は多面的である。工学の問題を扱う際に、適切な概念を提供し、計算可能な推論を可能とする便利な数学的道具である。それと同時に、論理的思考の訓練の場としての役割も大きい。

参考文献

- [1] 室田一雄, 杉原正顕: 東京大学工学教程 線形代数 I, 丸善出版, 2015.
- [2] 室田一雄, 杉原正顕: 東京大学工学教程 線形代数 II, 丸善出版, 2013.
- [3] 齋藤正彦: 線型代数入門, 東大出版会, 1966.
- [4] 齋藤毅: 線形代数の世界—抽象数学の入口, 東京大学出版会, 2007.
- [5] 杉原正顕, 室田一雄: 線形計算の数理, 岩波, 2009.