

線形代数の数理

1 ベクトル空間

1.1 ベクトル空間の基礎

ベクトル空間

ある集合 V の元 u と v に関して和 $u+v$ とスカラー倍 au が定義されており、それらが以下の条件を満たすとする。このときの集合 V のことをベクトル空間と言う。ベクトル空間の元を特別にベクトルと言う。

- 和の結合則: $(u+v)+w=u+(v+w)$ 。
- 和の交換則: $u+v=v+u$ 。
- V に特別な元 0 が存在していて、任意の $u \in V$ に対して $u+0=u$ が成立する。
- 任意の $u \in V$ に対して $u+v=0$ となるような元 $v \in V$ が存在する (この v のことを $-u$ と書く)。
- スカラー倍の分配則: $a(u+v)=au+av$ 。
- スカラー倍の結合則: $ab(u)=a(bu)$ 。

ある集合が上記の条件を満たしているとき、その集合の元をベクトルと言う。最も馴染みのあるベクトルは、 K^n 次元空間上の矢印と例えられる $(u_1, \dots, u_n)^T$ であろう (このような表記をしたベクトルを特別に数ベクトルと呼ぶことが多い)。一方でベクトル空間の定義に従えば、ベクトルと呼べるものは数ベクトルに限らない。例えば多項式もベクトルの有名な例である。

部分空間

ベクトル空間 V の部分集合 W がベクトル空間の条件を満たすとき、 W のことを V の部分空間と言う。

定理 1.1.1

ベクトル空間 V の部分集合 W を考える。任意のベクトル $u, v \in W$ が $u+v \in W$ 及び $au \in W (a \in K)$ を満たすとき、 W は部分空間である。

1.1.1 線形結合

線形結合

V は K 上のベクトル空間であるとし、 $v_i \in V (i=1, \dots, n)$ とする。ベクトル $x \in V$ に対して、 $x = \lambda_i v_i$ を満たす $\lambda_i (i=1, \dots, n)$ が存在するとき、 x は $v_i (i=1, \dots, n)$ の線形結合であると言う。

$\{v_1, \dots, v_n\}$ は V の部分集合であるとする。 $\{v_1, \dots, v_n\}$ に関する線形結合全体の集合を $\langle v_1, \dots, v_n \rangle$ と書く。明らかにこれは V の部分空間である。この部分空間 $\langle v_1, \dots, v_n \rangle$ のことを $\{v_1, \dots, v_n\}$ が張る部分空間と言う。

系 1.1.1

V は K 上のベクトル空間、 W は V の部分空間とする。 $v_i (i=1, \dots, n) \in W$ ならば $\langle v_1, \dots, v_n \rangle \subset W$ 。

線形独立と線形従属

V は K 上のベクトル空間であるとする。 $v_i (i=1, \dots, n) \in V$ について以下の条件が成り立つとき、ベクトルの組 (v_1, \dots, v_n) は線形独立であると言う。また、線形独立でないベクトルの組を線形従属と言う。

- スカラーの組 $\lambda_i (i=1, \dots, n)$ であって、 $\lambda_i v_i = 0$ を満たすものは $\lambda_i = 0 (i=1, \dots, n)$ のみである。

ベクトルの組 (v_1, \dots, v_n) が線形独立である場合、いずれの $v_i (i=1, \dots, n)$ もゼロベクトルではない。仮に v_j がゼロベクトルであった場合、スカラー λ_j の値は $\lambda_j v_j$ の結果に影響を与えなくなる。また、 (v_1, \dots, v_n) は相異なる。これも線形独立の条件より明らかであろう。

定理 1.1.2

K 上のベクトル空間と、線形独立なベクトルの組 (v_1, \dots, v_n) を考える。このとき任意の $s (1 \leq s \leq n)$ について (v_1, \dots, v_s) も線形独立なベクトルの組である。

証明: (v_1, \dots, v_s) について $\sum_{i=1}^s \lambda_i v_i = 0$ が成り立つとする。このとき $\sum_{i=1}^s \lambda_i v_i + 0v_{s+1} + \dots + 0v_n = 0$ であり、 (v_1, \dots, v_n) は線形独立であるため $\lambda_i = 0 (i=1, \dots, s)$ でなければならない。従って本命題は正しい。□

基底

K 上のベクトル空間 V について、 V のベクトルの組 (v_1, \dots, v_n) が以下の条件を満たすとき、集合 $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ は V の基底であると言う。

- (v_1, \dots, v_n) は線形独立。
- $\langle v_1, \dots, v_n \rangle = V$ 。

K 上のベクトル空間は必ず基底を有するが、この証明は難しいので本資料では取り扱わない。

定理 1.1.3

K 上のベクトル空間 V の部分集合 $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ は V の基底であるとする。このとき、任意のベクトル $x \in V$ は $x = \lambda_i v_i$ で表すことができ、かつ $\lambda_i (i = 1, \dots, n)$ は一意に決まる。

証明： $\langle v_1, \dots, v_n \rangle = V$ より、任意の x が (v_1, \dots, v_n) の線形結合で表されることは明らか。そこで、 $x \in V$ が $x = \lambda_i v_i$ 並びに $x = \lambda'_i v_i$ の2通りで書き表したとする。このとき $x - x = (\lambda_i - \lambda'_i) v_i = \mathbf{0}$ であるが、線形独立ゆえに $\lambda_i = \lambda'_i$ でなければならない。従って本定理は正しい。□

K 上のベクトル空間 V が有限個のベクトルから成る基底 (v_1, \dots, v_n) を有するとき、 V は有限次元であると言う。

補題 1.1

r は正の整数であるとする。 r 個の $\mathbf{0}$ でないベクトル (v_1, \dots, v_r) に対して $\langle v_1, \dots, v_r \rangle$ を考える。 $\langle v_1, \dots, v_r \rangle$ から $(r+1)$ 個のベクトルを取ったとき、そのベクトルの組は線形従属である。

定理 1.1.4

V は K 上のベクトル空間であるとする。このとき、 V の基底を成すベクトルの個数は基底の取り方に依らず一定である。このベクトルの個数を V の次元と言い、 $\dim V$ と書く。

定理 1.1.5

V は K 上のベクトル空間であるとする。 W は V の部分空間であるとし、 W の部分集合 T は W の基底であるとする。このとき、 V の基底 S であって T を含むものが存在する。

定理 1.1.6

V は K 上のベクトル空間であるとする。このとき V の部分空間 W について $\dim W \leq \dim V$ が成立し、等号成立は $W = V$ に限る。

系 1.1.2

K 上の n 次元ベクトル空間 V と部分集合 $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ を考える。このとき、以下の条件は同値である。

- S は線形独立である。
- $V = \langle S \rangle$ 。
- S は V の基底である。

1.1.2 部分空間の和と直和

部分空間の和

W_1, \dots, W_r はベクトル空間 V の部分空間であるとする。ベクトル $v \in V$ であって、 $v = \sum w_i (w_i \in W_i)$ を満たす $w_i (i = 1, \dots, r)$ が存在するとき、 v 全体の集合を部分空間 (W_1, \dots, W_r) の和と言い、 $W_1 + \dots + W_r$ (もしくは $\sum W_i$) と書き表す。

定理 1.1.7

部分空間の和 $\sum W_i$ は V の部分空間である。

証明： $a, b \in \sum W_i$ に対して、それぞれ $a = \sum w_i, a = \sum w'_i$ のように表されたとする ($w_i, w'_i \in W_i$)。このとき、 $a + b = \sum (w_i + w'_i) \in \sum W_i$ 、 $\lambda a = \sum (\lambda w_i) \in \sum W_i$ が成立するため、本定理は正しい。□

定理 1.1.8

W_1, \dots, W_r がベクトル空間 V の部分空間であるとき、 $\dim(\sum W_i) \leq \sum \dim W_i$ が成立する。

この定理の直感的解釈を紹介する。まず、ベクトル空間 V の次元数を n とし、基底として $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ があり、そのうち $W_i (i = 1, \dots, r)$ のいずれかに含まれるベクトルの集合を $S' = \{v_1, \dots, v_m\}$ とする。この場合、当然ながら

$\dim(\sum W_i) = m$ となる。一方で例えば v_i が W_i と W_j の両方に含まれることもある。つまり、基底を成すベクトルを相異なる部分空間で共有していることもあり、この場合 $\sum \dim W_i > m$ の計算では v_i が重複してカウントされるため、本定理の不等式が成り立つ。

直和

W_1, \dots, W_r はベクトル空間 V の部分空間であるとする。部分空間の和 $\sum W_i$ が直和であるとは、次の条件が成り立つときに言う。

- ベクトル $w_i \in W_i (i = 1, \dots, r)$ について $\sum w_i = \mathbf{0}$ が成り立つならば、 $w_i = \mathbf{0} (i = 1, \dots, r)$ である。

部分空間の和が直和であるとき、 $W_1 + \dots + W_r$ の代わりに $W_1 \oplus \dots \oplus W_r$ と書く。

直和である場合、 W_i 間で同じ基底ベクトルを共有しない。もしも W_i と W_j の間で何か基底ベクトルを共有している場合、 $w_i + w_j$ において相殺することが可能となるためである。従って $\dim(W_1 \oplus \dots \oplus W_r) = \sum \dim W_i$ が成立する。このように考えれば、以下の系は自明である。

系 1.1.3

r を 2 以上の整数とし、ベクトル空間 V の $\{\mathbf{0}\}$ でない部分空間の和 $\sum W_i$ は直和であるとする。 $W_i (i = 1, \dots, r)$ の基底を S_i としたとき、 $\bigcup S_i$ は $\sum W_i$ の基底である。

定理 1.1.9

V は K 上のベクトル空間であるとする。 V の部分空間 W に対して、 $V = W \oplus W'$ を満たす、 V の部分空間 W' が存在する。このような部分空間を W の補部分空間と言う。

部分空間に対して補部分空間は一意的に定まらない。例えば 2 次元ベクトル空間 K^2 に対して、 W は $\{e_1\}$ が張るベクトル空間とする。このとき、 $\{e_2\}$ が張るベクトル空間は W の補部分空間であるが、同様に $\{e_2, e_1 + e_2\}$ が張るベクトル空間も W の補部分空間と言える。

K 上のベクトル空間 V が r 個の部分空間 W_1, \dots, W_r の直和として表されたとする。このような $W_i (i = 1, \dots, r)$ を見出すことを直和分解と言い、各部分空間 W_i を直和因子と言う。

定理 1.1.10

K 上のベクトル空間 V は直和分解 $W_1 \oplus \dots \oplus W_r$ を持つとする。このとき、任意の $v \in V$ に対して $v = \sum w_i$ を満たす $w_i (i \in W_i)$ がただ一通りに定まる。

証明：定義より、 $v = \sum w_i$ を満たすベクトルの組 (w_1, \dots, w_r) は少なくとも一つは存在する。 v が $\sum w_i$ と $\sum w'_i$ の二通りの表現方法があるとする。このとき、 $\sum (w_i - w'_i) = \mathbf{0}$ で $(w_i - w'_i) \in W_i$ であるが、直和の定義より $w_i - w'_i = \mathbf{0}$ でなければならない。従って本定理は正しい。□

1.2 線形写像

1.2.1 写像

X と Y は空でない集合であるとする。 X の要素それぞれに対して、 Y の要素を一つ対応させる対応関係を、 X から Y への写像と言う。 f が X から Y への写像であることを $f: X \rightarrow Y$ と表す。

写像 $f_1: X \rightarrow Y$ と $f_2: X \rightarrow Y$ について、任意の $x \in X$ に対し $f_1(x) = f_2(x)$ であるとき、両写像は等しいと言い、 $f_1 = f_2$ と書く。

全ての要素 $x \in X$ に対し、 $f(x) = x$ となるような写像 $f: X \rightarrow X$ のことを X 上の恒等写像と言う。本資料では恒等写像を 1_X と書くことにする。

写像 $f: X \rightarrow Y$ と $g: Y \rightarrow Z$ を考える。このとき、任意の $x \in X$ に対する写像の結果 $f(x) \in Y$ は、更に g によって写像することができる。この場合、 $g(f(x))$ が得られる訳だが、一般的には $g \circ f(x)$ と書くことが多い。この $g \circ f: X \rightarrow Z$ のことを f と g の合成写像と言う。明らかに合成写像について $(h \circ g) \circ f = h \circ (g \circ f)$ が成立する。そのため、3 つ以上の合成写像に対してわざわざ括弧で囲むようなことはせず、単に $f_n \circ f_{n-1} \circ \dots \circ f_1$ のように書き表す。

単射、全射

写像 $f: X \rightarrow Y$ について考える。

- $f(x) = f(x')$ ならば $x = x'$ であるとき、 f は単射であると言う。
- 任意の $y \in Y$ に対して、 $y = f(x)$ を満たす $x \in X$ が存在する場合、 f は全射であると言う。
- 単射かつ全射であることを全単射と言う。

明らかに恒等写像は全単射である。

定理 1.2.1

写像 $f: X \rightarrow Y$ と $g: Y \rightarrow Z$ の合成写像について、以下のことが成り立つ。

1. f と g が単射ならば $g \circ f$ も単射である。
2. f と g が全射ならば $g \circ f$ も全射である。

証明：

(1) $x, x' \in X$ について、 $g \circ f(x) = g \circ f(x')$ が成り立つとする。このとき $g(f(x)) = g(f(x'))$ かつ g は単射であるため、 $f(x) = f(x')$ が成り立つ。さらに f も単射であるため、 $x = x'$ が成り立つ。従って (1) は正しい。
 (2) $z \in Z$ に対して、 $z = g(y)$ を満たす $y \in Y$ が必ず存在する。更に $y = f(x)$ を満たす $x \in X$ も必ず存在するため、 $z = g \circ f(x)$ を満たす x が必ず存在することになる。従って (2) は正しい。□

本命題より明らかに、 f と g が全単射なら $g \circ f$ も全単射であることが言える。

写像 f は全単射であるとする。このとき、任意の $y \in Y$ に対して $y = f(x)$ を満たす $x \in X$ がただ一つ存在する。この対応により、 Y から X への逆向きの写像も定まる。これを f の逆写像と言い、 f^{-1} と書き表す。

定理 1.2.2

$f: X \rightarrow Y$ と $g: Y \rightarrow X$ について、 $g \circ f = 1_X$ および $f \circ g = 1_Y$ が成り立つとき、 f は全単射で $g = f^{-1}$ である。

証明： $x, x' \in X$ について $f(x) = f(x')$ が成り立つとする。このとき $g(f(x)) = 1_X(x) = x = g(f(x')) = 1_X(x') = x'$ が成立するため、 f は単射である。また、任意の $y \in Y$ に対して $g(y) \in X$ である。 $f(g(y)) = y$ であるため f は全射である。従って f は全単射であり、 $g = f^{-1}$ である。□

1.2.2 線形写像

線形写像

U と V は K 上のベクトル空間であるとする。写像 $f: U \rightarrow V$ が次の二つの条件を満たすとき、 f は線形写像であると言う。

- 任意の $x, y \in U$ に対して $f(x + y) = f(x) + f(y)$ が成立する。
- 任意の $x \in U$ とスカラー $\lambda \in K$ に対して $f(\lambda x) = \lambda f(x)$ が成り立つ。

線形写像の中でも特に $f: X \rightarrow X$ なるものを線形変換と言う。

命題 1.2.1

U と V は K 上のベクトル空間であるとする。写像 $f: U \rightarrow V$ が線形写像であるとき、 $f(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ である。

証明： $f(\mathbf{0} + \mathbf{0}) = 2f(\mathbf{0}) = f(\mathbf{0})$ より明らか。□

定理 1.2.3

$f: U \rightarrow V$ と $g: V \rightarrow W$ が線形写像であるとき、 $g \circ f$ も線形写像である。

証明： $x, y \in U$ に対し、 $g \circ f(x + y) = g(f(x) + f(y)) = g \circ f(x) + g \circ f(y)$ が成立する。同様に $\lambda \in K$ に対して $g \circ f(\lambda x) = g(\lambda f(x)) = \lambda(g \circ f(x))$ が成立する。従って本命題は正しい。□

定理 1.2.4

線形写像 $f: U \rightarrow V$ が全単射であるとき、 $f^{-1}: V \rightarrow U$ も線形写像である。

証明：任意の $x, y \in V$ に対して $f^{-1}(x) = a$ および $f^{-1}(y) = b$ を満たす $a, b \in U$ がただ一つ存在する。また、明らかに $x = f(a)$ および $y = f(b)$ である。 f の線形性より $x + y = f(a + b)$ であるため、 $a + b = f^{-1}(x + y) = f^{-1}(x) + f^{-1}(y)$ が最終的に得られる。同様にスカラー倍に対しての条件も f^{-1} は満たす。よって本命題は正しい。□

核と像

U と V は K 上のベクトル空間であるとする。写像 $f: U \rightarrow V$ を考える。

- U の部分集合 $\text{Ker} f = \{x \in U \mid f(x) = \mathbf{0}_V\}$ を f の核と言う。
- V の部分集合 $\text{Im} f = \{y \in V \mid y = f(x) \text{ を満たす } x \in U \text{ が存在する}\}$ を f の像と言う。

定理 1.2.5

U と V は K 上のベクトル空間であるとする。 $f: U \rightarrow V$ が線形写像であるとき、

1. $\text{Ker} f$ は U の部分空間である。
2. $\text{Im} f$ は V の部分空間である。

証明：

- (1) $x, y \in \text{Ker } f$ に対し、 $f(x+y) = \mathbf{0}$ であること、並びに $\lambda \in K$ に対して $f(\lambda x) = \mathbf{0}$ であることから明らか。
 (2) ベクトル $v, w \in \text{Im } f$ を考える。このとき $v = f(a)$ および $w = f(b)$ を満たす $a, b \in U$ が存在する。 $v+w = f(a+b)$ で $a+b \in U$ なので、 $v+w \in \text{Im } f$ である。スカラー倍についても同様。 \square

系 1.2.1

$f: U \rightarrow V$ が線形写像であるとき、 f が単射であることと $\text{Ker } f = \{\mathbf{0}_U\}$ であることは同値である。

K 上のベクトル空間 U, V と線形写像 $f: U \rightarrow V, g: U \rightarrow V$ を考える。線形写像の和とスカラー倍を

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x), \quad (\lambda f)(x) = \lambda f(x)$$

と定めたとき、明らかに線形写像の和とスカラー倍も線形写像である。また、任意の $u \in U$ に対して $f(u) = \mathbf{0}_V$ となる写像をゼロ写像と言う。ゼロ写像も明らかに線形写像である。

以下は線形写像における重要なベクトル空間である。

定理 1.2.6

U と V は K 上のベクトル空間であるとする。 U から V への線形写像が成す集合を $\text{Hom}_K(U, V)$ と書く。和とスカラー倍が前述のように定められたとき、ゼロ写像をゼロベクトルだと見なせば、 $\text{Hom}_K(U, V)$ は K 上のベクトル空間である。

ベクトル空間 V が直和分解 $V = W_1 \oplus \dots \oplus W_r$ を持つとする。定理 1.10 より、任意の $v \in V$ に対して $v = \sum w_i$ を満たす $w_i \in W_i$ がただ一通りに定まる。そこで、 V から V への写像 p_i を

$$p_i: V \rightarrow V, \quad p_i(v) = w_i$$

のように定義する。このとき v は

$$v = \sum p_i(v)$$

のように書き表すことができる。このような写像 p_i を V から W_i への射影と呼ぶ。

定理 1.2.7

V は K 上のベクトル空間であるとし、 $p_i (i = 1, \dots, r)$ は直和分解 $V = W_1 \oplus \dots \oplus W_r$ から定まる、 V から W_i への射影だとする。このとき、以下のことが成り立つ。

1. $p_i (i = 1, \dots, r)$ は線形写像である。
2. $\text{Im } p_i = W_i$ である。
3. $p_i \circ p_i = p_i$ である。
4. $p_i \circ p_j$ はゼロ写像である。
5. $p_1 + \dots + p_r = 1_V$ である。

証明：

(1) ベクトル $x, y \in V$ について、

$$x + y = \sum \{p_i(x) + p_i(y)\}$$

が成り立つ。 $p_i(x), p_i(y) \in W_i$ かつ $p_i(x) + p_i(y) \in W_i$ である。従って射影の定義から $p(x+y) = p(x) + p(y)$ が成り立つ。スカラー倍に関しても同様。

(2) 射影の定義より、 $\text{Im } p_i \subset W_i$ であることは明らか。 $w_i \in V$ が $w_i \in W_i$ でもある場合、 $p_i(w_i) = w_i$ が任意の $w_i \in W_i$ で成り立つ。従って $W_i \text{Im } p_i$ であるから、 $\text{Im } p_i = W_i$ を最終的に得る。(3)(4)(5) 定義より明らか。 \square

1.2.3 線形変換

繰り返しになるが、 V が K 上のベクトル空間であって、 V から V 自身への線形写像のことを、特別に V の線形変換と言う。定理 1.16 において、 $U = V$ の場合を考えれば、 V 上の線形変換のなす集合 $\text{Hom}_K(V, V)$ は K 上のベクトル空間になる。一般的に、 $\text{Hom}_K(V, V)$ のことを $\text{End}_K(V)$ と書く。

V 上の線形変換の合成写像は、再び V 上の線形変換となる (定理 1.13)。線形変換の場合、合成写像を $g \circ f$ の代わりに gf のように書く。

系 1.2.2

V は K 上のベクトル空間であるとする。 f, g, h が V 上の線形変換で、 λ がスカラーのとき、以下の等式が成り立つ。

- $f0_v = 0_v f = 0_v$
- $f1_V = 1_V f = f$
- $(fg)h = f(gh)$
- $f(g+h) = fg + fh, (f+g)h = fh + gh$
- $\lambda(fg) = f(\lambda g)$

単なる合成写像であるが、系 1.5 より線形変換には積が定義されていると見なせる。そこで、線形変換 f と整数 n に対して、 $f^n = ff \dots f$ と定める (右辺の f は n 個)。ここから更に拡張して、多項式に線形変換を代入する操作を以下のように定義する。

線形変換の多項式への代入

V は K 上のベクトル空間とし、 f は V 上の線形変換であるとする。 K 係数の多項式

$$P(x) = c_d x^d + c_{d-1} x^{d-1} \dots + c_1 x + c_0$$

に対して、 V 上の線形変換 $P(f)$ を以下のように定める。

$$P(f) = c_d f^d + c_{d-1} f^{d-1} \dots + c_1 f + c_0$$

定理 1.2.8

V は K 上のベクトル空間であるとし、 f は V 上の線形変換であるとする。 K 係数の多項式 $P(x), Q(x)$ に対し、 $S(x) = P(x) + Q(x)$ 、 $T(x) = P(x)Q(x)$ とおくと、以下の等式が成立する。

$$S(f) = P(f) + Q(f), \quad T(f) = P(f)Q(f)$$

定理 1.2.9

$P(x), Q(x)$ は K 係数の多項式で、 f は K 上のベクトル空間 V 上の線形変換である。このとき、線形変換 $P(f)$ と $Q(f)$ は可換である。

証明： $P(f)Q(f) = Q(f)P(f)$ より明らか。

1.3 固有値と固有ベクトル

不変部分空間

V は K 上のベクトル空間であるとし、 f は V 上の線形変換であるとする。 V の部分空間について、任意の $w \in W$ が $f(w) \in W$ を満たすとき、 W は f に関して不変 (もしくは f -不変) と言う。

固有値と固有ベクトル

V は K 上のベクトル空間とし、写像 $f: V \rightarrow V$ は V 上の線形変換であるとする。スカラー α についてゼロベクトルでないベクトル $v \in V$ であって $f(v) = \alpha v$ を満たす v が存在するとき、 α を f の固有値と言う。また、このときの v を α に対する f の固有ベクトルと言う。

線形変換 f の固有値 α と固有ベクトル v を考える。このときゼロでない任意のスカラー $\lambda \in K$ に対して λv も α に対する固有ベクトルである。従って一つの固有値に対して一つの固有ベクトルが定まる訳ではない。一般的に固有ベクトルと聞くと、単位ベクトルのものを想像する。

定理 1.3.1

V は K 上のベクトル空間であるとし、 f は V 上の線形変換であるとする。 f の固有値 α に対し、 V の部分集合 $W(\alpha) = \{v \in V \mid f(v) = \alpha v\}$ を定義する。この $W(\alpha)$ は f -不変な部分空間である。このような部分空間を α に対する固有空間と言う。

証明：任意のベクトル $u, v \in W(\alpha)$ に対し、 $f(u+v) = f(u) + f(v) = \alpha(u+v) \in W(\alpha)$ である。また任意のスカラー λ に対して $\lambda u \in W(\alpha)$ が成立する。従って $W(\alpha)$ は部分空間である。また、 f -不変な部分空間であることは定義より明らかなので、本定理は正しい。□

固有値の定義から、 $W(\alpha) \neq \{0\}$ であることと α が固有値であることは同値である。また、 $f(v) = \alpha v$ は $(\alpha 1_v - f)(v) = 0$ とも書き表せるから、 $W(\alpha) = \text{Ker}(\alpha 1_v - f)$ であることにも注意する。

命題 1.3.2

V は K 上のベクトル空間であるとし、 f は V 上の線形変換であるとする。互いに異なる固有値に対応する固有ベクトルの組 (v_1, \dots, v_n) は線形独立である。

証明： $n = 1$ のとき、定義より固有ベクトルはゼロベクトルでないので、本命題は正しい。 $n = k$ のとき正しいと仮定する。 $n = k + 1$ のとき、 $\sum_{i=1}^n \lambda_i v_i = 0$ だとする。両辺に対し f を作用させると、 $\sum \lambda_i \alpha_i v_i = 0$ を得る。ここで α_i はそ

それぞれの固有値である。 $\sum_{i=1}^k \lambda_i \alpha_i \mathbf{v}_i = \alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1}$ でスカラー倍し、前述の式の両辺から引くと

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i (\alpha_i - \alpha_{k+1}) \mathbf{v}_i = \mathbf{0}$$

を得る。いま $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k)$ は線形独立であり、各固有値は異なる値であるため、上式より $\lambda_i = 0 (i = 1, \dots, k)$ だと解る。よって $\mathbf{v}_{k+1} \neq \mathbf{0}$ より λ_{k+1} もゼロになる。以上より本命題は正しい。□

定理 1.3.3

f は K 上のベクトル空間 V 上の線形変換であるとし、 $P(x)$ は x を変数とする K 係数の多項式であるとする。 \mathbf{v} が f の固有空間 $W(\alpha)$ に属するベクトルであるとき、 $P(f)(\mathbf{x}) = P(\alpha)\mathbf{v}$ が成り立つ。

1.4 内積空間

内積空間

V は K 上のベクトル空間であるとする。 V のすべてのベクトルの組 \mathbf{x}, \mathbf{y} に対して K の要素 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) が定まり、以下の条件が成り立っているとき、 V は K 上の内積空間 (もしくは計量ベクトル空間) であると言う。さらにこのとき、 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) の値を \mathbf{x} と \mathbf{y} の内積と言う。

- $(\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}, \mathbf{z}) + (\mathbf{y}, \mathbf{z}), (\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{z}) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}, \mathbf{z})$
- $(\lambda \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda (\mathbf{x}, \mathbf{y}), (\mathbf{x}, \lambda \mathbf{y}) = \lambda (\mathbf{x}, \mathbf{y})$
- $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \overline{(\mathbf{y}, \mathbf{x})}$
- $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$ 。等号成立は $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ のときのみ。

内積空間において、 $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ のとき、 \mathbf{x} と \mathbf{y} は直交すると言う。また、内積の条件より、 (\mathbf{x}, \mathbf{x}) はゼロ以上の実数であるから、 $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$ によって、ゼロ以上の実数が定まる。この値を \mathbf{x} のノルムと呼ぶ。当然ながら、ノルムがゼロとなるのは $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ のときのみである。

定理 1.4.1

V は K 上の内積空間であるとする。このとき、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ について、以下の不等式が成り立つ。

- $|(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|$ 。Cauchy-Schwarz の不等式。
- $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ 。三角不等式。

正規直交系

V は K 上の内積空間であるとする。 V の空でない部分集合 S について次の二つが成り立つとき、 S は正規直交系であると言う。

- 任意の $\mathbf{x} \in S$ について、 $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1$ である。
- 相異なる任意のベクトルの組 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in S$ について、 $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ である。

明らかに正規直交系は線形独立である。 V の基底 S が正規直交系でもある場合、 S は V の正規直交基底であると言う。有限次元のベクトル空間に基底が必ず存在するように、有限次元の内積空間には必ず正規直交基底が存在する。

定理 1.4.2

V は K 上の n 次元ベクトル空間であるとする。集合 $S = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$ が V の正規直交基底であるとき、任意の $\mathbf{x} \in V$ に対して $\mathbf{x} = \sum (\mathbf{b}_i, \mathbf{x}) \mathbf{b}_i$ が成立する。

証明：定義より、任意の $\mathbf{x} \in V$ は $\mathbf{x} = \sum \lambda_i \mathbf{b}_i$ のように表すことができる。 $(\mathbf{b}_i, \mathbf{x}) = \lambda_i$ より、本定理は正しい。□

定理 1.4.3

V は K 上の内積空間であるとし、 $S = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$ は V の正規直交系であるとする。このとき、任意の $\mathbf{x} \in V$ について $\sum |(\mathbf{b}_i, \mathbf{x})|^2 \leq \|\mathbf{x}\|^2$ が成り立つ。これをベッセルの不等式と言う。また、 S が正規直交基底であるときに限り、等号が成立する。

証明： $\mathbf{x} \in V$ に対して $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \sum (\mathbf{b}_i, \mathbf{x}) \mathbf{b}_i$ を定める。このとき

$$\|\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 - \sum (\mathbf{b}_i, \mathbf{x}) \overline{(\mathbf{b}_i, \mathbf{x})} - \sum (\mathbf{b}_i, \mathbf{x}) (\mathbf{x}, \mathbf{b}_i) + \sum_i \sum_j \overline{(\mathbf{b}_i, \mathbf{x})} (\mathbf{b}_j, \mathbf{x}) (\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j)$$

となるが、内積と正規直交系の定義より、 $\|\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 - \sum |(\mathbf{b}_i, \mathbf{x})|^2$ だと分かる。 $\|\mathbf{y}\|^2 \geq 0$ であるため、ベッセルの不等式は正しい。また、 S が正規直交基底であるときは $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ であるため、等号成立に関しても正しい。□

1.5 双対空間

双対空間

V は K 上のベクトル空間であるとする。 V から K への線形写像全体のなすベクトル空間 $\text{Hom}_K(V, K)$ を、 V の双対空間と言い、 V^* で書き表す。

定理 1.5.1

V は K 上の $\{0\}$ でない有限次元ベクトル空間であるとする。 V の次元を n とし、 $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ は V の基底であるとする。このとき、 V^* の要素 ϕ_1, \dots, ϕ_n であって、 $\phi_k(v_j) = \delta_{jk}$ を満たすものがただ一通りに定まる。

証明：まず、このような ϕ_k が存在することを証明する。任意のベクトル $x \in V$ はスカラー λ_j を用いて $x = \lambda_j v_j$ のようにただ一通りに表現できる。そこで $k = 1, \dots, n$ において x に λ_k を対応させる写像を ϕ_k とする。すなわち、

$$\phi_k : V \rightarrow K, \quad \phi_k\left(\sum \lambda_j v_j\right) = \lambda_k$$

を考える。この写像 ϕ_1, \dots, ϕ_n は $\phi_k(v_j) = \delta_{jk}$ を満たす。また、 x は $x = \sum \phi_j(x) v_j$ と書き表せるようになる。

そこで、 $a, b \in V$ なるベクトルを考える。これは $a + b = \sum \{\phi_k(a) + \phi_k(b)\} v_k$ を満たす。よって ϕ_k の定義から $\phi_k(a + b) = \phi_k(a) + \phi_k(b)$ を満たす。スカラー倍についても同様である。よって条件を満たす線形写像 ϕ_k は存在する。

次にこれがただ一通りに定まることを示す。 ϕ_k と ϕ'_k が条件を満たすと仮定する。このとき、任意のベクトル $x = \sum \lambda_j v_j \in V$ において、 $\phi_k(x) = \lambda_k$ かつ $\phi'_k(x) = \lambda_k$ が成立する。従って $\phi_k = \phi'_k$ である。以上より、本定理は正しい。□

定理 1.5.2

定理 1.25 で定めた ϕ_k について、 $S^\vee = (\phi_1, \dots, \phi_n)$ は V^* の基底である。これを特別に双対基底と言う。

証明：まず初めに S^\vee が線形独立であることを証明する。スカラー λ_k について $\sum \lambda_k \phi_k = 0_{V^*}$ が成り立つとする。このとき、任意の $x \in V$ に対して $(\sum \lambda_k \phi_k)(x) = 0$ であるが、 ϕ_k の線形性より $\sum \lambda_k \phi_k(x) = 0$ と書き直すことができる。 V の基底として (v_1, \dots, v_n) を考えると、 $x = v_j$ とすれば、 $\sum \lambda_k \phi_k(v_j) = \lambda_j$ となる。従って任意の $j (j = 1, \dots, n)$ に対して $\lambda_j = 0$ であるため、 S^\vee は線形独立である。

次に S^\vee が V^* を張ることを証明する。そこで、任意の $\psi \in V^*$ が $\psi = \sum \psi(v_k) \phi_k$ で表されることを示す。この等式は V^* におけるものであるから、任意の $x \in V$ において $\psi(x) = \{\sum \psi(v_k) \phi_k\}(x)$ であることを示せばよい。 $x = \sum \phi_k(x) v_k$ より、

$$\psi(x) = \psi\left(\sum \phi_k(x) v_k\right) = \sum \phi_k(x) \psi(v_k)$$

が成り立つ。ここで $\phi_k(x)$ と $\psi(v_k)$ はスカラーなので可換である。そのため、上式の右辺は

$$\sum \phi_k(x) \psi(v_k) = \left(\sum \psi(v_k) \phi_k\right)(x)$$

と書き直すことができる。これは任意の $\psi \in V^*$ について成り立つので、確かに S^\vee は V^* を張る。□

K 上のベクトル空間について、基底 $S = \{v_1, \dots, v_n\}$ と双対基底 $S^\vee = \{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ を取ったとき、任意の $x \in V$ および $\psi \in V^*$ が下記のように表記可能であることは有名である (再掲)。

$$x = \sum \phi_i(x) v_i, \quad \psi = \sum \psi(v_i) \phi_i \quad (1.5.1)$$

双対写像

U, V は K 上のベクトル空間であるとし、写像 $f : U \rightarrow V$ は線形写像であるとする。このとき、以下の式を満足する写像 $f^\vee : V^* \rightarrow U^*$ を f の双対写像と呼ぶ。

$$(f^\vee(\phi))(u) = \phi(f(u)) \quad (\phi \in V^*, u \in U)$$

定理 1.5.3

双対写像は線形写像である。

証明：任意の $\phi, \psi \in V^*$ と任意の $u \in U$ について

$$(f^\vee(\phi + \psi))(u) = (\phi + \psi)(f(u)) = \phi(f(u)) + \psi(f(u))$$

が成り立つ。同様に

$$(f^\vee(\phi) + f^\vee(\psi))(u) = (f^\vee(\phi))(u) + (f^\vee(\psi))(u) = \phi(f(u)) + \psi(f(u))$$

が成り立つ。よって $f^\vee(\phi + \psi) = f^\vee(\phi) + f^\vee(\psi)$ だと分かる。スカラー倍についても同様ゆえに、確かに双対写像は線形写像である。□

定理 1.5.4

U, V は K 上のベクトル空間であるとし、写像 $f: U \rightarrow V$ は線形写像であるとする。 f と f の双対写像 $f^\vee: V^* \rightarrow U^*$ について、次のことが成立する。

1. f が単射ならば f^\vee は全射。
2. f が全射ならば f^\vee は単射。

1.6 ベクトル空間の同型

同型写像と同型

U と V はともに K 上のベクトル空間であるとする。

- 線形写像 $f: U \rightarrow V$ が全単射であるとき、 f は U から V への同型写像であると言う。
- U から V への同型写像が存在するとき、 U は V と (K 上のベクトル空間として) 同型であると言い、 $U \simeq V$ と表す。

U と V はベクトル空間であるとし、 $f: U \rightarrow V$ は線形写像であるとする。このとき、 f は U から V への写像であるが、 U から $\text{Im}f$ への写像とも見なせる。このようにして定まる写像を $f_0: U \rightarrow \text{Im}f$ と置く。このとき、 f_0 は全射であり、任意の $u \in U$ について $f(u) = f_0(u)$ が成り立つ。したがって、もし f が単射であるなら、 f_0 は全単射となる。つまり、ベクトル空間 U は単射 $f: U \rightarrow V$ によって $U \simeq \text{Im}f$ となる。

系 1.6.1

U, V, W は K 上のベクトル空間であるとする。このとき、次のことが成立する。

- $U \simeq U$ 。
- $U \simeq V$ ならば $V \simeq U$ 。
- $U \simeq V$ かつ $V \simeq W$ ならば $U \simeq W$ 。

以上より、 \simeq は同値関係である。

系 1.6.2

V は $\{0\}$ でない K 上の有限次元ベクトル空間であり、 $\dim V = n$ とする。このとき、 $V \simeq K^n$ である。

系 1.6.3

U と V が同型であることと、 U と V の次元が等しいことは同値である。

系 1.6.4

U, V, W は K 上のベクトル空間であり、 $f: U \rightarrow V$ と $g: V \rightarrow W$ は線形写像であるとする。

- f が全射であるとき、 $\text{Im}(g \circ f) = \text{Im}g$ である。
- g が単射であるとき、 $\text{Im}(g \circ f) \simeq \text{Im}f$ である。

1.7 商空間と準同型定理

命題 1.7.1

V は K 上のベクトル空間であるとし、 W は V の部分空間であるとする。 V のベクトル x と y について、 $x - y \in W$ であることを $x \sim_W y$ と表すことにする。このとき、 V 上の 2 項関係 \sim_W は同値関係である。

証明：2 項関係の反射率、対称律、推移率を調べればよい。まず、 $x - x = 0 \in W$ であるので、反射率を満たす。また、 $x - y \in W$ なら $y - x \in W$ なので、対称律も満たす。最後に、 $x - y \in W$ かつ $y - z \in W$ であるとき、 $(x - y) + (y - z) = x - z \in W$ なので推移率も満たす。よって本命題は正しい。□

商空間

V は K 上のベクトル空間であるとし、 W は V の部分空間であるとする。命題 1.7.1 のように同値関係 \sim_W を定義する。 \sim_W に関する V の商集合を、 V の W による商空間と呼び、 V/W で表す。

補題 1.7.1

V を K 上のベクトル空間とし、 W を V の部分空間であるとする。同値関係 \sim_W を命題 1.7.1 のように定め、 \sim_W に関する a の同値類を $[a]$ と書き表す。このとき、 $[a] = [b]$ であることと $a - b \in W$ であることは同値である。

証明： $[a] = [b]$ であるとする。このとき b は $b \in [a]$ かつ $b \in [b]$ であるから、 $a - b \in W$ が成り立つ。逆に $a - b \in W$ であるとする。任意の $a' \in [a]$ について $a' - a \in W$ なので $a' - b \in W$ 。よって、 $a' \in [b]$ である。逆も然りなので $[a] = [b]$ だと解る。□

補題 1.7.2

$a, b, x, y \in V$ であり、 $\lambda \in K$ であるとする。 $[a] = [x]$ かつ $[b] = [y]$ であるとき、以下のことが成り立つ。

1. $[a + b] = [x + y]$
2. $[\lambda a] = [\lambda x]$

証明：定義より、 $a - x \in W$ かつ $b - y \in W$ である。したがって両ベクトルの和についても $(a + b) - (x + y) \in W$ が成り立つ。よって補題 1.7.1 より $[a + b] = [x + y]$ である。スカラー倍についても同様に証明できる。□

たとえ $[a] = [x]$ であったとしても、同値類の定義だけを見れば $a = x$ とは限らない。従って補題 1.7.2 はそれほど自明ではなかった。補題 1.7.2 は \sim_W だからこそ成立するものであり、何か商空間に対する和やスカラー倍の概念を提供してくれる。

定理 1.7.1

V は K 上のベクトルであるとし、 W は V の部分空間であるとする。商空間 V/W 上の和と定数倍を

$$[a] + [b] = [a + b], \quad \lambda[a] = [\lambda a]$$

によって定める。 V/W のゼロベクトルを $\mathbf{0}_{V/W} = [\mathbf{0}_V]$ とすれば、 V/W は K 上のベクトル空間である。

定義より明らかに $\mathbf{0}_{V/W} = W$ である。

定理 1.7.2

V は K 上の n 次元ベクトル空間であるとし、 W は d 次元の V の部分空間であるとする。 W の基底として $S = \{w_1, \dots, w_d\}$ を考え、 V の基底 T を $T \setminus S = \{v_1, \dots, v_{n-d}\}$ となるように定める。このとき、 $S' = \{[v_1], \dots, [v_{n-d}]\}$ は V/W の基底となる。

証明：まず、 S' が線形独立であることを示す。いま、 $\sum_{i=1}^{n-d} \lambda_i [v_i] = \mathbf{0}_{V/W}$ なる等式を考える。左辺は $[\sum \lambda_i v_i]$ に等しいので、定理 1.7.1 より $\sum \lambda_i v_i \in W$ となる。 $\sum \lambda_i v_i = \sum_{i=1}^d \mu_i w_i$ と線形結合で表したとき、 T は線形独立であるため、 $\lambda_i = 0 (i = 0, \dots, n-d)$ となる。従って、 S' は線形独立である。

次に S' は V/W を張ることを示す。ある $v \in V$ に対して $[v]$ を考える。 v を T の線形結合 $\sum_{i=1}^d \nu_i w_i + \sum_{i=1}^{n-d} \theta_i v_i$ で表す。このとき、 $v - \sum_{i=1}^{n-d} \theta_i v_i \in W$ であるため、補題 1.7.1 より $[v] = [\sum_{i=1}^{n-d} \theta_i v_i]$ となる。よって、 $[v] = \sum \theta_i [v_i]$ より、 S' は V/W を張る。

以上より、 S' は V/W の基底である。□

本定理より、 $\dim(V/W) = \dim V - \dim W$ が成立する。

定理 1.7.3(準同型定理)

U と V は K 上のベクトル空間、 $f: U \rightarrow V$ は線形写像であるとする。このとき、 $U/\text{Ker} f \simeq \text{Im} f$ が成り立つ。

本定理と定理 1.7.2 より、 $\dim \text{Ker} f + \dim \text{Im} f = \dim U$ が成り立つ。

2 行列と数ベクトル

1 章ではベクトル空間と線形写像を中心に置き、抽象的な線形代数を議論した。これに対して本章では、ベクトル空間として数ベクトル空間という具体例を扱う。数ベクトル空間の場合のベクトルは $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ のように、 K 上の数値 u_i を列挙したものである。これら数値の組が矢印のような物を表しているのか、それともフーリエ級数の組を表しているのかは、まだ分からない。そういった意味で、数ベクトルという情報だけでは 1 章のときと変わらず抽象的である。しかしながら、ベクトルの実態が何であれ、それを「数値を列挙したもの」と定めたならば、線形写像などが代数的処理になり、非常に扱いやすくなる。実際すぐに分かるように、線形写像は行列演算に置き換えられる。

当然ながら、数ベクトル空間や行列を扱うことになっても、線形代数の諸定理の本質は変わらない。それゆえ本章で見られる定理の大半は 1 章で見た定理が再登場しているに過ぎず、「数ベクトル風」・「行列風」に言い換えたものである。

ただし、実用性を損なわない程度に議論を単純化するために、基底は正規直交基底であることを前提とする。この前提は 1 章の議論では無かったため、注意していただきたい。

2.1 線形写像の行列表示

まずは線形写像と行列の関係を議論する。そのために、 K 上の n 次元ベクトル空間 U と K 上の m 次元ベクトル空間 V を考える。また、 U の正規直交基底として $S = \{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^n$ 、 V の正規直交基底として $T = \{\mathbf{v}_i\}_{i=1}^m$ を定める。このとき、任意の $\mathbf{u} \in U$ および $\mathbf{v} \in V$ は、それぞれ $\mathbf{u} = \sum_i a_i \mathbf{u}_i$ 、 $\mathbf{v} = \sum_j b_j \mathbf{v}_j$ のように書き表すことができる。

線形写像 $f: U \rightarrow V$ について、 $f(\mathbf{u})$ は f の線形性より $f(\mathbf{u}) = \sum_i a_i f(\mathbf{u}_i)$ となる。 $f(\mathbf{u}_i)$ は V に属するため、基底を用いて $f(\mathbf{u}_i) = \sum_j F_{ij} \mathbf{v}_j$ と一意に書き表すことができる。このとき、上式より

$$f(\mathbf{u}) = \sum_i a_i f(\mathbf{u}_i) = \sum_i \sum_j a_i F_{ij} \mathbf{v}_j$$

なる関係が得られる。ここで $\mathbf{u} = (a_1, \dots, a_n)^T$ 、並びに $\mathbf{v} = (b_1, \dots, b_m)^T$ と数ベクトルで表し、 F_{ij} を成分に持つ行列 $F \in K^{m \times n}$ を定めたとする。このとき $\mathbf{v} = f(\mathbf{u})$ だとすれば、上式の関係は

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} = F \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = F\mathbf{u}$$

のように書き直すことができる。これは線形写像の作用を行列 F で表したことを意味しており、 F のことを f に対する表現行列と言う。

表現行列の定義より、 $F\mathbf{u}_i = \sum_j F_{ij} \mathbf{v}_j$ であるから、 $F_{ij} = (\mathbf{v}_j, F\mathbf{u}_i)$ だと直ぐに分かる。従って、表現行列の成分の値は基底 S および T の選び方に依存する。そのため、表現行列を与えられたとき、それがどのような基底におけるものなのかを確認することは重要と言える。特に断りがないのであれば、標準基底 $\{\mathbf{e}_i\}$ だと考えるのが一般的である。

補題 2.1.1

V は K 上の $\{0\}$ でない n 次元ベクトル空間であるとする。 V の基底として $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ と $(\mathbf{v}'_1, \dots, \mathbf{v}'_n)$ が考えられるとする。それぞれの基底ベクトルを横に並べた n 次正方形行列 S, S' に対し、 $S' = PS$ を満たす正方形行列 P はただ一つに定まる。更に P は正則である。

証明：定理 1.1.3 より明らか。

このような行列 P を変換行列と言う。

定理 2.1.1

U と V は K 上の有限次元ベクトル空間であるとし、 U の次元数を m 、 V の次元数を n とする。 U の基底として $S = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m)$ と $S' = (\mathbf{u}'_1, \dots, \mathbf{u}'_m)$ を考え、 S から S' への変換行列を P とする。また、 V の基底として $T = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ と $T' = (\mathbf{v}'_1, \dots, \mathbf{v}'_n)$ を考え、 T から T' への変換行列を Q とする。線形写像 $f: U \rightarrow V$ の、 S と T における表現行列を A としたとき、 S' と T' における表現行列は $Q^{-1}AP$ となる。

私たちは既に行列の和やスカラー倍の定義を知っている。また、ゼロ写像に相当するゼロ行列 O も既に学んでいるだろう。これらを思い出せば、行列の集合 $K^{m \times n}$ などはベクトル空間の条件を満たしていることに気付く。

任意の K 上の m 次元ベクトル空間 U に対して同型のベクトル空間 K^m を考え、同様に任意の K 上の n 次元ベクトル空間 V に対して同型のベクトル空間 K^n を考える。 K^m 及び K^n の基底として何か正規直交基底を定める。このように考えたとき、 $\text{Hom}_K(U, V) \simeq K^{m \times n}$ であることが言える。

線形写像同士の合成写像に対しても表現行列を求めることができる。例えば f の表現行列が A 、 g の表現行列が B である場合、 $g \circ f$ の表現行列は BA となる。同様に、線形変換の多項式への代入は、行列の多項式の代入と考えることができる。例えば K 次の多項式 $P(x) = c_d x^d + \dots + c_0$ があつたとき、正方形行列 A に対して

$$P(A) = c_d A^d + c_{d-1} A^{d-1} \dots + c_1 A + c_0 I$$

のように定める (ちなみに線形変換の表現行列は必ず正方形行列)。

このように、これまで学んできた行列の算法は、線形写像やベクトル空間の条件を満たすように定められていることに気付く。一方で、抽象的な線形代数よりも、 $F_{ij} = (\mathbf{v}_j, F\mathbf{u}_i)$ のように数値的な側面が強い分だけ扱いやすかったりする。本章の以後では、このような強みを活かして 1 章の諸定理を見直しつつ、特殊な行列における諸性質についても紹介していく。

定理 2.1.2

行列 $A, B \in K^{n \times n}$ が正則であるとき、 $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ が成立する。

証明： $(B^{-1}A^{-1})AB = I$ より明らか。

2.2 行列式

2.3 固有値と固有ベクトル

本節では $\{0\}$ でない有限次元のベクトル空間に対する固有値と固有空間を考える。

補題 2.3.1

K 上の $\{0\}$ でない有限次元ベクトル空間 V と、その上の線形変換 f を考える。 V の基底 S に関する f の表現行列を A とし、別の基底 T に関する表現行列を B とする。このとき、変数 x の多項式として $\det(xI - A) = \det(xI - B)$ が成り立つ。

証明：基底 S から T への変換行列を P とすると、 $B = P^{-1}AP$ が成立する。よって

$$xI - B = xP^{-1}P - P^{-1}AP = P^{-1}(xI - A)P$$

な訳であって

$$\det(xI - B) = \det(P^{-1}) \cdot \det(xI - A) \cdot \det(P) = \frac{1}{\det(P)} \cdot \det(xI - A) \cdot \det(P) = \det(xI - A)$$

より本命題は正しい。 \square

本命題より上記多項式は基底の取り方に依存しない。この多項式のことを固有多項式と言う。 n 次元ベクトル空間における固有多項式は x の n 次式であり、 x^n の係数は 1 となる。

代数学により、 n 次の固有多項式は

$$F(x) = (x - \alpha_1)(x - \alpha_2) \dots (x - \alpha_n)$$

の形に分解できる。ここで $\alpha \in \mathbb{C}$ は固有多項式の解である。 $x = \alpha_i$ のとき、 $\det(\alpha_i I - A) = 0$ より、 $\alpha_i I - A$ は正則でない。従ってあるベクトル u に対して $(\alpha_i I - A)u = v$ を満たす v は、存在したとしてもゼロベクトルのみである。よって $Au = \alpha_i u$ であるから、 α_i は A の固有値だと分かる。なお、 $F(x) = 0$ なる方程式のことを固有方程式と言う。

A は K の要素を成分とする n 次正方行列であるとする。行列 A の定める線形変換を $L_A : K^n \rightarrow K^n$ とする。標準基底を前提としたとき、 L_A の表現行列は A 自身となる。従って、 $v \in K^n$ が L_A の固有ベクトルであるということは、 $Av = \alpha v$ が成り立つことである。このような v や α を A の固有ベクトル及び固有値と呼ぶ。

定理 2.3.1 より、以下の系は明らかに成立する。

系 2.3.1

A の固有値全体の成す集合と A の固有方程式の解全体の成す集合は一致する。

2.4 Hamilton-Cayley の定理

補題 2.4.1

V は \mathbb{C} 上の $\{0\}$ でない n 次元ベクトル空間であるとする。 V 上の線形変換 f と g は可換であるとする。このとき、 V の基底 (v_1, \dots, v_n) であって、以下の条件を満たすものが存在する。

- 全ての $j = 1, \dots, n$ について $f(v_j), g(v_j) \in \langle v_1, \dots, v_j \rangle$

補題 2.4.2

V は \mathbb{C} 上の $\{0\}$ でない n 次元ベクトル空間であるとし、 V 上の線形変換 f を考える。このとき、 V の基底 (v_1, \dots, v_n) であって、以下の条件を満たすものが存在する。

- 全ての $j = 1, \dots, n$ について $f(v_j) - \alpha_j v_j \in \langle v_1, \dots, v_{j-1} \rangle$ が成り立つ。

さらに、このときの $\alpha_j (j = 1, \dots, n)$ は f の全ての固有値である。

証明： f と恒等変換 1_V は可換であるため、補題 2.4.1 より $f(v_j) \in \langle v_1, \dots, v_n \rangle$ を満たす基底が存在する。そこで、 $f(v_j)$ が

$$f(v_j) = \alpha_j v_j + \lambda_{j-1,j} v_{j-1} + \dots + \lambda_{1,j} v_1$$

と書き表せるとするならば、 f の表現行列 A は

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \lambda_{1,2} & \dots & \lambda_{1,n} \\ & \alpha_2 & \dots & \lambda_{2,n} \\ & & \dots & \\ & & & \alpha_n \end{bmatrix}$$

となる。よって行列式の性質より f の固有多項式は $(x - \alpha_1)(x - \alpha_2) \dots (x - \alpha_n)$ となる。従って、 $\{\alpha_i\}_{i=1}^n$ は全ての固有値である。 \square

命題 2.4.1

A は複素成分の n 次正方行列であるとする。このとき、正則行列 P であって、 $P^{-1}AP$ が上三角行列となるものが存在する。さらにこのとき、 $P^{-1}AP$ の対角成分に A の全ての固有値が並ぶ。

証明： A は何か線形写像に関する、標準基底における表現行列である。補題 2.4.2 より、 \mathbb{C}^n の基底のうち、補題 2.4.2 の条

件を満たす基底 $S = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n)$ が存在する。標準基底から S への変換行列を P としたとき、定理 2.1.1 より S における表現行列は $P^{-1}AP$ となる。補題 2.4.2 より、これは上三角行列であり、全ての固有値は対角成分に並ぶ。□

定理 2.4.1 (Hamilton-Cayley の定理)

V は K 上の $\{0\}$ でない有限次元ベクトルであるとし、 f は V 上の線形変換であるとする。 f の固有多項式を $F(x)$ と置いたとき、 $F(f) = O$ (ゼロ写像) である。

証明：補題 2.4.2 の条件を満たす基底 $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ を考える。このとき、スカラー $\alpha_i (i = 1, \dots, n)$ は固有値であるから、 f の固有多項式は $F(x) = \prod (x - \alpha_i)$ である。従って、 $F(f) = \prod (f - \alpha_i 1_V)$ となる。ここで、各 $(f - \alpha_i 1_V)$ は互いに可換である。

$k = 1, \dots, n$ について $((f - \alpha_1 1_V) \dots (f - \alpha_k 1_V))(\mathbf{v}_k) = \mathbf{0}$ であることを数学的帰納法で示す。 $k = 1$ のとき、補題 2.4.2 より明らか。 $k = p$ のとき成立すると仮定する。 $k = p + 1$ において、補題 2.4.2 より $(f - \alpha_{p+1} 1_V)(\mathbf{v}_{p+1}) = \sum_{i=1}^p \lambda_i \mathbf{v}_i$ を満たすスカラー λ_i が存在する。このとき、

$$((f - \alpha_1 1_V) \dots (f - \alpha_{p+1} 1_V))(\mathbf{v}_{p+1}) = \sum_{i=1}^p \lambda_i ((f - \alpha_1 1_V) \dots (f - \alpha_p 1_V))(\mathbf{v}_i)$$

となるが、仮定よりこれは $\mathbf{0}$ となる。以上より、 $k = 1, \dots, n$ において $((f - \alpha_1 1_V) \dots (f - \alpha_k 1_V))(\mathbf{v}_k) = \mathbf{0}$ が成立する。 $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ は基底であったため、任意の $\mathbf{v} \in V$ についてもこれが成立する。従って、 $F(f) = O$ である。□

系 2.4.1

正方行列 A の固有多項式を $F(x)$ と置くと、 $F(A) = O$ である。

2.5 部分行列と分割行列

2.5.1 部分行列

部分行列

行列 $A \in K^{m \times n}$ に対して、いくつかの行と列を取り除いてできる行列のことを部分行列と言う。

例えば 3 行 4 列の行列

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 3 & 6 \\ 1 & 5 & 7 & 9 \\ -1 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

に対して第 2 行を削除すれば、2 行 4 列の行列

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 3 & 6 \\ -1 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

が得られる。一つの列を除いてできる m 行 1 列の行列のことを特別に部分ベクトルと呼ぶことがある。また、正方行列に対して列と同じ行を削除した部分行列 (i 列を削除するときは i 行も削除) のことを主部分行列と言う。 n 行 n 列のうち最後の $n - r$ 行及び $n - r$ 列を削除して得られる主部分行列 (r 行 r 列) のことを特別に首座部分行列と言う。

2.5.2 分割行列

ある行列 $A \in A^{m \times n}$ に対して、行もしくは列の間を完全に横断する線を引き、幾つかの部分行列に分割したとする。部分行列を A_{ij} とし、 A を

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1q} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{p1} & A_{p2} & \dots & A_{pq} \end{bmatrix}$$

のように表したとする。このような表現を分割行列と言う (分割行列であることを表すために、例えば $(A_1 \ A_2)$ ではなく $(A_1 | A_2)$ のように分割線を明記することもある)。いま $A_{ij} \in K^{m_i \times n_j}$ であるとき、定義より各部分行列について以下の条件を満たさなければならない。

- $\sum_i m_i = m$ かつ $\sum_j n_j = n$ 。
- 任意の $k (1 \leq k \leq p)$ について m_k は等しい。
- 任意の $k (1 \leq k \leq q)$ について n_k は等しい。

とくに後半の条件は分割線が完全に横断することに由来する。

以下は分割行列に関する定理である (証明は簡単のため省力する)。

命題 2.5.1

行列 $A, B \in K^{m \times n}$ を

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1q} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{p1} & A_{p2} & \cdots & A_{pq} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1q} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{p1} & B_{p2} & \cdots & B_{pq} \end{bmatrix}$$

のように書き表す。なお A_{ij} と B_{ij} は同じ次元である。このとき、下記の等式が成立する。

$$kA = \begin{bmatrix} kA_{11} & kA_{12} & \cdots & kA_{1q} \\ kA_{21} & kA_{22} & \cdots & kA_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ kA_{p1} & kA_{p2} & \cdots & kA_{pq} \end{bmatrix}, \quad k \in K$$

$$A^T = \begin{bmatrix} A_{11}^T & A_{12}^T & \cdots & A_{1q}^T \\ A_{21}^T & A_{22}^T & \cdots & A_{2q}^T \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{p1}^T & A_{p2}^T & \cdots & A_{pq}^T \end{bmatrix}$$

$$A + B = \begin{bmatrix} A_{11} + B_{11} & A_{12} + B_{12} & \cdots & A_{1q} + B_{1q} \\ A_{21} + B_{21} & A_{22} + B_{22} & \cdots & A_{2q} + B_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{p1} + B_{p1} & A_{p2} + B_{p2} & \cdots & A_{pq} + B_{pq} \end{bmatrix}$$

$$AB = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1q} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{p1} & C_{p2} & \cdots & C_{pq} \end{bmatrix}, \quad C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

3 線形代数の数値計算

本章では連立一次方程式の数値解法以外の数値計算について議論する (連立一次方程式の数値解法は工学的に重要であるため、別に章を設けた)。

3.1 逆行列の数値計算

本節では行基本演算による逆行列の解法を紹介する。行基本演算についてはガウスの消去法の節で議論しているので参考にされたい。以下は解法において重要な定理である。

定理 3.1.1

正方形行列 $A \in K^{n \times n}$ を考える。 A が正則であるとき、拡大係数行列 $(A|I)$ から行基本演算により $(I|B)$ に変形することができる。また、 A の逆行列は B である。逆に $(I|B)$ のように変形できない場合、 A は正則でない。

証明： A が正則であるとする。このとき行基本演算に対応する基本行列の組 E_i で、 $I = E_k E_{k-1} \cdots E_1 A$ を満たすものが存在する。このとき明らかに $A^{-1} = E_k E_{k-1} \cdots E_1$ である。これを拡大係数行列 $(A|I)$ に施したとき、

$$E_k E_{k-1} \cdots E_1 (A|I) = (I|E_k E_{k-1} \cdots E_1)$$

が得られる。従って本定理は正しい。

上記定理より、逆行列は行基本演算より求められることが分かる。

□

4 連立一次方程式の数値計算：直接法

5 連立一次方程式の数値計算：反復法

6 連立一次方程式の数値計算：共役勾配法

対称行列を係数とする方程式に対する共役勾配法は、元々直接法として提案された。その後丸め誤差に弱いという欠点ゆえに忘れられつつあったが、1970 年代には疎行列の反復解法としての側面が注目され、再び脚光を浴びるようになった。共役勾配法は Krylov 部分空間法と呼ばれることも多い。

6.1 対称行列に対する共役勾配法

連立一次方程式 $Ax = b$ を考える。 A が正定値対称である場合、解 $x^* = A^{-1}b$ は 2 次関数

$$\phi(x) = \frac{1}{2}((x - x^*), A(x - x^*)) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b) + \frac{1}{2}(x^*, Ax^*)$$

の最小点となる。また、 A の正定値性より明らかに $\phi(\mathbf{x}^*) = 0$ が成り立つ。したがって $\phi(\mathbf{x})$ を減少させるように候補解を更新していけば、真の解 \mathbf{x}^* の近似値が得られると期待できる。このような手法を逐次最小化法と言う。以下に、 k ステップ目での逐次最小化法のアルゴリズムを示す。

逐次最小化法の k ステップ目

1. 探索方向ベクトル $\mathbf{p}_k \neq \mathbf{0}$ を決める。
2. $\phi(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{p}_k)$ を最小にする α を α_k として、 $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$ に従い更新する。

近似解の残差を $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$ とすと、上式より

$$\phi(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{p}_k) = \phi(\mathbf{x}) + \frac{\alpha^2}{2} (\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k) - \alpha (\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)$$

となる (A の対称性を利用)。これを最小化する $\alpha = \alpha_k$ は

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)} \quad (6.1.1)$$

と与えられる。

探索方向ベクトルの定め方には色々あるが、最も素朴なものは最急降下方向 $\mathbf{s}_k = -\nabla \phi$ であろう。上式より、 $\mathbf{s}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x} = \mathbf{r}$ だと直ぐに分かる。探索方向をこのように選んだ手法を最急降下法と言う。証明は省くが、 A の 2 ノルムに関する条件数を κ としたとき、

$$\phi(\mathbf{x}_{k+1}) \leq \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \right)^2 \phi(\mathbf{x}_k)$$

が成り立つ。したがって近似解 \mathbf{x}_k は真の解 \mathbf{x}^* に収束する。

6.1.1 共役方法

一般の逐次最小化法において、 \mathbf{x}_k はアフィン部分空間

$$S_k = \mathbf{x}_0 + \text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1})$$

に属しているが、 \mathbf{x}_k は S_k 上で $\phi(\mathbf{x}_k)$ を最小化しているとは言えない。例えば $\mathbf{x} \in K^2$ における最小化問題を考えてほしい。この場合、 S_k は高々数回の更新で $S_k = K^2$ となることが期待できるが、最適値 \mathbf{x}^* の探索にはそれ以上の反復計算が一般的に必要であろう。

この最小化に対して以下の定理で示すように、探索方向ベクトルが $(\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j) (i < j)$ と満たすように選択されている場合、 S_k 上での最小化が実現されることが分かっている。

定理 5.1.1

行列 A が正定値対称であるとして、逐次最小化法の第 $k-1$ ステップ終了時点を考える。 $\mathbf{p}_j \neq \mathbf{0}$ かつ $(\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j) (i < j)$ である場合、以下のことが成り立つ。

1. $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1}$ は 1 次独立である。従って $\dim S_k = k$ 。
2. $j = 0, \dots, k-1$ に対して、 S_{k+1} に属する任意の \mathbf{x} を $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}} + \alpha \mathbf{p}_j (\hat{\mathbf{x}} \in S_{k+1})$ と表すとき、目的関数 $\phi(\mathbf{x})$ は $\phi(\mathbf{x}) = \phi(\hat{\mathbf{x}}) + \psi(\alpha \mathbf{p}_j)$ の形に分離される。ここで $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ として $\psi(\mathbf{p}) = (\mathbf{p}, A\mathbf{p})/2 - (\mathbf{r}_0, \mathbf{p})$ である。
3. \mathbf{x}_k は S_k 上で目的関数 $\phi(\mathbf{x})$ を最小化する。
4. 残差はこれまでの探索方向ベクトルと直交する。つまり $(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_j) = 0 (j = 0, \dots, k-1)$ 。

証明：

(1) $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1}$ が 1 次従属である場合、ある探索方向ベクトル \mathbf{p}_l は $\mathbf{p}_l = \sum_{i \neq l} \alpha_i \mathbf{p}_i$ のように、他のベクトルの線形結合で表される。この場合、 $(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_l) = (\mathbf{p}_i, \sum_{j \neq l} \alpha_j A\mathbf{p}_j) + (\mathbf{p}_i, A(\sum_{j \neq l, i} \alpha_j \mathbf{p}_j))$ となる。 l 以外の探索方向ベクトルが 1 次独立である場合、右辺第二項はゼロで、第 1 項は A の正定値性より正になる。 l 以外の探索方向ベクトルが 1 次従属である場合でも、同様の処理を繰り返せば結局 $(\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j) \neq 0$ だと分かる。従って対偶より本定理は正しい。

(2) 目的関数の定義より $\phi(\mathbf{x}) = \phi(\hat{\mathbf{x}}) + \psi(\alpha \mathbf{p}_j) + \alpha(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0, A\mathbf{p}_j)$ が得られるが、右辺第三項は条件 $(\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j) = 0$ よりゼロになる。従って本定理は正しい。

(3) $\phi(\mathbf{x}_j) = \min_{\mathbf{x} \in S_j} \phi(\mathbf{x}) (0 \leq j \leq k)$ であることを帰納法で証明する。 $j = 0$ のときは明らか。 $\phi(\mathbf{x}_j) = \min_{\mathbf{x} \in S_j} \phi(\mathbf{x})$ が成り立つ場合、 $j+1$ のときも

$$\min_{\mathbf{x} \in S_{j+1}} \phi(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x} \in S_j} \min_{\alpha} (\phi(\hat{\mathbf{x}}) + \psi(\alpha \mathbf{p}_j)) = \phi(\mathbf{x}_j) + \min_{\alpha} \psi(\alpha \mathbf{p}_j) = \min_{\alpha} \phi(\mathbf{x}_j + \alpha \mathbf{p}_j) = \phi(\mathbf{x}_{j+1})$$

が成り立つ。従って本定理は正しい。

(4) (3) より、 $\nabla \phi(\mathbf{x}_k) = -\mathbf{r}_k$ は $S_k - \mathbf{x}_0 = \text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1})$ と直交するので明らか。□

定理 5.1 で述べた条件 $(\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j) = 0 (i < j)$ は $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1}$ の共役性と呼ばれている。また、このような探索方向ベクトルを用いる手法のことを共役方法 (CD 法) と言う。上記定理の (1)(3) より、有限回の反復計算によって $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^*$ の大域的最適化が達成される。この有限解の反復計算で大域的最適化が達成できる性質は、Krylov 部分空間法に属する手法全てに対して言えることである。そのため Krylov 部分空間には、有限回で済むという直接法的側面と、解を逐次的に更新するという反復法的側面の二面性がある。

6.1.2 共役勾配法

共役方向の選択はいろいろ考えられるが、その内の一つとして最急降下方向 $\mathbf{s}_k = \mathbf{r}_k$ をヒントにすることが考えられる。まず、 $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ とし、 $k \geq 1$ に対しては \mathbf{r}_k から $A\mathbf{p}_j (j = 0, \dots, k-1)$ の成分を引いて A 共役化させればよいので、

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\mathbf{r}_k, A\mathbf{p}_j)}{(\mathbf{p}_j, A\mathbf{p}_j)} \mathbf{p}_j \quad (6.1.2)$$

と定める (これは Gram-Schmidt の直交化法と本質的に同じである)。このとき、以下のことが成り立つ。

補題 5.1.1

A を正定値対称行列とする。上式によって $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots (\neq \mathbf{0})$ を定義していくとき、以下のことが成り立つ。

1. A 共役性が成り立つ。
2. $\mathbf{p}_k \neq \mathbf{0}$ と $\mathbf{r}_k \neq \mathbf{0}$ は同値であり、 $\mathbf{r}_k \neq \mathbf{0}$ のとき $\alpha_k \neq 0$ である。

証明：(1) は明らかなので、(2) のみ証明する。 $\mathbf{p}_k = \mathbf{0}$ ならば $\mathbf{r}_k \in \text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1})$ であるが、一方で $(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_j) = 0 (j = 0, \dots, k-1)$ なので $\mathbf{r}_k = \mathbf{0}$ 。逆に $\mathbf{p}_k \neq \mathbf{0}$ ならば $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_k$ は一次独立なので、上式より明らか。 $\mathbf{r}_k \neq \mathbf{0}$ のとき、 $(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) \neq 0$ より $\alpha_k \neq 0$ となる。□

この補題が意味するところは、本漸化式によって共役方向法が実現され、残差がゼロでない限り次のステップに進めるということである。

Krylov 部分空間

正則行列 $A \in K^{N \times N}$ とあるベクトル $\mathbf{u} \in K^N$ に対して、 $\{\mathbf{u}, A\mathbf{u}, \dots, A^{n-1}\mathbf{u}\}$ が線形独立であるとする。このとき、 $\{\mathbf{u}, A\mathbf{u}, \dots, A^{n-1}\mathbf{u}\}$ が張るベクトル空間を Krylov 部分空間と言い、 $\mathcal{K}_n(A, \mathbf{u})$ と書く。

定理 5.1.2

前記補題と同じ仮定の下で以下のことが成り立つ。

1. $\text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_k) = \text{span}(\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_k) = \mathcal{K}_{k+1}(A, \mathbf{r}_0)$ 。
2. $\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k + \beta_{k-1}\mathbf{p}_{k-1}$, $\beta_{k-1} = -(\mathbf{r}_k, A\mathbf{p}_{k-1})/(\mathbf{p}_{k-1}, A\mathbf{p}_{k-1})$ 。

証明：

(1) 第一の等式は漸化式より明らか。第二の等式は帰納法で証明する。 $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k = \mathbf{b} - A(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha_{k-1}\mathbf{p}_{k-1})$ より、

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_k &= (-1)^k (\alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_{k-1}) A^k \mathbf{r}_0 + \hat{\mathbf{r}}_{k-1} \\ \hat{\mathbf{r}}_{k-1} &= (A \text{ の } k-1 \text{ 次多項式}) \mathbf{r}_0 \in \mathcal{K}_k(A, \mathbf{r}_0) = \text{span}(\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_{k-1}) \end{aligned}$$

なので $\mathbf{r}_k \in \mathcal{K}_{k+1}(A, \mathbf{r}_0)$ であり、逆に $\alpha_0 \dots \alpha_{k-1} \neq 0$ であるから $A^k \mathbf{r}_0 \in \text{span}(\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_k)$ である。

(2) $j \leq k-2$ において、 $\mathbf{p}_j \in \mathcal{K}_{j+1}(A, \mathbf{r}_0)$ であり、 $A\mathbf{p}_j \in \mathcal{K}_{j+2}(A, \mathbf{r}_0) \subset \mathcal{K}_k(A, \mathbf{r}_0) = \text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{k-1})$ である。これと $(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_i) = 0 (i = 0, \dots, k-1)$ より $(\mathbf{r}_k, A\mathbf{p}_j) = 0$ が得られる。従って本定理は正しい。□

定理 5.2 に従って探索方向ベクトルを決定する方法を共役勾配法 (CG 法) と言う。共役方向法同様に (丸め誤差などがなければ) 有限の反復回数で $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^*$ なる結果を得ることができる。ただし実際は $\|\mathbf{r}_k\|$ が $\epsilon\|\mathbf{b}\|$ 以下となった時点で反復計算を終了する。以下は CG 法のアルゴリズムである。

CG 法

1. 初期ベクトル \mathbf{x}_0 を設定する。 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$, $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$, $k = 0$ 。
2. $\|\mathbf{r}_k\| < \epsilon\|\mathbf{b}\|$ を 3-4 満足するまでを繰り返す。
- 3.

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)} \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \\ \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k \\ \beta_k &= -\frac{(\mathbf{r}_{k+1}, A\mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)} \\ \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \end{aligned}$$

4. $k = k + 1$

これまで正定値対称行列を念頭に置いて CG 法を導出してきたが、正定値対称でなくても CG は一応適用できる。ただし、この場合 $\mathbf{r}_k \neq \mathbf{0}$ であるにも関わらず β や α の分母がゼロになり、計算の破綻をきたす可能性がある。また、連立一次方程式の求解と 2 次関数の最小化を同一視できない。非正定値対称行列における CG 法は $\phi(\mathbf{x})$ の停留値の提供のみ保証する (それでも十分嬉しいが)。

6.1.3 CG 法の収束性

6.1.4 残差直交性に基づく CG 法の導出

ここまで注目していなかったが、CG 法の残差 $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots$ は直交系を成している。実際に、定理 5.1 の $(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_j) = 0 (j = 0, \dots, k-1)$ と定理 5.2 より $\mathbf{r}_j \in \text{span}(\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_j)$ であるため、 $(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_j) = 0 (0 \leq j \leq k-1)$ が成立する。 n 次元空間の直交系の長さは n 以下であるから、ある $\bar{n} (\leq n)$ に対して $\mathbf{r}_{\bar{n}} = \mathbf{0}$ となる。この残差の直交性に着目して CG 法を導出する。

定理 5.2 より、