

応用数値計算法 (Applied Numerical Mathematics)

工学院 機械系 岡田昌史

シラバス

本講義は、数値計算を効率的に行うための手法について述べるものであり、その中心は線形代数にある。線形代数を数値計算に用いることは、計算時間、使用するメモリの量の観点からは決して効率の良い計算ではない。しかし、プログラマが先に手計算を行う手間を省き、計算の手順を明確にしてくれる点において有意である。本講義では以下の内容について行う。

1. ベクトルと空間，行列と写像 n 次元空間の概念をつかむ。写像を行列で表す。
2. 行列の正負と零空間 行列の正負，零空間を理解する。
3. ベクトル・行列の大きさ (固有値，行列のべき乗) ベクトルのノルム，固有値分解を理解する。
4. 逆問題の解法 (逆行列，特異値分解) 逆行列，擬似逆行列，特異値分解を理解する。
5. 最適化 様々な最適化手法の概念を理解する。
6. 最小二乗法 線形/非線形な場合における最小二乗法を理解する。
7. 常微分方程式の数値解法 常微分方程式の数値解法を身につける。
8. 導関数の差分近似 導関数を差分で近似する。

はじめに

計算機で数値解析を行う際には線形代数が必要である。特に、逆問題においては線形代数の知識がないと適切な結果が得られない場合が多い。本講義では、C 言語において数値解析法を実装するための基礎知識として、線形代数の基礎を講義する。なお、この資料の中ではスカラー、ベクトル、行列を特に区別しない。スカラーは 1×1 の行列と理解して欲しい。

1 ベクトルと空間，行列と写像

1.1 ベクトルと空間

スカラー (数値) は大きさを表しているのに対し、ベクトルは空間の中で向きと大きさ表している。正確に言えばスカラー値は 1 次元空間のベクトルであるが、プラス・マイナスの向きしかなく線に沿った動きなので「向き」の感覚をつかみにくい。これに対し、2 次元以上では「向き」の概念が重要になってくる。例えば、

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

は図 1 のように 2 次元空間 (平面) の向きを持った矢印で

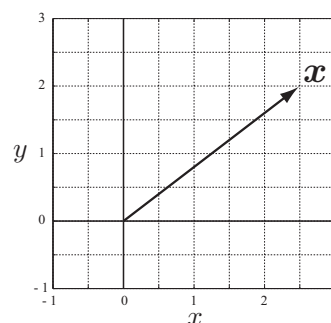


図 1: 2 次元空間内のベクトル

表され、

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

は図 2 のように 3 次元空間の中で向きをもった矢印で表される。また、その大きさは一般に以下のように内積によって計算される。

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x})} = \sqrt{\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}} \quad (3)$$

さらに、足し算、定数倍は図 3 のようになり、以下によって定義する。

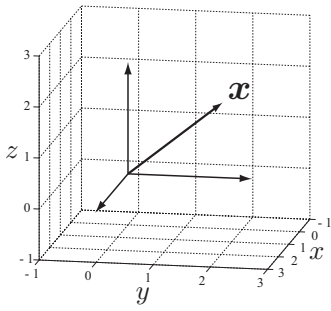


図 2: 3次元空間内のベクトル

表し, n 次元空間であれば独立な基底が n 本存在する. 図4ではA, B, Cいずれの場合も a, b は独立な2本の基底であるが, Dの場合は独立な基底にはならない. n 本の

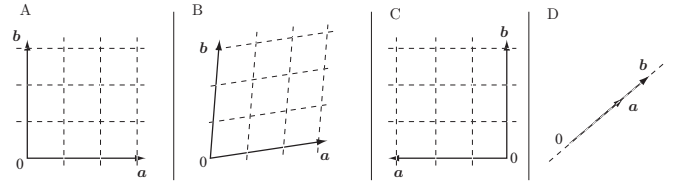


図 4: 空間の基底の例

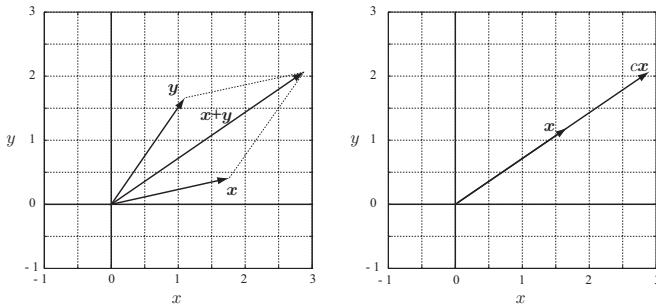


図 3: ベクトルの和と定数倍

独立な基底によって張られる空間を n 次元ベクトル空間という. この考え方を拡張すれば, 図5のようなケースも考えられるが, これは基底を非線形や時変に拡張したもので

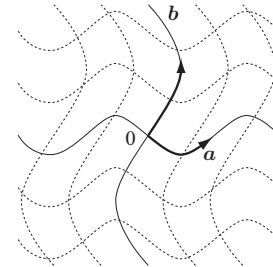


図 5: 非線形な基底の例

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + y_1 \\ \vdots \\ x_n + y_n \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$c\mathbf{x} = c \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} cx_1 \\ \vdots \\ cx_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} c = \mathbf{x}c \quad (5)$$

このようにベクトルは空間の中の向きを持った矢印,あるいは座標(原点を根元として矢印の先端を表す)として表現できるものである. この空間の概念をつかむことが線形代数を修得するのに必要である. しかし, 我々の空間は3次元でありそれ以上の次元の概念を把握することは難しい. そこで, 高次元のものでも3次元で考え, その概ねを理解できるようにして欲しい. なお, 2次元と3次元ではその特徴が大きく異なり(メビウスの輪など), 次元が異なることでその本質が大きく異なることは理解しておいて欲しい.

今後わかりやすさのために空間は2次元で表現しておく. 次元の数によって内容が変わるものの場合のみそれに触れる.

1.2 空間の基底

空間は基底と距離によって定義される. 基底とは空間の全てのベクトルがその線形和で表されるようなベクトルを

あり, この講義では考えないものとする. n 次元線形ベクトル空間の中の任意のベクトル x は基底の線形和

$$\mathbf{x} = a c_1 + b c_2 = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (6)$$

で表される. また, 空間の中の距離が定義でき, 線形空間の場合, 点 $x = (x_1, x_2)$ と点 $y = (y_1, y_2)$ の距離が

$$|x - y| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2} = \sqrt{(x - y)^T (x - y)} \quad (7)$$

で表される. 基底は独立になるように n 本選ばばよいのでその選び方は自由であるが, 一般に正規直交基底

$$\|a\| = \|b\| = 1 \quad (8)$$

$$a \perp b : a^T b = 0 \quad (9)$$

を選んでおくとの後の計算が行いやすい.

基底と空間の定義から点は0次元, 線は1次元, 面は2次元, 我々の空間は3次元であることが分かる(それぞれ n 本の独立な基底が定義できるため). しかし, 線, 面は直線, 平面である必要はなく, 曲線, 曲面でも構わない. 曲面であれば交線を持ったり, 接点

をもったりすることができる。この観点からすると、我々の空間にもう一つ基底が定義され、しかも、空間が曲空間であれば、交面、接線によって場所の瞬間移動を可能とする。また、もう一つの基底として時間をとることもできるが(ただし、時間の流れは1方向なので3.5次元か?)、さらに、5つ目の基底を取り時間を含めた曲4次元空間を作ることができれば、タイムマシンも夢ではない。

1.3 行列と写像

次に行列についてその概念をつかもう。行列は一般に $n \times m$ のサイズを持っており

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \quad (10)$$

のように表す。また、和、定数倍に関してはベクトルと同じ性質を持つが、以下の演算がベクトルとは異なる。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$(AB)^T = B^T A^T \quad (13)$$

さらに、 A が正方行列の場合、逆行列 A^{-1} が定義される。

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I(\text{単位行列}) \quad (14)$$

逆行列は以下の性質を持つことがよく使われるので覚えておくこと。

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \quad (15)$$

いま、行列 A が正方行列で次式のように n 本の n 次元ベクトルから構成されているとする。

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \quad (16)$$

このとき、 a_1, a_2, \dots, a_n が独立な基底であるとする、 A は n 次元空間を表現していると見ることができる。

一方、 y が x の関数として

$$y = f(x) \quad (17)$$

と書けるとき、これは $x \mapsto y$ の写像と見ることができる。いま、行列 A を用いて

$$y = Ax \quad (18)$$

を考えよう。これは y が x の関数として表されているので写像である。いま、 x を

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (19)$$

とする。これは2次元空間の基底を

$$b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

とした正規直交基底で選んだ場合に

$$x = b_1x_1 + b_2x_2 \quad (21)$$

となる線形和で x が表されているとも見させる。さらに、 b_1, b_2 は A によって

$$a_1 = Ab_1, a_2 = Ab_2 \quad (22)$$

と変換される。すなわち、 A によって $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ が基底 a_1 へ、

$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ が基底 a_2 へ変換される。この考え方をを用いると、式(18)は

$$y = A(x_1b_1 + x_2b_2) = Ab_1x_1 + Ab_2x_2 \quad (23)$$

$$= a_1x_1 + a_2x_2 \quad (24)$$

と書くことができる。この考え方は、図6によって説明できる。 x は b_1, b_2 を $x_1 : x_2$ の比率で足し合わせたベク

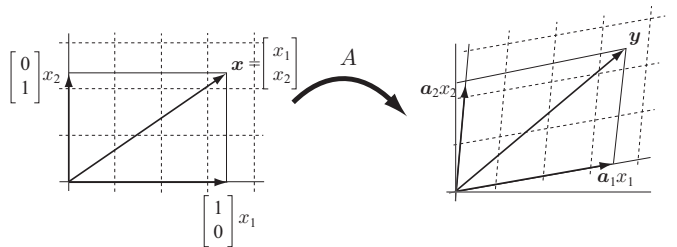


図6: A による写像

トルであったのに対し、 y は A によって b_1, b_2 を a_1, a_2 へ変換しこれを $x_1 : x_2$ の比率で足し合わせたものである。このように、 A は x を y へと写す写像であり、さらに、 b_1, b_2 の基底によって張られる空間を a_1, a_2 で張られる空間へと変換する座標変換であるともいえる。では、この座標変換に関してもう少し詳しく見てみよう。

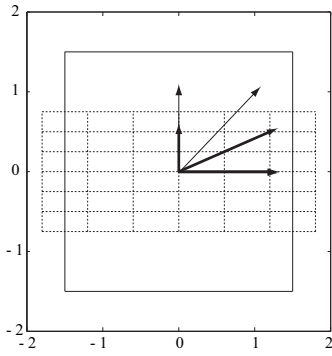


図 7: A による写像の例 1

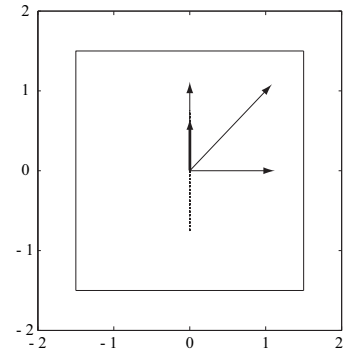


図 9: A による写像の例 3

1. $A = \begin{bmatrix} 1.2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$ のとき座標変換した結果は図 7 のようになる .

2. $A = \begin{bmatrix} 1 & -0.3 \\ -0.7 & 0.6 \end{bmatrix}$ のとき座標変換した結果は図 8 のようになる .

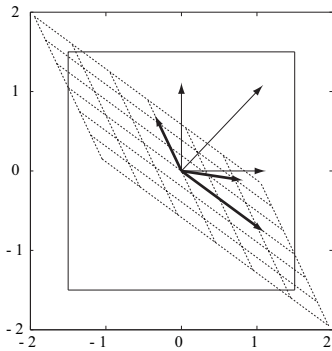


図 8: A による写像の例 2

3. $A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$ のとき座標変換した結果は図 9 のようになる .

4. $A = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$ のとき座標変換した結果は図 10 のようになる .

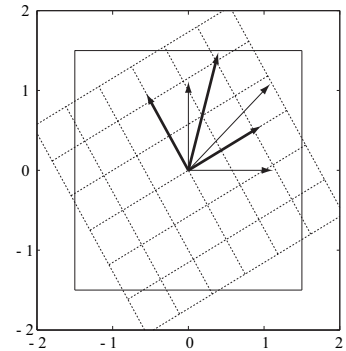


図 10: A による写像の例 4

これらの座標変換についてもう少し詳しく見てみよう . これらの例では図の実線の四角が鎖線の四角に変換されている . この面積比は行列式

$$\det A = |A| \quad (25)$$

によって与えられる . 実際 , 例 3 では

$$\det A = 0 \cdot 0.5 - 0 \cdot 0 = 0 \quad (26)$$

であり , 鎖線の四角形は面積を持たない線へと変換される . 例 4 では

$$\det A = \sqrt{3}/2 \cdot \sqrt{3}/2 + 1/2 \cdot 1/2 = 1 \quad (27)$$

であり , 面積は変わっていない . これより , 行列の行列式は拡大率を表しているといえる .

また , 例 4 の場合に ,

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \end{bmatrix} \quad (28)$$

とすると ,

$$\|\mathbf{a}_1\| = \|\mathbf{a}_2\| = 1 \quad (29)$$

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 : \mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_2 = 0 \quad (30)$$

となっている . すなわち , A は正規直交基底で構成されており , これは空間を回転するだけで , 面積を変えずベクトルの直交性も保存される座標変換になっている . 以上のことから行列 A が

$$A^T A = I \quad (31)$$

を満たすとき , A を回転行列という . これは $n \times n$ の行列に関して成り立つ .

2 行列の正負と零空間

2.1 固有値分解

行列 A の固有値, 固有ベクトルについて説明する. 固有値 λ とその固有ベクトル t は

$$At = t\lambda \quad \left(= \begin{bmatrix} \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda \end{bmatrix} t \right) \quad (32)$$

を満たすものと定義される. ここで, A を座標変換であると考え, 固有ベクトルは座標変換 A を施してもその向きが変わらないベクトルで, 大きさは λ 倍されるものであるといえる. いま, $A \in R^{2 \times 2}$ のときを考えて, 固有値が λ_1, λ_2 でその固有ベクトルを t_1, t_2 とすると,

$$At_1 = t_1\lambda_1, \quad At_2 = t_2\lambda_2 \quad (33)$$

となり, これをひとつの式で書くと

$$AT = T\Lambda \quad (34)$$

$$T = \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}, \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad (35)$$

と書ける. これより, A は

$$A = T\Lambda T^{-1} \quad (36)$$

と表される. これは行列 A の固有値分解であるが, Λ は対角要素しか持たない行列なので行列 A の対角化ともいう. これは固有値が複素数の場合でも問題ない (固有ベクトルも複素数となる). ただし, A の固有値が 1 つしかなく, さらにその固有ベクトルが独立に取れない場合には異なる議論が必要である. この対角化された A に関してもう少し詳しく述べる.

$$y = Ax = T\Lambda T^{-1}x \quad (37)$$

の変換は図 11 のように x を (T^{-1} で変換) \rightarrow (x 軸, y 軸へ

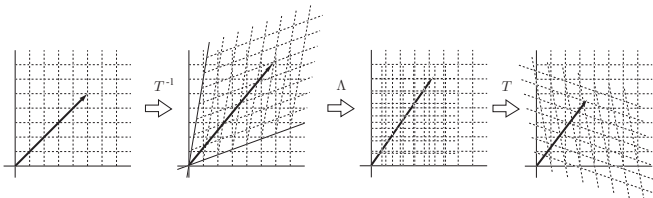


図 11: A の固有値分解による座標変換

λ_1 倍, λ_2 倍 \rightarrow (T で変換) とみなすことができる. これより, λ のどちらか一方が零の場合, A の変換はある軸へ

の射影となり, このとき A を射影行列と呼ぶ. なお, A が零の固有値を持つ場合,

$$\text{rank}A < n \quad (38)$$

となり, A が特異であるという. また, このとき $\det A$ は零となり, A の逆行列は存在しない. これは A が 2 次元平面を 1 次元の直線に変換する射影であって, その逆, つまり 1 次元の直線から 2 次元平面は作れないことから明らかである.

一般に, 固有値は複素数となる. しかし, 実対称行列の固有値は実数になる. いま, 行列 A の固有値 λ に関する固有ベクトル t を考える. このとき, At と t の内積は

$$(At, t) = t^* A^* t = t^* At = (t, At) \quad (39)$$

が成り立つ. ただし, A が実対称行列であるので $A = A^*$ を用いた. 一方, $At = t\lambda$ を考えて,

$$(At, t) = \lambda^*(t, t) \quad (40)$$

$$(t, At) = \lambda(t, t) \quad (41)$$

が成り立つ. よって, 式 (39) から, $\lambda^* = \lambda$ であり, λ は実数となる.

2.2 行列の正負

x の 2 次関数

$$y = ax^2 \quad (42)$$

において, $y \geq 0$ の条件は $a \geq 0$ である. これはスカラー値 y の正負と a の正負との関係である (x は任意). これと同じことが行列でもいえる. 行列の場合, 2 次関数は

$$y = x^T A x \quad (43)$$

となる. 任意の x に対して, y が常に正になるための条件を考えよう. いま, A を対称行列 ($A^T = A$) として式 (36) の A の固有値分解を考える. このとき $T^{-1} = T^T$ が満たされる x は任意なので $\hat{x} = T^T x$ も任意である. このとき y は

$$y = x^T A x = (x^T T) \Lambda (T^T x) \quad (44)$$

$$= \lambda_1 \hat{x}_1^2 + \lambda_2 \hat{x}_2^2 + \cdots + \lambda_n \hat{x}_n^2 \quad (45)$$

で表され, これが全ての $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_n$ について正になるための条件は, 全ての λ_i の実数部分が正であることである. このとき行列 A は正定であるといい,

$$A > 0 \quad (46)$$

と書く．逆に全て負の場合は負定 ($A < 0$) で，正と負が混ざっている場合は不定という．式 (43) は 2 次形式と呼ばれ，ベクトルの 2 次式としてよく使われる．例えば内積も 2 次形式であり，逆に内積の観点からすれば式 (43) は重み付き内積といえる．

図 12 は， $A \in R^2$ に対して， A の固有値が (A) 共に正の場合，(B) 片方が正，片方が負の場合，(C) 共に負の場合，に関して $z = x^T A x$ の値を求めたものである．

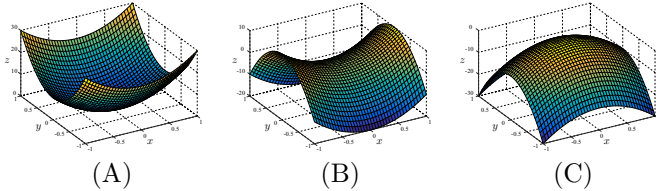


図 12: A の固有値と $z = x^T A x$ の関係

2.3 楕円体の式

n 次元空間の楕円体の式は行列を用いて表される．いま，以下の円を考えよう．

$$x^2 + y^2 = 1 \quad (47)$$

これは 2 次形式を用いて

$$x^T I x = 1, \quad x = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (48)$$

と書くことができる．一方，長軸の長さが $2a$ ，短軸の長さが $2b$ である図 13 の楕円の式は

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (49)$$

となる．これも 2 次形式を用いることで

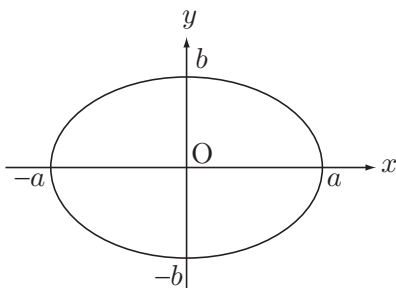


図 13: 2 次元平面の楕円

$$x^T Q x = 1, \quad Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} \end{bmatrix} \quad (50)$$

と表すことができる．さらに，図 14 にあるように xy 座標系に対して θ だけ回転した楕円の方程式を考えよう．この

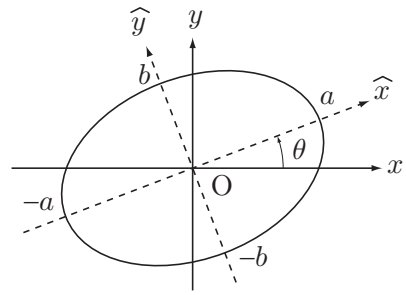


図 14: 傾いた 2 次元平面の楕円

楕円は $\hat{x}\hat{y}$ 座標系において

$$\hat{x}^T Q \hat{x} = 1 \quad (51)$$

で表され，さらに，

$$\hat{x} = R^T x, \quad R = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (52)$$

で表されることから，この楕円は

$$x^T \hat{Q} x = 1, \quad \hat{Q} = R Q R^T \quad (53)$$

となる．ここで，以下のことが言える．

1. 式 (50) の Q は対角要素しかもたず，しかもその要素は正である．
2. $R^T = R^{-1}$ であることを考慮すると，式 (53) の \hat{Q} は固有値が Q と一致し， R の要素が固有ベクトルとなると言える．

これらより，楕円の式について以下が結論できる．

1. 式 (50) のように 2 次形式で書かれた式の Q が，対称行列かつ固有値が全て正のとき，これは楕円体を表している．
2. 固有値を λ とするとき， $2/\sqrt{\lambda}$ が楕円の軸の長さを表している．
3. さらに，固有ベクトルは楕円の軸の方向ベクトルと一致する．

これらは n 次元の楕円体に関して成立することである．

2.4 行列の零空間

空間の話をするときに，零空間の概念が重要である．行列 A の零空間 (Null space) とは，

$$A x = 0 \quad (54)$$

を満たす零でない x_i ($i = 1, 2, \dots, m < n$) で張られる空間のことを意味し, A^\perp で表される. これは $\text{rank} A < n$ のときに存在する. いま行列 A が

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix} \quad (55)$$

であったとしよう. $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3$ が成り立つので明らかに $\text{rank} A = 2$ である. この行列は 3 次元空間を図 15 に表される平面 (図の平行四辺形) へと射影する行列である. こ

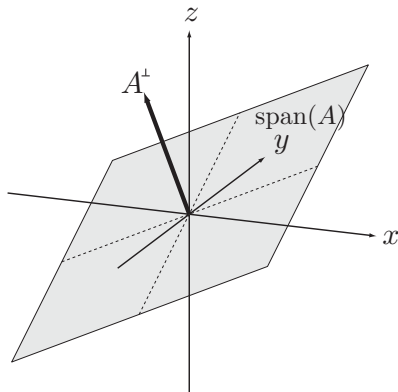


図 15: A による射影の例 1

のとき A の零空間が存在し, その正規基底を用いて

$$A^\perp = \text{span}(\mathbf{a}^\perp) \quad (56)$$

$$\mathbf{a}^\perp = \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (57)$$

で表される. ここでは A^\perp は 1 次元空間となる. また,

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (58)$$

の場合には, $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3$ であり, $\text{rank} A = 1$ であるので射影は図 16 であり このとき A^\perp は

$$A^\perp = \text{span}(\mathbf{a}_1^\perp, \mathbf{a}_2^\perp) \quad (59)$$

$$\mathbf{a}_1^\perp = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_2^\perp = \frac{\sqrt{5}}{5} \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (60)$$

で表される. なお, 式 (60) の選び方は一意ではなく, A^\perp の中から独立の 2 つの正規基底を選べばよい. 一般には, 直交する正規直交基底が選ばれる. いま, 法線ベクトルを

$$A = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \quad (61)$$

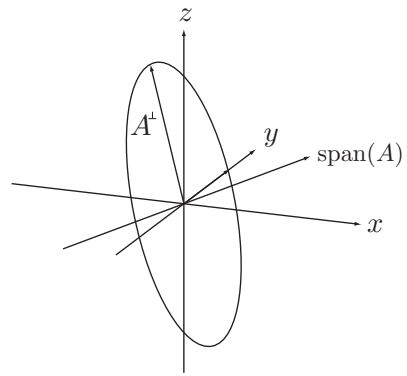


図 16: A による射影の例 2

とする平面の方程式を求めてみよう. この平面上の点

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad (62)$$

の位置ベクトルは常に A と直交する. すなわち,

$$A^T \mathbf{x} = 0 \quad (63)$$

であり, これはよく知られた平面の式

$$ax + by + cz = 0 \quad (64)$$

と一致する. 一方, A の零空間の基底を $\mathbf{a}_1^\perp, \mathbf{a}_2^\perp$ とすると, 平面上の点 \mathbf{x} は任意定数 c_1, c_2 を用いて

$$\mathbf{x} = \mathbf{a}_1^\perp c_1 + \mathbf{a}_2^\perp c_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^\perp & \mathbf{a}_2^\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = A^\perp \mathbf{c} \quad (65)$$

と書ける. これは, 平面の c_1, c_2 を用いた媒介変数表示といえる.

行列が横長の場合, 式 (10) において $n < m$, $\text{rank} A = n$ (行フルランク) とする. このとき, A による座標変換は

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{A} \mathbf{x}, \quad \hat{A} = \begin{bmatrix} A & \\ & 0 \dots 0 \\ & \vdots \ddots \vdots \\ & 0 \dots 0 \end{bmatrix} \in R^{m \times m} \quad (66)$$

と見なせるので最低でも $m - n$ 次元の零空間が存在する.

3 ベクトル・行列の大きさ (ノルム)

3.1 ベクトルのノルム

ベクトル \mathbf{x} の大きさといえば,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (67)$$

としたときに

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \sqrt{x^T x} \quad (68)$$

が一般に用いられるだろう。しかし、これは2ノルムと呼ばれ、一般の p ノルムは次式で定義される。

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (69)$$

良く用いられるのは $p = 1, 2, \infty$ の場合である。 $p = 1$ のときは

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (70)$$

となり、各要素の絶対値の和である。 $p = \infty$ の場合は、

$$\|x\|_\infty = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^\infty \right)^{1/\infty} = \max_i |x_i| \quad (71)$$

となり、要素の中の最も絶対値の大きなものとなる。ただし、 $\|x\|_1$ や $\|x\|_\infty$ は x の変化に伴って微分可能でない値を導くため計算にはあまり適さない。これに対し、 $z = \|x\|_2 = \sqrt{x^T x}$ であれば、

$$\frac{dz}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^T x + x^T dx}{\sqrt{x^T x}} = \frac{x^T dx}{\|x\| dt} \quad (72)$$

となつて、 x が微分可能であれば z も常に微分可能であり、計算機での実装に適している。

ノルムの最も重要な性質として次の三角不等式があるので覚えておくと良い。

$$\|x\| - \|y\| \leq \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad (73)$$

証明などに良く用いられる。

3.2 行列のノルム

行列のノルムについてもベクトルのノルムと同様、各要素を用いた p ノルムが定義できるが、これよりも次の誘導2ノルムが良く用いられる。

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \quad (74)$$

これはあるベクトル x を A で座標変換したとき、その大きさが最大になるときの値を意味している。これは行列 A 特異値分解と見比べて $x = v_1$ のときに最大値 σ_1 をもたすので、 A の誘導2ノルムは A の最大特異値に一致する。

3.3 行列のべき乗

行列のべき乗を求める問題は典型的な線形代数の問題として用いられる。いま、行列 A に対して、 A^k を求める問題を考えよう。式(36)の固有値分解を考えると、

$$A^k = T \Lambda T^{-1} T \Lambda T^{-1} \dots T \Lambda T^{-1} \quad (75)$$

$$= T \begin{bmatrix} \lambda_1^k & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_n^k \end{bmatrix} T^{-1} \quad (76)$$

によって解が得られる。また、行列のべき乗の収束性に行列のノルム、固有値が役立つ。

定理 行列 A に対して

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^k \rightarrow 0 \quad (77)$$

となるための必要十分条件は A のスペクトル半径 $\rho(A)$

$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i| \quad (78)$$

に対して

$$\rho(A) < 1 \quad (79)$$

となることである。ただし、 λ は A の固有値で、スペクトル半径は最大固有値の絶対値である。

証明 λ を A の固有値、 $t \neq 0$ を対応する固有ベクトルとすると、固有値、固有ベクトルの定義から

$$\|t\|_2 \geq 0 \quad (80)$$

$$|\lambda| \|t\|_2 = \|\lambda t\|_2 = \|At\|_2 \leq \|A\|_2 \|t\|_2 \quad (81)$$

が成り立つので

$$|\lambda| \leq \|A\|_2 \quad (82)$$

となり、

$$\rho(A) = \max |\lambda| \leq \|A\|_2 \quad (83)$$

となる。このとき $\rho(A) \leq \|A\|_2 < 1$ ならば三角不等式から

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^k\|_2 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \|A\|_2^k \rightarrow 0 \quad (84)$$

なので、

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^k \rightarrow 0 \quad (85)$$

が成り立つ。

これを利用すると次の結果が導かれる。次の漸化式(差分方程式)

$$x[k+1] = Ax[k] \quad (86)$$

で表される系において、任意の初期値 $x[0]$ から出発した x が $k \rightarrow \infty$ で

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x[k] \rightarrow 0 \quad (87)$$

となるための必要十分条件は $\rho(A) < 1$ である。すなわち、 A の固有値が図 17 の灰色部 (複素平面内の単位円内) にあるとき、式 (86) は安定である。

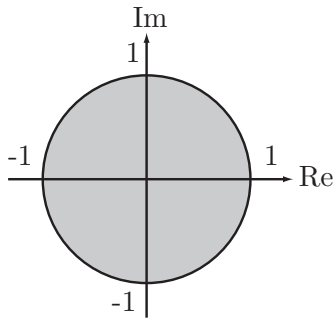


図 17: A の固有値の安定領域

いま、図 18 にあるマスばねダンパ系を考えよう。この

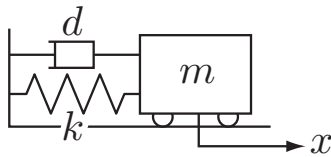


図 18: マスばねダンパ系

系の運動方程式は

$$m\ddot{x} = -kx - d\dot{x} \quad (88)$$

で表される。式 (88) は 2 階の微分方程式であるが、

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} x \\ \dot{x} \end{bmatrix} \quad (89)$$

を用いると、

$$\dot{x} = Ax, \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{d}{m} \end{bmatrix} \quad (90)$$

のように 1 階の微分方程式に変形できる。さて、ここで計算のサンプリングタイムを T として

$$x((k+1)T) = x(kT) + T\dot{x}(kT) \quad (91)$$

の近似を考えよう。ここで、 T を省略して、

$$x[k+1] = (I + TA)x[k] \quad (92)$$

が成り立つ。これは式 (86) において A を $I + TA$ と書き換えたものに一致する。いま、図 18 の系は安定であるので、 $\rho(I + TA)$ は 1 以下のはずである。図 19 は m, k, d のある値に対して、サンプリングタイム T を 1.0×10^{-3} 秒から 10 秒まで変化させ、そのときのスペクトル半径 $\rho(I + TA)$ をプロットしたものである。 $T \ll 1$ のとき、 $I + TA$ は

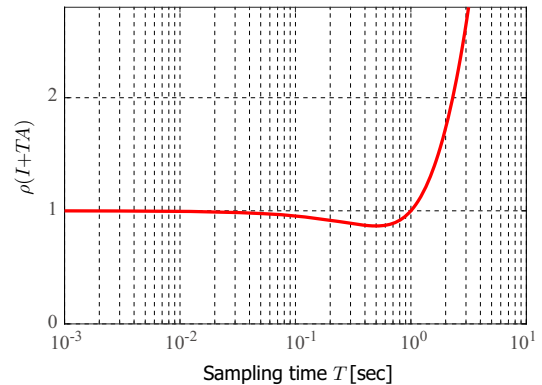


図 19: サンプリングタイムとスペクトル半径の関係

単位行列に近づくので $\rho(I + TA)$ は 1 に近づく。一方、 T を大きくしていくと $T = 1$ 付近で $\rho(I + TA)$ が 1 を越え、この系は不安定になる。これは、サンプリングタイムが大きいと式 (91) の近似が成り立たなくなることを意味している。

さらに、この考え方を応用して

$$x = \exp(At) \quad (93)$$

を求めてみよう。これは、

$$\dot{x} = ax \quad (94)$$

の解が

$$x = C \exp(at) \quad (95)$$

であるのと同様に (C は任意定数)、

$$\dot{x} = Ax \quad (96)$$

の解となる。

$\exp(at)$ のテイラー展開が

$$\exp(at) = 1 + at + \frac{1}{2!}a^2t^2 + \frac{1}{3!}a^3t^3 + \dots \quad (97)$$

で表されるように、 $\exp(At)$ のテイラー展開は

$$\exp(At) = I + At + \frac{1}{2!}A^2t^2 + \frac{1}{3!}A^3t^3 + \dots \quad (98)$$

で表される。一方、式 (76) の結果を用いると、これは

$$\exp(At) = T \left(I + \Lambda t + \frac{1}{2!}\Lambda^2t^2 + \frac{1}{3!}\Lambda^3t^3 + \dots \right) T^{-1} \quad (99)$$

であり、さらに Λ が対角行列であることから

$$\exp(At) = T \begin{bmatrix} \exp(\lambda_1 t) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_2 t) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \exp(\lambda_n t) \end{bmatrix} T^{-1} \quad (100)$$

が得られる。

4 逆問題の解法

4.1 逆行列

一般に、解析 (Analysis) は順問題、設計 (Synthesis/Design) は逆問題に分類される。例えば、変数 x, y, z の間には、

$$\begin{cases} z_1 = a_1 x + b_1 y \\ z_2 = a_2 x + b_2 y \end{cases} \quad (101)$$

の関係があるとする。 x, y を与えたときに z を求める問題は順問題になる。一方、 z_1, z_2 を与え、このときに式 (101) を満たす x, y を求める問題は逆問題であり、連立方程式の解として値が得られる。これは、ある条件を満たすような機械を設計する (機械のパラメータを決定する) ような場合と同様のものである。式 (101) は 2 つの連立方程式であるため容易に手で解があられるが、一般に n 次の連立方程式の場合は容易ではない。そこで、これを計算機を用いて求めよう。

以下の連立方程式を考える。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (102)$$

これは未知数 n 個 (x_1, x_2, \dots, x_n)、方程式 n 本なので解が存在する場合である。これは行列を用いると

$$Ax = b \quad (103)$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad (104)$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (105)$$

で表される。これより解 x は

$$x = A^{-1}b \quad (106)$$

として求められる。

4.2 擬似逆行列

式 (102) では未知数の数と方程式の数が等しい場合について述べた。このとき A は正方行列であるため、逆行列が存在するが、ここではこれらの数が等しくない場合を考えてみよう。実際の中では、条件式よりも設計パラメータの方が多かたり、少なかたり、同じ数である場合の方が希である。

方程式の数が多いとき 一般に、未知数の数に比べ方程式の数の方が多く場合はその方程式を満たす解は存在しない。では、最もらしい解を求めることを考えよう。いま、図 20 のようにばね定数を測定する。自然長 ℓ 、ばね定数を k の

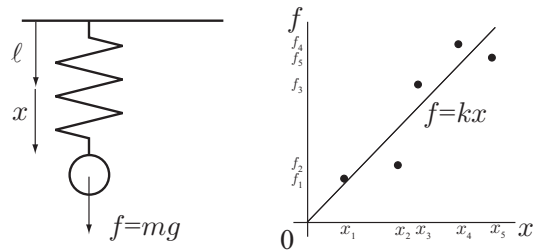


図 20: ばね定数の測定実験

ばねにおもりをさげてそのときの x, f を計測することで多くのデータ (x_i, f_i) が得られる。このとき x と f には

$$f = kx \quad (107)$$

の関係があるので、データは右図のようにプロットされ、その傾きからばね定数を求めるのが一般である。得られたデータが式 (107) を満たすと仮定すると

$$f_i = kx_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (108)$$

の連立方程式が導かれる。これは未知数が k の 1 つで方程式が N 本あることに相当する。さらにこれは行列を用いて

$$F = Xk \quad (109)$$

$$F = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix} \quad (110)$$

と書き表される．実際にはこの方程式を満たす k は存在しない．そこで，まず式 (109) の左から X^T を乗じてみよう．これより，

$$X^T F = X^T X k \quad (111)$$

が得られる．ここで， $X^T X$ は正方行列 (1×1) であるので逆行列が存在し，

$$k = (X^T X)^{-1} X^T F \quad (112)$$

が導かれる．ここで，

$$X^\# = (X^T X)^{-1} X^T \quad (113)$$

は X のムーアペンローズ型の擬似逆行列と呼ばれ，未知数の数 $<$ 式の数，の場合に

$$k = X^\# F \quad (114)$$

として解を得るのが一般である．

未知数の数が多いとき 未知数の数のほうが方程式の数より多い場合には，方程式を満たす解が多数存在し，解は不定である．いま式 (103) において $n < m$ とする． n は方程式の数で m は未知数の数である．このとき，前回と同様の考え方をを用いると，未知数 x のひとつの解は

$$x = A^\# b \quad (115)$$

$$A^\# = A^T (A A^T)^{-1} \quad (116)$$

によって求められる．ただし，式 (113) と式 (116) は形が異なる．これは行列が横長か縦長かによって決まるものである．さらに，これは複数ある中の 1 つの解であり，一般解は

$$x = A^\# b + A^\perp \alpha \quad (117)$$

で得られる．ここで， A^\perp は前に述べた A の零空間の基底からなる行列で，

$$A A^\perp = 0 \quad (118)$$

を満たす．また， α は任意の定数ベクトルである．

一般に，逆行列は

$$A^{-1} A = I, \quad A A^{-1} = I \quad (119)$$

を満たすものとして定義される．しかし，擬似逆行列はこれらを満たさない．一般には，

$$A A^\# A = A, \quad A^\# A A^\# = A^\# \quad (120)$$

を満たすものとして定義される．式 (113)，(116) がこれらを満たすことを確認しておくこと．

4.3 逆問題の不安定性

前節では擬似逆行列について述べたが，式 (113) では， $A^T A$ が正則 (フルランク) であること，式 (116) では $A A^T$ が正則であることを仮定しているが，これは計測データでは成り立たないことがある．また，正則な行列であっても以下のように計算誤差に敏感なことが起こりやすい場合がある．

例えば，いま実験データ b が得られたときモデルパラメータ A から未知パラメータ x を求める問題を考えよう．さらに，ここで A が

$$A = \begin{bmatrix} 1 \times 10^{-6} & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (121)$$

であったとしよう．このとき， A^{-1} は

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 \times 10^6 & -5 \times 10^5 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (122)$$

となる． b が

$$b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (123)$$

の場合， x は

$$x = A^{-1} b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (124)$$

で得られる．一方，計測誤差が加わり，

$$b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2.01 \end{bmatrix} \quad (125)$$

となったとき x は

$$x = A^{-1} b = \begin{bmatrix} -5000 \\ 1.005 \end{bmatrix} \quad (126)$$

となり，解が大きく異なる．これは極端な場合であるが，逆行列によって方程式の解を求める場合は注意が必要であることを述べている．なお， A の 1 つの固有値が零に近いときにこのような現象が起こりやすく，実際この例では

$$\lambda_1 = 2, \quad \lambda_2 = 1 \times 10^{-6} \quad (127)$$

であり λ_2 が零に近い．また，2 つの固有ベクトルが極めて近いときも同様の現象が起こりやすい．すなわち，行列の行列式は零ではないが零に極めて近い場合にこの現象が起こりやすい．この場合，計算機上では零割は起こらないため計算はエラーを出すことなくそのまま進んでしまう．これに対処するために，特異値分解が使われる場合が多い．

4.4 特異値分解

行列 A を次式のように分解することを考える．

$$A = USV^T \quad (128)$$

$$U^T U = I \quad (129)$$

$$V^T V = I \quad (130)$$

$$S = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}, \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0 \quad (131)$$

U, V は正規直交行列で回転行列に相当する． A は対角要素 (正の数) のみで一般に大きい順に並ぶ (大きい順に並ぶように求める)．これを行列 A の特異値分解といい, σ_i を特異値, U, V^T の各要素

$$U = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix}, \quad V^T = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \end{bmatrix} \quad (132)$$

をそれぞれ左特異ベクトル (\mathbf{u}_i), 右特異ベクトル (\mathbf{v}_i^T) という．特異値分解した場合に A を座標変換として見てみよう．これは図 21 に表されるように, V^T で空間を回転し,

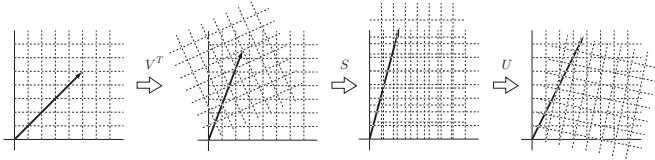


図 21: A の特異値分解による座標変換

S で x 軸, y 軸方向に引き延ばし, U で再び回転する．ただし, $\det U = -1$ のときは空間を右手系から左手系に入れ替える操作が起こる． V^T についても同様である．このとき, U, V^T は回転行列であり, 空間のベクトルの大きさを変えない．変えるのは S のみである．この結果から, $\text{rank} A < n - 1$ のとき $\sigma_n = 0$ であり, 行列のランクは最小特異値の大きさを見ることで判断できる．さらに, 数値計算を行う場合はどこまで零に近い値を零とみなすかという問題が起こる．実際, 式 (127) ではランクは 2 が保たれている．このとき, ランクが落ちそうになる判断を

$$\text{cond. \#} = \frac{\sigma_n}{\sigma_1} \quad (133)$$

によって行う．これを条件数 (condition number) といい行列の評価 (不安定性) に良く用いられる． $A \in R^{2 \times 2}$ のときに行列の不安定性が起こるのは極めてまれであるが, 行列の大きさが大きいときは条件数を見ながら判断を行う必要がある．条件数が小さいとき, $\sigma_m \gg \sigma_{m+1}$ となる m で

$$A = \left[U_m \mid U_{n-m} \right] \begin{bmatrix} S_m & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_m^T \\ V_{n-m}^T \end{bmatrix} \quad (134)$$

$$= U_m S_m V_m^T \quad (135)$$

と分解・近似し,

$$A^{-1} \simeq V_m S_m^{-1} U_m^T \quad (136)$$

として用いる．実際には m は σ_1 の 1.0×10^{-5} 程度のところとなる σ_m によって決めるのが一般である．残念ながら, 実際には行列の大きさが大きいときには特異値分解は計算時間がかかるためオンラインでの計算には向かない．後に述べる SR-Inverse を用いることの方が有用である場合が多い．

4.5 特異値分解による行列の零空間

特異値分解を用いると行列の零空間が求めやすい．いま行列 A が式 (134) のように特異値分解されたとしよう．このとき, V^T が直交行列 (式 (130) を満たす) であることから

$$V_m^T V_m = I, \quad V_m^T V_{n-m} = 0 \quad (137)$$

$$V_{n-m}^T V_m = 0, \quad V_{n-m}^T V_{n-m} = I \quad (138)$$

が満たされるので

$$A V_m = U_m S_m \quad (139)$$

$$A V_{n-m} = 0 \quad (140)$$

となる．これより V_{n-m} は A の零空間に属する基底より構成されており, さらに, 式 (138) から V_{n-m} の各要素 ($\mathbf{v}_{m+1}, \dots, \mathbf{v}_n$) は正規直交基底を表している．これより, 特異値分解によって行列の零空間が求められる．ただし, V_{n-m} の取り方は一意ではない．

5 最適化問題

ある解を求めるにあたり, 最適化がよく用いられる．最適化とは, ある評価関数を設定しこれを最小化する解を求めることである．つまり, 設定した評価関数を軸としてみたときに最適化されているのであって, 真に最適な解を求めているものではない．また, 評価関数は設計者によって決められるので, 適切な評価関数を設定できることが良いものを設計できることにつながる．

最適化の概念をわかりやすくするために, 図 22 に表される系を考えよう．これは, $U = ax^2$ で定義されたポテンシャルの中にある質点である．このポテンシャルにより, 質点には

$$f = -\frac{dU}{dx} = -2ax \quad (141)$$

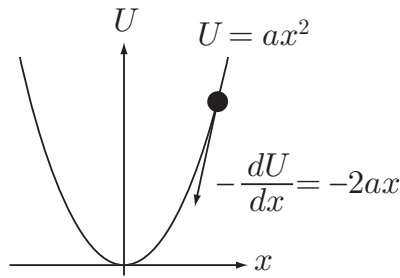


図 22: ポテンシャル

の力が働き、その方向に進む。その後、質点は $-dU/dx = 0$ のところで止まる。すなわち、ある小さな δ を用いて、

$$x_{k+1} = x_k - \frac{dU}{dx} \delta \quad (142)$$

の計算を繰り返し行うことで、 x は U を最小化する解へと落ち込んでいく。これより、設計者が適当な評価関数 U をポテンシャルとして設定し、これに関して式 (142) の繰り返し計算によって U を最小化 (あるいは最大化) することを最適化と呼ぶ。実際の力学ではポテンシャルから生まれた力が質点の加速度として働くためやや異なるが、ここではポテンシャルによる力の大きさと向きだけを考えた。このためには、 U には以下の条件が必要である。

1. U はスカラー値である。
2. U は x に関して下に凸の関数である。
3. U は x に関して下に凸の n 次元関数である。
4. U は x に関して微分可能である。

U の候補としてよく用いられるのが、誤差の 2 ノルムであり、これを評価関数としてときに最小二乗法と呼ばれる。

6 最小二乗法

6.1 評価関数の設定と解法

最小二乗法は最適化の中で最もよく使われる手法であるが、評価関数をどう設定するかによって様々な問題解決が可能であり、その解法も様々である。まず、4.2 節で求めた内容について考えよう。

多くのデータ組 (x_i, f_i) が得られているとき、評価関数

$$J = \sum_{i=1}^N (f_i - kx_i)^2 \quad (143)$$

を設定し、これを最小化する k を求める問題を考える。こ

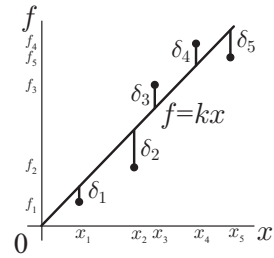


図 23: 評価関数とデータの関係

の評価関数は、図 23 における

$$J = \delta_1^2 + \delta_2^2 + \dots + \delta_N^2 = \sum_{i=1}^N \delta_i^2 \quad (144)$$

に相当する。

設計パラメータは k であり、評価関数の k による勾配は

$$\frac{dJ}{dk} = - \sum_{i=1}^N 2(f_i - kx_i)x_i \quad (145)$$

で得られる。そこで、

1. 適当な k の初期値 k_0 を設定する。
2. 得られている f_i, x_i を用いて、式 (145) から dJ/dk を求める。
3. $k_1 = k_0 - dJ/dk \delta$ として k を更新し、これを繰り返す。ただし、 δ は十分小さな定数である。

として、 J を最小化する k を求める。この手法は勾配法と呼ばれる。

6.2 線形な場合の最小二乗法

6.1 節の手法は一般的なものであるが、この例の場合は評価関数が k に関して線形の形で表されており凸関数である。そのため、 J を最小化する k は

$$\frac{dJ}{dk} = 0 \quad (146)$$

の解として容易に得ることができる。

$$\frac{dJ}{dk} = - \sum_{i=1}^N 2(f_i - kx_i)x_i = 0 \quad (147)$$

より、 J を最小化する k は

$$k = \frac{\sum_{i=1}^N f_i x_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2} \quad (148)$$

によって得られる．なお，ここでは設計変数が k の 1 つであったが， k_1, k_2, \dots のように複数個ある場合には，

$$\begin{cases} \frac{\partial J}{\partial k_1} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial k_2} = 0 \\ \vdots \end{cases} \quad (149)$$

の連立方程式の解として k_i が得られる．

次に，これを行列を使って解いてみる．評価関数 J は式 (109) を用いて

$$J = \|F - Xk\|^2 = (F - Xk)^T(F - Xk) \quad (150)$$

とも表せる．そこで，これを k で微分し， $dJ/dk = 0$ を求めると，

$$\frac{dJ}{dk} = -2X^T(F - Xk) = 0 \quad (151)$$

であり，

$$X^T F = X^T X k \quad (152)$$

$$k = (X^T X)^{-1} X^T F = X^\# F \quad (153)$$

として解が得られる．これより，式 (114) のムーアペンローズ型の擬似逆行列を用いた k の解は最小二乗解を求めていることに相当する．なお，ムーアペンローズ型の擬似逆行列はノルム最小型の擬似逆行列と呼ばれる．設計変数が複数個の場合でも同様にムーアペンローズ型の擬似逆行列を用いることで最小二乗解を求めることができる．

いま，図 24 のように，データ列 $(y_1, y_2, y_3, \dots), (x_1, x_2, x_3, \dots)$ が与えられたとき，これを

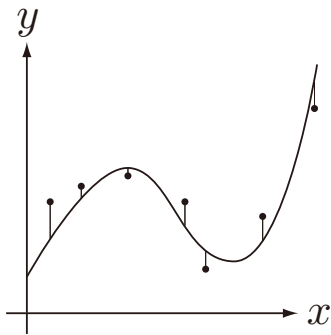


図 24: データをべき乗多項式で近似する

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n \quad (154)$$

のように， x の n 次べき乗多項式で近似することを考える．そこで，評価関数を

$$\begin{aligned} J = & \{y_1 - (a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n)\}^2 \\ & + \{y_2 - (a_0 + a_1 x_2 + \dots + a_n x_2^n)\}^2 \\ & \vdots \end{aligned} \quad (155)$$

としてこれを最小化する a_0, \dots, a_n を求めることを考える．これは非線形最適化にも見えるが，設計変数に関して線形であり，線形問題として扱える．このとき，評価関数は

$$J = \|Y - X\Theta\|^2 \quad (156)$$

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & \dots & x_N^n \end{bmatrix} \quad (157)$$

$$\Theta = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (158)$$

となるので， Θ は

$$\Theta = X^\# Y \quad (159)$$

で得られる．べき乗多項式で近似した関数は，その後の微分 (dy/dx)，2 階微分 (d^2y/dx^2) などに使いやすいので利用されることが多い．

6.3 重み付き最小二乗法

図 25 のように，ある突出したデータがあると解がこれに引き寄せられ，正しい解が得られない場合がある．人間

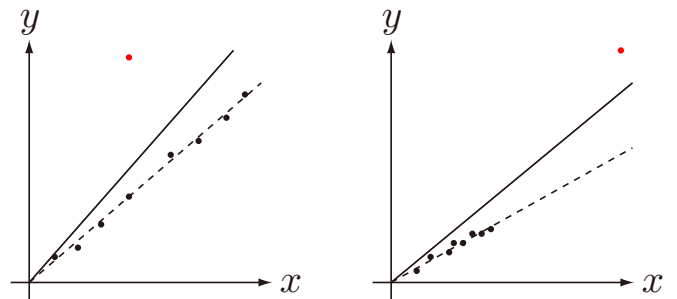


図 25: ある突出したデータがある場合の重み付き最小二乗法

が目の子で直線を引く場合にはちょうど良い案配を決めることができるが，計算機にこれは難しい．このような場合は，データの信頼度に合わせた重み付き最小二乗法を採用する．いま，評価関数を

$$\begin{aligned} J = & w_1^2(y_1 - kx_1)^2 + w_2^2(y_2 - kx_2)^2 + w_3^2(y_3 - kx_3)^2 \\ & + w_4^2(y_4 - kx_4)^2 + \dots + w_N^2(y_N - kx_N)^2 \end{aligned} \quad (160)$$

と設定する． w_1, \dots, w_N は重み係数である．いま， (y_3, x_3) の信頼度が極めて低いとする．このときは他の w_i に

比べ w_3 を小さな値とする．すなわち， $(y_3 - kx_3)^2$ が大きい，つまり $y_3 = kx_3$ の近似が悪くても評価関数への影響は小さくなる．これを重み付き最小二乗法と呼ぶ．これを行列を用いて表すと，

$$J = \|W(Y - Xk)\|^2 = (Y - Xk)^T W^2 (Y - Xk) \quad (161)$$

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_N \end{bmatrix} \quad (162)$$

となり， k の解は

$$k = (WX)^\# WY = (X^T W^2 X)^{-1} X^T W^2 Y \quad (163)$$

で得られる．図 26 は重みを用いなかった場合（鎖線）と重みを用いた場合（実線）を実際に計算してプロットしたものである．

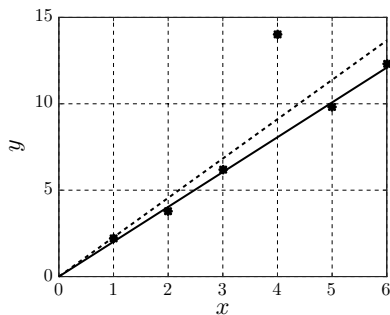


図 26: 重み付き最小二乗法

6.4 SR-Inverse (Singularity Robust Inverse)

これまでに，ムーアペンローズ型の擬似逆行列を用いることで最小二乗解を得ることができることを示したが，式 (114) にあるように，これは $(X^T X)^{-1}$ を要求する．しかし， $X^T X$ はしばしば正則ではないことが起こる．例えば，次の連立方程式

$$\begin{cases} x + y = 1 \\ 2x + 2y = 1 \\ 3x + 3y = 1 \end{cases} \quad (164)$$

を考える．これは，式 (109) の形式では，

$$F = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \\ 3 & 3 \end{bmatrix}, \quad k = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (165)$$

となり， $\text{rank} X = 1$ なので $X^T X$ は正則ではない．この場合，次の評価関数を設定して解を得ることがある．

$$J = \|F - Xk\|^2 + \|Wk\|^2 \quad (166)$$

ただし， W は重み行列で一般には

$$W = \begin{bmatrix} w & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & w \end{bmatrix} \quad (167)$$

が用いられる． w は定数である．さらに，これは

$$J = \left\| \begin{bmatrix} F \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} X \\ W \end{bmatrix} k \right\|^2 \quad (168)$$

で書き換えられ，これより，

$$k = \begin{bmatrix} X \\ W \end{bmatrix}^\# \begin{bmatrix} F \\ 0 \end{bmatrix} \quad (169)$$

となる．このとき，

$$\begin{bmatrix} X \\ W \end{bmatrix}^\# = [X^T X + W^T W]^{-1} [X^T \quad W^T] \quad (170)$$

であり， $X^T X + W^T W$ の正則性が保証されるようになる．このため，この計算手法は計算機に使いやすい手法であるが，そもそも， $F = Xk$ を満たす解が存在してもそれを求めることをあきらめており，数学的ではないが工学的な手法であると言える．

6.5 拘束条件付き最小二乗法

最小二乗法を適用する場合「この項目は必ず満たさなければならない」という拘束条件（あるいは境界条件）が付加される場合がある．その場合の解法について述べる．

ラグランジュの未定乗数法 いま，設計変数を a として，拘束条件を

$$y_0 = g(x_0, a) \quad (171)$$

とする．さらに，

$$J = \|y_1 - f(x_1, a)\|^2 + \|y_2 - f(x_2, a)\|^2 + \cdots + \|y_N - f(x_N, a)\|^2 \quad (172)$$

を最小化する解を求めたいとする．このときは，評価関数を

$$\hat{J} = \|y_1 - f(x_1, a)\|^2 + \|y_2 - f(x_2, a)\|^2 + \cdots + \|y_N - f(x_N, a)\|^2 - \lambda(y_0 - g(x_0, a)) \quad (173)$$

と設定し, a に加え, λ も設計変数として扱った勾配法を適用する. すなわち,

$$a \leftarrow a - \frac{d\hat{J}}{da} \delta \quad (174)$$

$$\lambda \leftarrow \lambda - \frac{d\hat{J}}{d\lambda} \delta \quad (175)$$

の繰り返し計算を行う. ここで, λ はラグランジュの未定乗数と呼ばれ拘束条件の数だけ存在し, 拘束条件が満たされなければその分徐々に大きくなる. これは重み付き最小二乗法において, 拘束条件が満たされるまでその重み係数を大きくし続けるという解釈が可能である. ただし, 設計変数 a の数が少なく, そもそも拘束条件を全て満たす a が存在しない場合には λ は発散するので注意する必要がある.

行列の零空間を用いる方法 – 線形の場合 – 拘束条件, および評価関数 J が設計変数 a に関して線形の場合はもっと簡単に解が得られる. いま, 拘束条件を

$$Y_0 = X_0 a \quad (176)$$

とし, 評価関数 J

$$J = \|Y - Xa\|^2 \quad (177)$$

を最小化する問題を考える. 式 (176) の a の一般解は X_0 の零空間 X_0^\perp と任意定数 α を用いて

$$a = X_0^\# Y_0 + X_0^\perp \alpha \quad (178)$$

と表せる. すなわち, α がいかなる値でも式 (176) を満たす必要十分条件である. 次に, α が式 (177) を最小化するように求める. 式 (177) の a に式 (178) を代入して

$$J = \|Y - XX_0^\# Y_0 - XX_0^\perp \alpha\|^2 \quad (179)$$

が得られる. これより, J を最小化する α は

$$\alpha = (XX_0^\perp)^\# (Y - XX_0^\# Y_0) \quad (180)$$

であり, これを式 (178) に代入して

$$a = X_0^\# Y_0 + X_0^\perp (XX_0^\perp)^\# (Y - XX_0^\# Y_0) \quad (181)$$

を得る.

6.6 ベクトルの射影

あるベクトルを直線, あるいは平面上に直交射影することはよくある問題である. これは最小二乗法を応用することで容易に解を得ることができる.

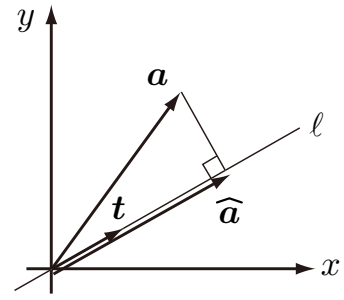


図 27: ベクトルの直線への直交射影

図 27 のように, ベクトル a を方向ベクトル t の直線 ℓ 上に直交射影する問題を考える. このとき, 射影されたベクトル \hat{a} はある定数 α を用いて

$$\hat{a} = t\alpha \quad (182)$$

と書け, さらに直交射影であることからこれは

$$J = \|a - t\alpha\|^2 \quad (183)$$

を最小化する α を求める問題となる. これより, α は

$$\alpha = t^\# a \quad (184)$$

で得られ, \hat{a} は

$$\hat{a} = tt^\# a \quad (185)$$

で与えられる. ここでは 2 次元平面での例を示したが, この方法では次元の数に関係なく解が得られる.

3 次元空間内ベクトル ξ を 2 次元平面 A

$$x + y + z = 0 \quad (186)$$

に直交射影する問題を考えよう. 平面 A の法線ベクトル n は

$$n = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T \quad (187)$$

であるので, n に直交する 2 つの独立なベクトル

$$b_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (188)$$

$$b_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}^T \quad (189)$$

を用いれば, 平面 A 上にある全ての点 a は

$$a = b_1 \alpha_1 + b_2 \alpha_2 = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = B\alpha \quad (190)$$

と表せる. そのため, ξ の A への直交射影は

$$J = \|\xi - B\alpha\|^2 \quad (191)$$

を最小化する α を求める問題となり, α は

$$\alpha = B^\# \xi \quad (192)$$

で与えられ, ξ の射影 $\hat{\xi}$ は

$$\hat{\xi} = BB^\# \xi \quad (193)$$

で得られる. なお, このとき射影によって消滅した ξ の法線ベクトル方向の成分は

$$\bar{\xi} = \xi - BB^\# \xi = (I - BB^\#) \xi \quad (194)$$

となる.

6.7 逐次最小二乗法

行列 A の擬似逆行列を求める際, $(AA^T)^{-1}$ を求めなくてはならない. これを計算機で実行する場合, A のサイズが大きいと多くのメモリを要求することとなる. そこでこれを逐次的に求める逐次最小二乗が有効である. 逐次最小二乗法のためには次の逆行列補題が必要である.

$$(A + BC)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}B(I + CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} \quad (195)$$

特に B, C がベクトルの場合,

$$(A + bc^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}bc^T A^{-1}}{1 + c^T A^{-1}b} \quad (196)$$

となる. では次の最小二乗問題を考えよう.

$$A = \min \left\| \begin{bmatrix} Y & y \end{bmatrix} - A \begin{bmatrix} X & x \end{bmatrix} \right\| \quad (197)$$

このとき A は

$$A = \begin{bmatrix} Y & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X^T \\ x^T \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} X & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X^T \\ x^T \end{bmatrix} \right)^{-1} \quad (198)$$

$$= \begin{bmatrix} Y & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X^T \\ x^T \end{bmatrix} (XX^T + xx^T)^{-1} \quad (199)$$

で表されるが, 逆行列補題より

$$\begin{aligned} & (XX^T + xx^T)^{-1} \\ &= (XX^T)^{-1} - \frac{(XX^T)^{-1}xx^T(XX^T)^{-1}}{1 + x^T(XX^T)^{-1}x} \end{aligned} \quad (200)$$

で表される. ここで,

$$P_m = (XX^T)^{-1} \quad (201)$$

$$P_{m+1} = (XX^T + xx^T)^{-1} \quad (202)$$

とおくと

$$P_{m+1} = P_m - \frac{P_m xx^T P_m}{1 + x^T P_m x} \quad (203)$$

が得られる. これらの結果を用いて

$$A = \min \left\| \begin{bmatrix} y_1 & \cdots & y_N \end{bmatrix} - A \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_N \end{bmatrix} \right\| \quad (204)$$

を満たす A は

1. P_1 を

$$P_1 = y_1 x_1^T (x_1 x_1)^{-1} \quad (205)$$

として P の初期値を得る.

2. P_m が与えられたとき P_{m+1} を次式で更新する.

$$P_{m+1} = P_m - \frac{P_m x_{m+1} x_{m+1}^T P_m}{1 + x_{m+1}^T P_m x_{m+1}} \quad (206)$$

で与えられる. ここでは逆行列を求めないので計算が容易である (分母はスカラーなので単純な割り算). また, ここまでの A すなわち

$$J = \left\| \begin{bmatrix} y_1 & \cdots & y_{m+1} \end{bmatrix} - A \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_{m+1} \end{bmatrix} \right\| \quad (207)$$

を最小化する A はこのとき A は

$$A = \begin{bmatrix} y_1 & \cdots & y_{m+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^T \\ \vdots \\ x_{m+1}^T \end{bmatrix} P_{m+1} \quad (208)$$

によって得られる. ここでも逆行列を用いていないので計算が容易である.

3. 上記を $m = 1 \sim N$ まで繰り返すことで式 (204) を満たす A が求められる.

この方法では, 逆行列を $[\cdot]^{-1}$ を用いずに計算しているが, このことは逆計算を式 (206) においてスカラーでの割り算とし, 繰り返しによって求めるところにある.

式 (197) に

$$A = \min \left\| \begin{bmatrix} \alpha Y & y \end{bmatrix} - A \begin{bmatrix} \alpha X & x \end{bmatrix} \right\| \quad (209)$$

のように $0 < \alpha < 1$ の忘却係数を設定することが可能であり, 現在の情報を重視し, 過去の情報は重みを小さくしていくことができる. これはいわゆる学習に相当する.

7 常微分方程式の数値解法

7.1 陰解法と陽解法

微分方程式の厳密解が求められない場合, 数値的に積分をして数値解を求めなければならない. 一般に微分方程式

の厳密解は求められなく（これまでの数学で解いてきたものの方が特殊ケース）数値積分が必要となる。

まず，図 18 の系について考えてみる．この運動方程式は式 (90) で表される．これを数値積分して解を得てみよう．式 (91) は陽解法と呼ばれ，その原理は

$$\begin{cases} \dot{x}[k+1] = \dot{x}[k] + T\ddot{x}[k] \\ x[k+1] = x[k] + T\dot{x}[k] \end{cases} \quad (210)$$

の考え方に基づいている．では，ここで考え方を少し変えてみる．運動方程式は本来 2 階微分値と 1 階微分値，0 階微分値の関係を表している式であり，積分した結果もこの式を満たしていることが必要である．そのために式 (210) を

$$\begin{cases} \dot{x}[k+1] = \dot{x}[k] + T\ddot{x}[k+1] \\ x[k+1] = x[k] + T\dot{x}[k+1] \end{cases} \quad (211)$$

かつ，

$$m\ddot{x}[k+1] = -kx[k+1] - d\dot{x}[k+1] \quad (212)$$

とする．すなわち，これは積分した時刻 $k+1$ において運動方程式が満たされる速度，加速度を用いて積分するというものであり，陰解法と呼ばれる．式 (211)，(212) では $x[k+1]$ ， $\dot{x}[k+1]$ ， $\ddot{x}[k+1]$ が未知数であり，これらの連立方程式を解くこととなる．実際には，式 (211)，(212) を連立させて

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & -T \\ 1 & -T & 0 \\ k & d & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x[k+1] \\ \dot{x}[k+1] \\ \ddot{x}[k+1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{x}[k] \\ x[k] \\ 0 \end{bmatrix} \quad (213)$$

として，

$$\begin{bmatrix} x[k+1] \\ \dot{x}[k+1] \\ \ddot{x}[k+1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -T \\ 1 & -T & 0 \\ k & d & m \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \dot{x}[k] \\ x[k] \\ 0 \end{bmatrix} \quad (214)$$

によって解を得る．陽解法では現在時刻で運動方程式が満たされる値に基づき数値積分を行うため，系のエネルギー量のバランスが崩れている．そのため，積分の時間刻み幅を大きくすると積分によってエネルギーが加わり，不安定になる場合がある．図 19 ではこの現象をスペクトル半径として示した．

7.2 台形積分

陽解法と陰解法の両方を用いた手法として，台形積分を行う方法もある．次の微分方程式を考える．

$$\dot{x} = Ax \quad (215)$$

このとき，

$$\dot{x}[k] = Ax[k] \quad (216)$$

$$\dot{x}[k+1] = Ax[k+1] \quad (217)$$

が成り立ち，以下の台形積分を考える．

$$x[k+1] = x[k] + T \frac{\dot{x}[k+1] + \dot{x}[k]}{2} \quad (218)$$

これより，

$$x[k+1] = x[k] + TA \frac{x[k+1] + x[k]}{2} \quad (219)$$

が得られ，これを $x[k+1]$ について解くと

$$x[k+1] = (2I - TA)^{-1}(2I + TA)x[k] \quad (220)$$

が得られる．式 (216)，(217) において，時刻 k と $k+1$ の両方を考慮していることが分かる．

7.3 ルンゲクッタ法

運動方程式が非線形の場合には台形積分を表すことが難しく，さらに，非線形性が強い場合には時刻 k ， $k+1$ だけでなく，その中間の時間も考慮する必要がある．そのため的手法として，ルンゲクッタ法を説明する．微分方程式が

$$\dot{x} = f(x) \quad (221)$$

で与えられたとき，その積分を

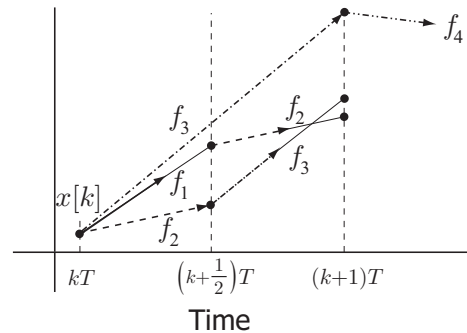


図 28: ルンゲクッタ法

$$x[k+1] = x[k] + T \frac{f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4}{6} \quad (222)$$

$$f_1 = f(x[k]) \quad (223)$$

$$f_2 = f\left(x[k] + \frac{T}{2}f_1\right) \quad (224)$$

$$f_3 = f\left(x[k] + \frac{T}{2}f_2\right) \quad (225)$$

$$f_4 = f(x[k] + Tf_3) \quad (226)$$

によって定義する．これは図 28 のように f_1, f_2, f_3, f_4 を計算しそれらの重み付き平均をとるものであり，時刻 $k, k + 1/2, k + 1$ を考慮した積分となっている．

図 29 は，図 18 のシステムに対して運動方程式を陽解法，陰解法，台形積分，ルンゲクッタ法を用いて数値積分（シミュレーション）した結果である．なお，いずれも $d = 0$ とした．また，今回の運動方程式は線形系であり厳密解が

$$x(t) = \exp(At)x_0 \quad (227)$$

で得られるため，これを破線で示した．ある特殊なケース

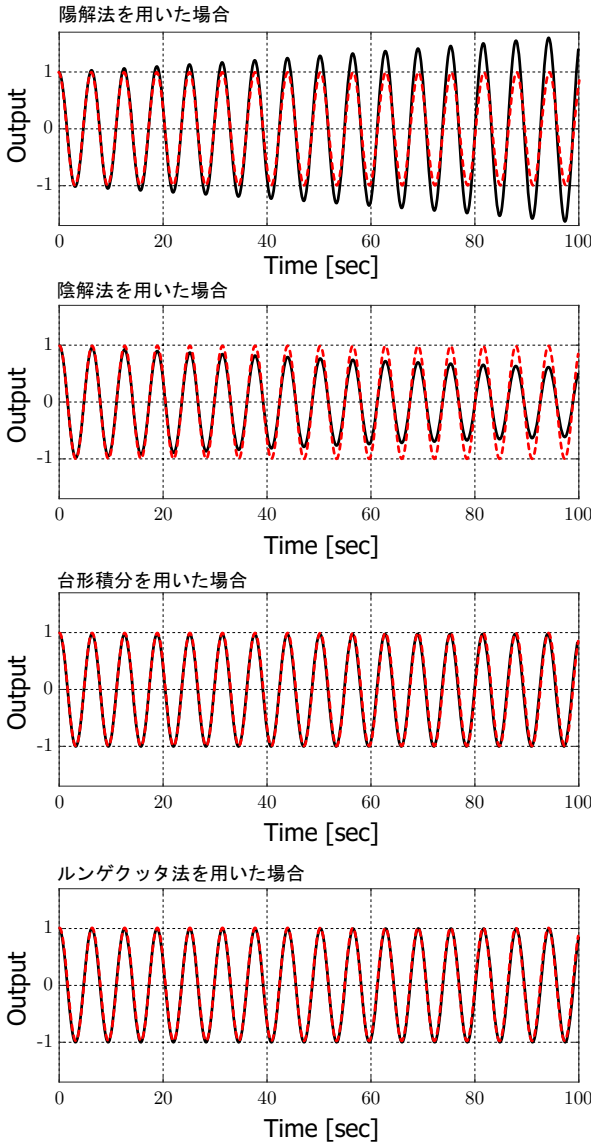


図 29: マスばねダンパ系のシミュレーション

ではあるが，陽解法ではエネルギーが加わり振動が発散し，陰解法では発散は抑えられるものやや減衰する傾向が見られる．これに対し，台形積分，ルンゲクッタ法では一定の振動が求められている．

7.4 偏微分方程式の場合

偏微分方程式の場合には，陰解法の方が重要である．以下の微分方程式を考える．

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (228)$$

これは拡散方程式と呼ばれ，ある場所の温度 T の時間変化が温度の空間的な広がりの 2 階微分値に従って変化するものであり，非常に良く用いられる式である．また，温度は空間的な広がりを持つものであるため，ある特定の場所のみの温度を計算することは希で，図 30 のように空間を要素に分けた考え方で解を求めていく．特に重要なことは，

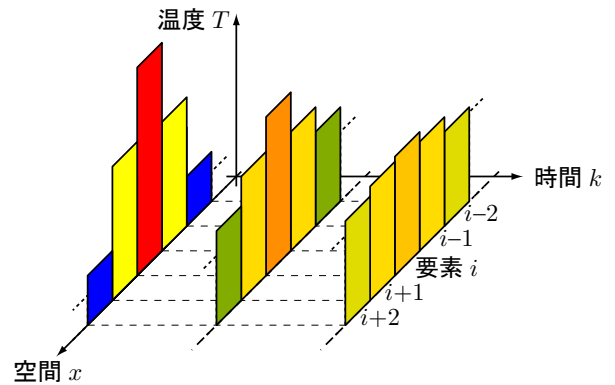


図 30: 温度の拡散

T の温度変化率は空間 2 階微分値に一致することであり，このときの時刻を同一にする必要がある．

今，要素 i の時刻 k における温度を $T_i[k]$ と書く．このとき，陽解法では式 (228) は

$$\begin{aligned} & \frac{T_i[k+1] - T_i[k]}{\Delta t} \\ &= \frac{\kappa}{\Delta x} \left(\frac{T_{i+1}[k] - T_i[k]}{\Delta x} - \frac{T_i[k] - T_{i-1}[k]}{\Delta x} \right) \\ &= \kappa \frac{T_{i+1}[k] - 2T_i[k] + T_{i-1}[k]}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (229)$$

で表される．このとき，未知数は $T_i[k+1]$ のみであり，この方程式の解として得られる．一方，陰解法では

$$\begin{aligned} & \frac{T_i[k+1] - T_i[k]}{\Delta t} \\ &= \kappa \frac{T_{i+1}[k+1] - 2T_i[k+1] + T_{i-1}[k+1]}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (230)$$

となり，未知数は $T_{i+1}[k+1], T_i[k+1], T_{i-1}[k+1]$ の 3 個，さらに，要素を $i+1, i+2, \dots$ と増やすごとに未知数が 1 つずつ増え，最後に両端点での境界条件（端は何か接触到しているため温度一定）を 2 つ与えることで方程式の数と未知数の数が一致し，解を得ることができるようになる．

8 導関数の差分近似

5章, 6章では評価関数の勾配 (導関数) を求め, これを用いて最適値に収束させる手法について述べた. しかし, 評価関数の導関数を求める際には手計算が必要であり, 特に非線形性が強い場合には間違いも起こしやすい. そこで, 数値的に導関数を求める手法について説明する.

スカラー値 J をベクトル x

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (231)$$

で微分すると

$$\frac{dJ}{dx} = \left[\frac{\partial J}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial J}{\partial x_n} \right] \quad (232)$$

となる. いま, 評価関数 J が

$$J = f^T(x) f(x) \quad (233)$$

であるので, その導関数は

$$\frac{dJ}{dx} = \left[2f^T(x) \frac{\partial J}{\partial x_1} \quad \cdots \quad 2f^T(x) \frac{\partial J}{\partial x_n} \right] \quad (234)$$

いま, $\partial J / \partial x_1$ の計算が煩雑なときは, 以下のようにして求める.

1. ある x_0 に対して $J(x_0)$ を求める.
2. 次に,

$$x_+ = x_0 + \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (235)$$

として, $J(x_+)$ を求める.

3. さらに,

$$x_- = x_0 - \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (236)$$

として $J(x_-)$ を求める.

4. これらを合わせ,

$$\frac{\partial J}{\partial x_1} = \frac{J(x_+) - J(x_-)}{2\delta x_1} \quad (237)$$

として $\partial J / \partial x_1$ とする.

この手法では順問題の解のみで逆問題の解が得られるので扱いやすくなるが, δx_1 の大きさが解の精度を決定するうえ, 収束する解に近づいたときに解が振動する現象が起こ

りやすい. また, 設計パラメータが多い場合には非常に多くの計算を要するため, 計算時間が長くなる場合もある. この手法を用いて

$$\sin \theta = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (238)$$

を満たす θ を求めてみよう. この方程式の厳密解は

$$\theta = \sin^{-1} \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{\pi}{4} \quad (239)$$

となる. 評価関数を

$$J = \left\| \sin \theta - \frac{\sqrt{2}}{2} \right\|^2 \quad (240)$$

としてこれを最小化しよう.

$$\frac{\partial J}{\partial \theta} = 2 \left(\sin \theta - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \cos \theta \quad (241)$$

であるのでこれを用いた場合と数値的な差分を求めた方法とで比べた. 結果を図 31 に示す. 下図で導関数を数値的に求めている. 収束計算におけるステップ幅などにも依存

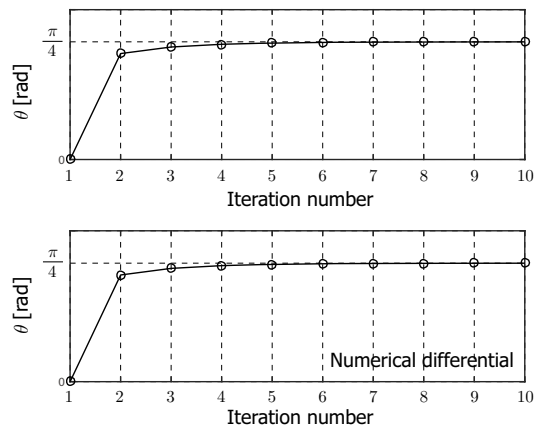


図 31: arcsin を求める

するが, この場合はどちらの手法でも数回でほぼ厳密解に収束する様子が理解できる.

付録 – 行列を用いた計算例 –

A 振動の解析

行列を利用することで複雑な系の解析が行える. 図 32 にある質点の運動が

$$m\ddot{x} = -kx \quad (242)$$

で与えられることは簡単である. これは 1 自由度振動系で

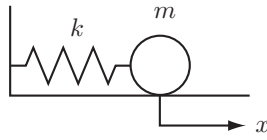


図 32: 1 自由度振動系

その固有振動数 ω_c は

$$\omega_c = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (243)$$

で与えられる。では、図 33 で表される 2 自由度振動系を考えよう。これは 2 つの質点が 3 つのばねで結合された 2

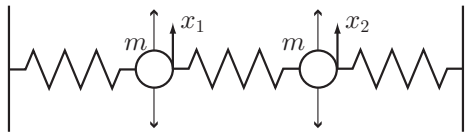


図 33: 2 自由度振動系

自由度振動系で、質点は図の矢印に沿った動きしかできず、その変位を x_1, x_2 とする。この系は図 34 に表されるような振動のモード (1 次モードと 2 次モード) があると予想されるであろう。まず、この系の運動方程式を考えよう。図

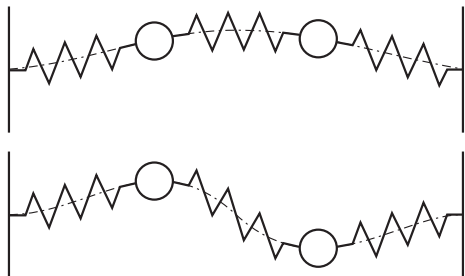


図 34: 2 自由度振動系の振動モード

35 のように x_1 の移動に対してばねの復元力 $-kx_1$ が働く とすると、運動方程式は

$$m\ddot{x}_1 = -kx_1 - k(x_1 - x_2) \quad (244)$$

$$m\ddot{x}_2 = -kx_2 - k(x_2 - x_1) \quad (245)$$

となる。これを行列を用いて表すと

$$\begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2k & k \\ k & -2k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (246)$$

となり、

$$\ddot{x} = Ax \quad (247)$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad A = \frac{1}{m} \begin{bmatrix} -2k & k \\ k & -2k \end{bmatrix} \quad (248)$$

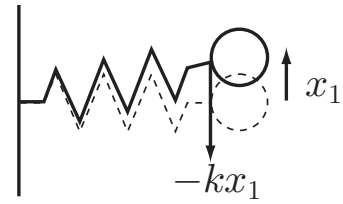


図 35: 質点に働く力

が得られる。ここで、 A の固有値は

$$\det \left(\begin{bmatrix} \lambda + \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ -\frac{k}{m} & \lambda + \frac{2k}{m} \end{bmatrix} \right) = 0 \quad (249)$$

より、

$$\lambda_1 = -\frac{k}{m}, \quad \lambda_2 = -\frac{3k}{m} \quad (250)$$

となる。また、対応する固有ベクトルは

$$t_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad t_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \quad (251)$$

である。この結果を用いると式 (247) は

$$\ddot{x} = \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}^{-1} x \quad (252)$$

となり、ここで

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}^{-1} x \quad (253)$$

とおくと、

$$\ddot{\hat{x}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \hat{x} \quad (254)$$

が得られる。これは式 (244), (245) の x_1 と x_2 のカップリングをもった運動方程式が

$$\ddot{\hat{x}}_1 = \lambda_1 \hat{x}_1 \quad (255)$$

$$\ddot{\hat{x}}_2 = \lambda_2 \hat{x}_2 \quad (256)$$

のように独立な 2 つの運動方程式によって記述され、 \hat{x}_1, \hat{x}_2 のモードの固有振動数は

$$\omega_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{\frac{3k}{m}} \quad (257)$$

が得られる。これは A の固有値の平方根と一致する。さらに、それぞれの振動モードのモードシェイプはその固有ベクトルで表され、図 36 のようになる。これは図 34 に一致する。

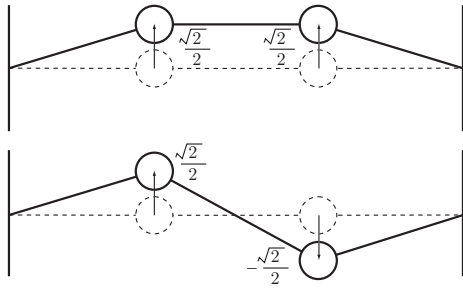


図 36: 固有ベクトルによるモードシェイプ

B 非線形方程式の解法

これまでに線形方程式の解法について述べた．線形方程式は非常に解きやすいが，非線形方程式の場合，これを未知数について解いて，解（厳密解という）を求めることは極めて難しい場合が多い．これに関して触れる．いま，次式で表される非線形な方程式を考える．

$$y = f(x) \quad (258)$$

ただし，未知数は $x \in R^n$ で， $y \in R^m$ ， $f(x) \in R^m$ である．未知数の数が n ，方程式の数が m であるが，この大小に関してはここでは触れない．この方程式から f の逆関数を求め

$$x = f^{-1}(y) \quad (259)$$

とすることができればこの方程式の厳密解が求められるが，一般に逆関数を求めることは難しい．そこで，繰り返し計算によって数値解を求めることとしよう．厳密解は方程式を必ず満たす解であるが，数値解は厳密解に収束するものであり，繰り返しを無限回行えば厳密解に一致する．ただし，解の収束性という議論もありアルゴリズムに不備があると解が収束しない可能性，また，収束するが厳密解に一致しない可能性などもある．

いま，式 (258) を満たす解 y_s ， x_s が存在するとしよう．このとき， x が x_s から $x_s + \delta_x$ だけ変化し，それに伴って y が y_s から $y_s + \delta_y$ へと変化したとする．ただし， δ_x ， δ_y は十分小さな値とする．このとき式 (258) は

$$y_s + \delta_y = f(x_s + \delta_x) \quad (260)$$

となり，左辺を x_s の周りでテイラー展開することで

$$y_s + \delta_y = f(x_s) + \frac{\partial f(x_s)}{\partial x} \delta_x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f(x_s)}{\partial x^2} \delta_x^2 + \dots \quad (261)$$

が得られる．ここで 2 次以上の微量を無視すると

$$\delta_y = \frac{\partial f(x_s)}{\partial x} \delta_x \quad (262)$$

が得られる．ここで，式 (262) はベクトルをベクトルで微分する形式になっているが，正確にはこれを J とおいて，

$$J(x_s) = \frac{\partial f(x_s)}{\partial x} \quad (263)$$

$$= \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \quad \dots \quad \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right]_{x=x_s} \quad (264)$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (265)$$

となる．この J はヤコビ行列と呼ばれるもので，ある x のときの，入力変化 δ_x に対する出力の変化 δ_y の関係を表すものである．

いま， x に適当な値 $x_0 \neq x_s$ を設定しよう．また，このときの y を $y_0 = f(x_0) \neq y_s$ とする．このとき式 (263) の関係から

$$y_0 - y_s = J(x_0)(x_0 - x_s) \quad (266)$$

の関係が成り立つ．これより，

$$x_0 - x_s = J(x_0)^{\#}(y_0 - y_s) \quad (267)$$

となるので，

$$x_1 = x_0 - J(x_0)^{\#}(y_0 - y_s) \quad (268)$$

とすれば， x_1 は x_s に一致するはずである．しかし， $J(x_0)$ は $x = x_0$ の瞬間の値であるため，実際には微量 δ を設定し，

$$x_1 = x_0 - \delta J(x_0)^{\#}(y_0 - y_s) \quad (269)$$

として x_1 を x_0 より x_s に近づける．そこで，

$$x_{i+1} = x_i - \delta J(x_i)^{\#}(y_i - y_s) \quad (270)$$

としてこれを繰り返し計算することで， x_i を

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_i \rightarrow x_s \quad (271)$$

とすることができる．この概念を図 37 に示そう． J の勾

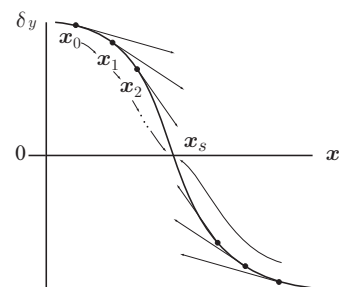


図 37: 収束計算の概念図

配に基づいて徐々に x_i を x_s に近づけるものである。この方法はニュートンラプソン (Newton-Laphson) 法や勾配法と呼ばれる方法で、非線形方程式の解を求める際に良く用いられる方法である。ただし、ここで $J^\#$ を用いているが J が行フルランクでなくなると、 $J^T J$ のランクが落ちてその逆行列が求まらない。これにより $J^\#$ が存在しなくなり、このときを特異点という。これは前述した方程式の不安定性と同じ結果を導き、正しい収束解が得られなくなるのでこの場合にも $J^T J$ を特異値分解してその条件数から逆行列の近似解を求める必要がある。また、この方法は m の値に対して一般性を持つがその値が大きいつまは多次元空間の探索となるため収束が遅くなる。

C ロボットの運動学問題

C.1 2 平面リンクマニピュレータ

図 38 に表されるロボットを考えよう。この手先の座標

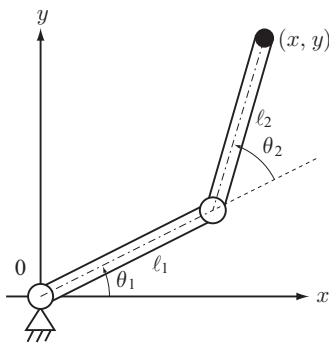


図 38: 2 リンク平面マニピュレータ

(x, y) は

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 \cos \theta_1 + l_2 \cos (\theta_1 + \theta_2) \\ l_1 \sin \theta_1 + l_2 \sin (\theta_1 + \theta_2) \end{bmatrix} \quad (272)$$

によって表される。 θ_1, θ_2 を与えたときに手先位置を求めることを順運動学問題といい、この厳密解は式 (272) によって与えられている。逆に手先位置 x, y を与えたときにこれになるように θ_1, θ_2 を求めることを逆運動学問題といい、この厳密解を得るには式 (272) を θ_1, θ_2 について解かなければならない。これは困難であるため、ここでは数値解を求めることを考えよう。式 (272) より、ヤコビ行列は次式によって得られる。

$$J(\theta_1, \theta_2) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \theta_1} & \frac{\partial x}{\partial \theta_2} \\ \frac{\partial y}{\partial \theta_1} & \frac{\partial y}{\partial \theta_2} \end{bmatrix} \quad (273)$$

$$= \begin{bmatrix} -l_1 \sin \theta_1 - l_2 \sin (\theta_1 + \theta_2) & -l_2 \sin (\theta_1 + \theta_2) \\ l_1 \cos \theta_1 + l_2 \cos (\theta_1 + \theta_2) & l_2 \cos (\theta_1 + \theta_2) \end{bmatrix} \quad (274)$$

いま手先を x_r, y_r へ持っていきたい。この解を得るためには θ_1, θ_2 に適当な初期値 θ_1^0, θ_2^0 を与え、このときの x^0, y^0 を式 (272) から求めることで、

$$\begin{bmatrix} \theta_1^{i+1} \\ \theta_2^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_1^i \\ \theta_2^i \end{bmatrix} - \delta J^{-1}(\theta_1^i, \theta_2^i) \begin{bmatrix} x^i - x_r \\ y^i - y_r \end{bmatrix} \quad (275)$$

で繰り返し計算することで求められる。この例を示そう。図 39 のように適当な初期値を与えることで目標の手先位置 x_r, y_r に収束する様子が分かる。

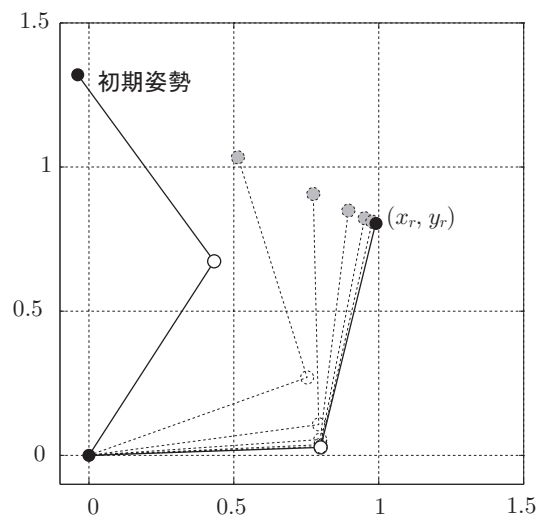


図 39: 2 リンク平面マニピュレータの逆運動学計算

C.2 3 リンク平面マニピュレータ

つぎに図 40 にあるような 3 平面リンクマニピュレータの場合を考えよう。このマニピュレータの手先位置は

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 C_1 + l_2 C_{12} + l_3 C_{123} \\ l_1 S_1 + l_2 S_{12} + l_3 S_{123} \end{bmatrix} \quad (276)$$

によって表される。ただし、 C_{ij}, S_{ij} はそれぞれ $\cos(\theta_i + \theta_j), \sin(\theta_i + \theta_j)$ を表す。このマニピュレータの逆運動学問題を考えよう。この方程式は未知数が $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ の 3 つで方程式が 2 本となり、方程式よりも未知数の方が多い。そのため、この解は無限に存在しその一般解はひとつの解と方程式の補空間によって表される。ただし、ここでの方程式は非線形方程式であるため補空間が一般的な形で求めることはできないので、ここでは解が無限にあることだけに触れるものとする。では、逆運動学問題の解を考えよう。

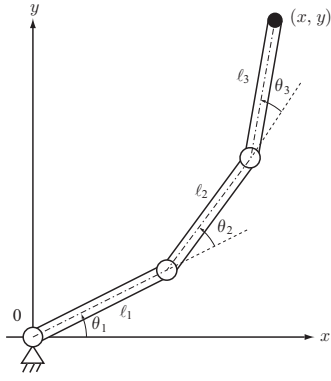


図 40: 3 リンク平面マニピュレータ

2 リンク平面マニピュレータの場合と同様に厳密解を求めることが難しいので数値解によって解を得る．ここでは，ヤコビ行列が

$$J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \theta_1} & \frac{\partial x}{\partial \theta_2} & \frac{\partial x}{\partial \theta_3} \\ \frac{\partial y}{\partial \theta_1} & \frac{\partial y}{\partial \theta_2} & \frac{\partial y}{\partial \theta_3} \end{bmatrix} \quad (277)$$

$$= \begin{bmatrix} -l_1 S_1 - l_2 S_{12} - l_3 S_{123} & -l_2 S_{12} - l_3 S_{123} & -l_3 S_{123} \\ l_1 C_1 + l_2 C_{12} + l_3 C_{123} & l_2 C_{12} - l_3 C_{123} & l_3 C_{123} \end{bmatrix} \quad (278)$$

となり， 2×3 の行列である．そのため逆行列は存在せず，式 (275) のかわりに

$$\begin{bmatrix} \theta_1^{i+1} \\ \theta_2^{i+1} \\ \theta_3^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_1^i \\ \theta_2^i \\ \theta_3^i \end{bmatrix} - \delta J^\#(\theta_1^i, \theta_2^i, \theta_3^i) \begin{bmatrix} x^i - x_r \\ y^i - y_r \end{bmatrix} \quad (279)$$

を用いる．このときの計算結果を図 41 に示す．二通りの初期姿勢に対して数値解を求めた．解は無数にあるため初期姿勢によって異なる解へと収束する．

D 座標変換とクォータニオン

D.1 座標変換行列

座標変換を行列ではなく，ベクトルと回転で表す方法について述べておこう．いま，図 42 に表されるような \hat{X} 座標系から X 座標系への座標変換を考えよう．点 A が \hat{X} 座標系で $A(\hat{x}_a, \hat{y}_a)$ で表され， X 座標系で $A(x_a, y_a)$ で表されたとする．このとき，これらの間の関係は

$$\begin{bmatrix} x_a \\ y_a \end{bmatrix} = R_\theta \begin{bmatrix} \hat{x}_a \\ \hat{y}_a \end{bmatrix} \quad (280)$$

$$R_\theta = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (281)$$

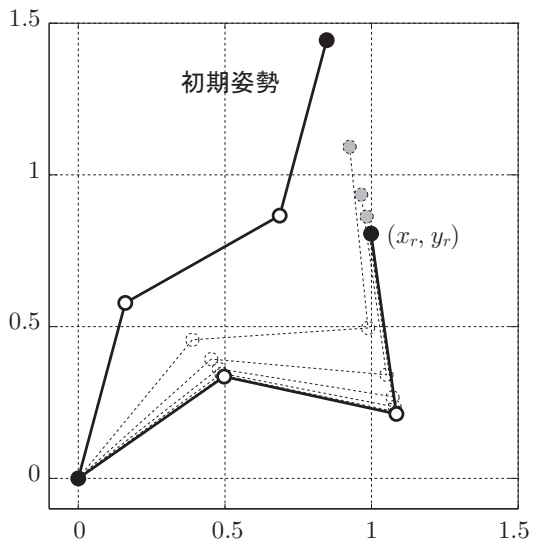
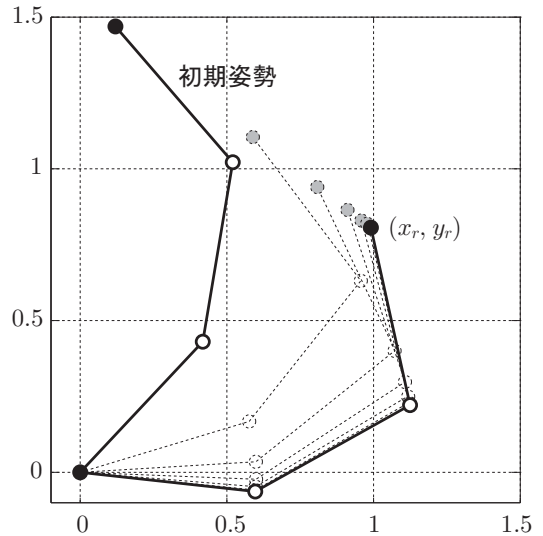


図 41: 3 リンク平面マニピュレータの逆運動学計算

で表される．このとき， R_θ は座標変換行列で，ここでは θ だけの回転を表すものである． R_θ の特徴としては，

$$\lambda(R_\theta) = 1 \quad (282)$$

$$R_\theta^{-1} = R_\theta^T \quad (283)$$

が挙げられる．これは， R_θ が直交行列であることから明らかである．

次に 3 次元の場合を考えよう．上の例では 2 次元での回転行列であるが，これは z 軸回りの回転とみなすこともできる．3 次元の場合は x 軸回り， y 軸回り， z 軸回りの回転によってその形が以下のように異なっている．

$$R_\theta^x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (284)$$

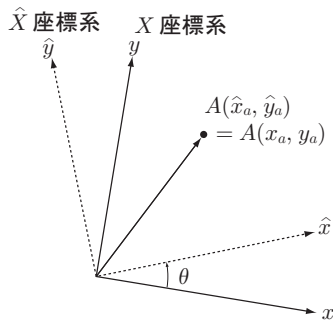


図 42: 平面における座標変換

$$R_\theta^y = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (285)$$

$$R_\theta^x = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (286)$$

いずれの場合も直交行列なので式 (282), (283) の特徴を持っている。さて, 3次元空間の姿勢の自由度は3であるので任意の座標変換行列 R は式 (284), (285), (286) の組み合わせで表現できる。

$$R(\theta, \phi, \psi) = R_\psi^z R_\phi^y R_\theta^x \quad (287)$$

式 (287) は x 軸回りの回転 $\rightarrow y$ 軸回りの回転 $\rightarrow z$ 軸回りの回転の順番でとっているため, xyz オイラー角 (または単にオイラー角) と呼ばれる。ロボットの関節を設計する場合, その機構での実現の容易さから zyz オイラー角が選択される場合もある。図 43 左は xyz オイラー角で関節を実現した例であり, 右は zyz オイラー角で実現した例である。さて, 式 (287) は 3×3 の行列であるのでパラメータ

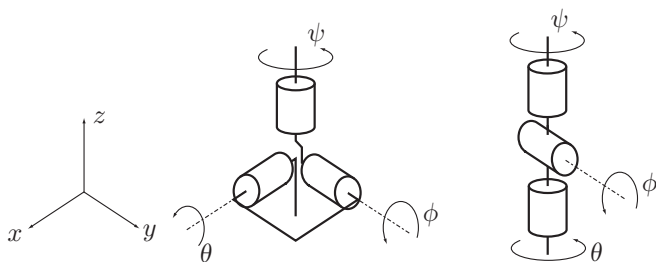


図 43: ロボットの関節での実現

は9個ある。しかし, 各列ベクトルの直交性, 各行ベクトルの直交性の6つの拘束条件があり, 実際は3つの自由度しかない。これは θ, ϕ, ψ の数と一致している。そこで座標変換をもっと少ない数のパラメータで表そう。

D.2 クォータニオン

図 44 に表されるように, 任意の座標変換はあるベクトル

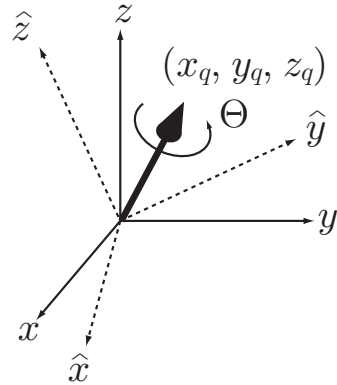


図 44: 座標変換の表現方法

$$r = \begin{bmatrix} x_q \\ y_q \\ z_q \end{bmatrix} \quad (288)$$

の回りの θ 回転によって表すことができる。ここでパラメータは4つあるが, $\|r\| = 1$ の条件を入れることで自由度は3である。座標変換を4つのパラメータで表すと表現しやすいことが多くある。これを四元数 (クォータニオン) と呼ぶ。実際にはクォータニオンは複素数の拡張系で

$$\begin{cases} i^2 = j^2 = k^2 = -1 \\ ij = -ji = k \\ jk = -kj = i \\ ki = -ik = j \\ ijk = jki = kji = -1 \end{cases} \quad (289)$$

を満たす i, j, k を用いて表すものであるが, ここではこれを座標変換へと応用したものであると理解して欲しい。座標変換を次の4つの数字で表す。

$$q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ x_q \sin \frac{\theta}{2} \\ y_q \sin \frac{\theta}{2} \\ z_q \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} = q_1 + q_2 i + q_3 j + q_4 k \quad (290)$$

これは $\|q\| = 1$ を満たす。式 (287) とクォータニオンは1対1対応なので, その関係は

$$R(\theta, \phi, \psi) = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} \quad (291)$$

として,

$$\begin{cases} r_{11} = q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 - q_4^2 \\ r_{12} = 2(q_2q_3 - q_4q_1) \\ r_{13} = 2(q_4q_2 + q_3q_1) \\ r_{21} = 2(q_2q_3 + q_4q_1) \\ r_{22} = q_1^2 + q_3^2 - q_4^2 - q_2^2 \\ r_{23} = 2(q_3q_4 - q_2q_1) \\ r_{31} = 2(q_4q_2 - q_3q_1) \\ r_{32} = 2(q_3q_4 + q_2q_1) \\ r_{33} = q_1^2 + q_4^2 - q_2^2 - q_3^2 \end{cases} \quad (292)$$

となり, 逆に

$$\begin{cases} q_1 = \frac{1}{2}\sqrt{1 + r_{11} + r_{22} + r_{33}} \\ q_2 = \frac{r_{32} - r_{23}}{4q_1} \\ q_3 = \frac{r_{13} - r_{31}}{4q_1} \\ q_4 = \frac{r_{21} - r_{12}}{4q_1} \end{cases} \quad (293)$$

となる. また, 2回座標変換を施すことすなわち,

$$R = R^a R^b \quad (294)$$

はクォータニオン

$$q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (295)$$

を用いて

$$q = q^a q^b = \begin{bmatrix} s_a s_b - \mathbf{v}_a \mathbf{v}_b^T \\ s_a \mathbf{v}_b + s_b \mathbf{v}_a + \mathbf{v}_a \times \mathbf{v}_b \end{bmatrix} \quad (296)$$

と表される.

クォータニオンを使うと, ジャイロセンサを用いた姿勢計測が容易になる. ジャイロセンサは図 45 のように瞬間の x, y, z 軸回りの角速度 $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ を出力する. そのため, 単に角速度を積分しても姿勢変換行列は求められない. 一方, クォータニオンの微分は

$$\dot{q} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\mathbf{v}^T \boldsymbol{\omega} \\ s\boldsymbol{\omega} + \mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega} \end{bmatrix} \quad (297)$$

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{bmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{bmatrix} \quad (298)$$

で表されるので, ジャイロセンサから得られた角速度ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ を用いて式 (297) を積分することで座標変換のためのクォータニオンが得られる. これにより, 角速度から姿勢を計測することが可能となる.

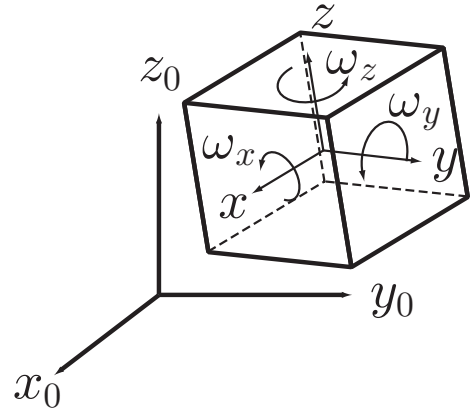


図 45: ジャイロセンサ