

中級経済数学 1 講義ノート

多鹿 智哉*

0. 講義について

0.1. 概要

動学システムについて学習する。マクロ経済学や確率論への応用を学ぶ。厳密さよりは直観と豊富なトピックに触れることを目的とする。講義ノートではできるだけ「一般的」¹にかつ抽象的に書いているが、講義内では具体例と簡単なケースに絞って解説する。

0.2. 講義計画

- | | |
|---------------------|-------------------|
| 1. オリエンテーション, 数列と極限 | 9. 多変数の動学システム |
| 2. 動学システム, 不動点と安定性 | 10. 行列の復習 1 |
| 3. 動学最適化問題 | 11. 行列の復習 2 |
| 4. 動的計画法の実践 | 12. 行列の復習 3 |
| 5. 最適停止問題 1 | 13. 固有値分解 1 |
| 6. 最適停止問題 2 | 14. 固有値分解 2 |
| 7. 動的計画法の最適性 1 | 15. ペロン・フロベニウスの定理 |
| 8. 動的計画法の最適性 2 | |

0.3. その他情報

評価基準	講義スタイル	時間・場所
課題：9 点 × 9 回 平常点：20 点	対面	前期水曜 4 限本館 40 番教室

課題は受講者自身の回答について口頭で説明できることを前提とし、適宜理解の確認を行う。試験は口頭で行う。なお、本講義ノートの空白部はメモ用スペースである。

* 日本大学 経済学部, tajika.tomoya@nihon-u.ac.jp

¹ 数学でいう一般的とは具体的な数字でなりたつケースを考えるのではなく、一般の n など具体例によらないケースを考えること。

0.4. 参考書

※読めとは言っていない

- 二階堂 副包 (1960) 「現代経済学の数学的方法」岩波書店.
- 藤山 秀樹 (2024) 「ゲーム理論からの社会ネットワーク分析」オーム社
- Yun Cheng , Timothy Carson , Mohamed B. M. Elgindi (2012) “A Note on the Proof of the Perron-Frobenius Theorem,” *Applied Mathematics*, 3. 1697–1701.
- Mike X. Cohen (2021) *Linear Algebra: Theory, Intuition, Code*, Sincxpress Education.
- Morris W. Hirsch, Stephen Smale, Robert L. Devaney (2013) *Differential Equation, Dynamical Systems, and Introduction to Chaos, 3rd edition*, Elsevier, (桐木 紳・三波 篤郎・谷川 清隆・辻井 正人 訳「力学系入門—微分方程式からカオスまで—」共立出版)
- Efe A. Ok (2007) *Real Analysis with Economic Applications*, Princeton.
- Thomas J. Sargent and John Stachurski (2024) *Economic Networks: Theory and Computation*.
- Rakesh Vohra (2004) *Advanced Mathematical Economics*, Routledge.

0.5. 数学に関するソフトウェア

具体的な計算には PC を使用する.

- Wolfram Alpha
 - ▶ web アプリとして使用可能な数式処理ソフトウェア
 - ▶ より高度なことがやりたい → Wolfram Cloud or Mathematica
- Matlab
 - ▶ 数値計算 (具体的な数値などを代入してシミュレーションをしたりする) に用いることが多い.
 - ▶ 数式処理 (シンボリック計算) も可能
 - ▶ 2026 年度は日本大学生なら無料で利用可能 (詳しくは [こちら](#): 日本大学のアカウントでアクセス可能)
- Julia, Python, R などのプログラミング言語
 - ▶ 数値計算で用いることが多い
 - ▶ 数式処理も, SymPy という拡張機能などで可能
 - ▶ Google Colaboratory でも利用可能

1. 動学システム

次のように決まる数列を考える.

$$a_t = f(a_{t-1}) \quad (1)$$

このとき, 列 $(a_t)_t$ と関数 f の組み合わせを**動学システム** (dynamic system) と呼ぶ. 力学系とも言う. f は遷移関数と呼ぶ. $a_t - a_{t-1} = f(a_{t-1})$ と書かれることもあり, この場合は**差分方程式**とも呼ばれる.

以下に動学システムの例を挙げる.

1. **蜘蛛の巣過程モデル**: 次のようなストーリーを考える. ある市場に売り手と買い手がいる. よくはわからないが初日は価格が p_1 だとされた. それを見た売り手は $S(p_1)$ だけ作ることに決めて翌日それだけの商品を市場に持っていった. 二日目には商品の量は $S(p_1)$ しかないのので, 「需要量=供給量」, つまり $D(p_2) = S(p_1)$ となるように価格が決まる.

これを繰り返せば t 日目の価格は $D(p_t) = S(p_{t-1})$ となることがわかる. このように価格が調整されている状態を**蜘蛛の巣過程**と呼ぶ. 需要関数の逆関数を D^{-1} とすれば $p_t = D^{-1}(S(p_{t-1}))$ という形に書け, 動学システムの (1) 式と同じ形をしていることがわかる.

2. **ソロー成長モデル**: ある国の GDP を考えよう. t 年度の GDP は Y_t で表現され, その値は以下のように資本 (K_t) の関数で表現されとしよう.

$$Y_t = A \cdot (K_t)^\alpha \quad (2)$$

資本 K_t は投資によって決まり, その投資の量は sY_t である. s は貯蓄率である, つまりは, 消費者は GDP のうち, $1-s$ の割合を消費し, s の割合だけ貯蓄し, それを投資する. 一方で, $1-d$ の割合だけ資本は減耗するものとする. したがって, 以下の式が満たされるものとする

$$K_t = d \cdot K_{t-1} + s \cdot Y_{t-1}$$

(2) 式から $Y_{t-1} = A \cdot (K_{t-1})^\alpha$ であることがわかるので, 以下のように (1) 式の形に直すことができる.

$$K_t = d \cdot K_{t-1} + s \cdot A \cdot (K_{t-1})^\alpha \quad (3)$$

(2) 式より資本と GDP は一対一の関係にあるので (3) 式を見れば GDP がどう成長していくのかがわかる。この形の経済成長のモデルは**ソロー・モデル**と呼ばれるものの一種である。

3. **ネットワーク外部性のモデル** : ある SNS を考える。 $s \in [0, 1]$ さんは仲間のうち $s \in [0, 1]$ 以上の割合が登録するなら登録したいと思っている。こう言ったサービスは仲間が登録しているから初めて登録の意味が出てくるサービスであり、登録する価値が登録者数に依存する。こう言った特徴を**ネットワーク外部性**と言う。

登録者数の変遷は動学システムと考えられる。これを見るため、 s の値は $[0, 1]$ 上に分布しており、実数 $r \in [0, 1]$ に対して、 $s \leq r$ となる人の割合は $G(r)$ であるとしよう。

今、登録者割合が r_{t-1} だとすると、 $s \leq r_{t-1}$ となるような s さんの数の割合は $G(r_{t-1})$ である。そうすると、次の日の登録者割合は以下の通りである。

$$r_t = G(r_{t-1})$$

これは (1) 式と同じ形をしていることがわかる。

4. **L-system (Lindenmayer system)** :

文字列を次のように変換させるルールを考える。

- F を FF に変換して記述
- X を F[+X]F[-X]+X に変換して記述
- それ以外はそのまま記述

このルールに従って、初期値を X として、7 回変換を行った結果を描画する。ただし、F は前進して線を描く、+ は右に 20 度回転、- は左に 20 度回転、[は位置を記憶し、] は位置を戻す、というルールで描いている。



このようにして複雑な図形を描く一連のシステムを **L-system** と呼ぶ。初期値や変換の仕方によって異なった図形を描くことのできるシステムである。

課題 1.

この講義ノートに出てきたもの以外に動学システムの例をひとつ挙げ、式を立ててみよう。

2. 不動点と安定性

2.1. 不動点

一般に関数 f について、 $f(x) = x$ となる点 x を f の **不動点** と呼ぶ。類似して、動学システム (1) 式について、 $a = f(a)$ となるとき、 a を **定常状態** という。 a_0 は **初期値** と呼ばれる。

定常状態ではそれ以上状態の変遷は起きない。もし一度、 $a_t = a$ となってしまうと、 $a_{t+1} = f(a_t) = f(a) = a$ であるので、 $a_{t+1} = a_t$ となり、そこから動かなくなるからである。そういう意味でも「不動」点と言えよう。

蜘蛛の巣過程モデルの例で見てみよう。この過程を表す式は以下の通りであった。

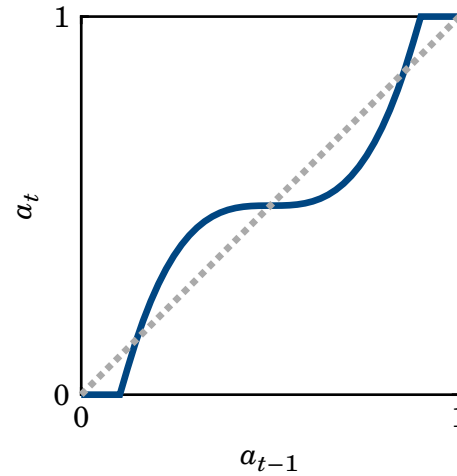
$$p_t = D^{-1}(S(p_{t-1}))$$

定常状態は $p_t = p_{t-1} = p$ を満たす状態と言える。したがって、定常状態では以下の通りである。

$$p = D^{-1}(S(p))$$

この式は、 $D(p) = S(p)$ であり、このことから、蜘蛛の巣過程の定常状態の価格は市場均衡の価格であることがわかる。

不動点は図示することもできる．次のような図を書こう．下図の実線部分が f を表し，点線は $x_t = x_{t-1}$ のグラフである．



実線と点線の部分の交点が関数 f の不動点である．これはなぜなら，交点では以下の二式が満たされているからである．

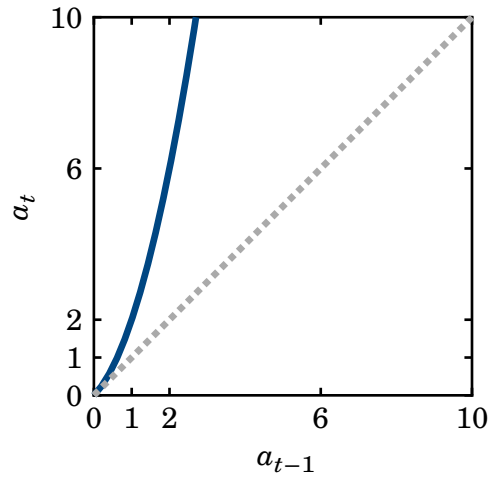
$$a_t = f(a_{t-1})$$

$$a_t = a_{t-1}$$

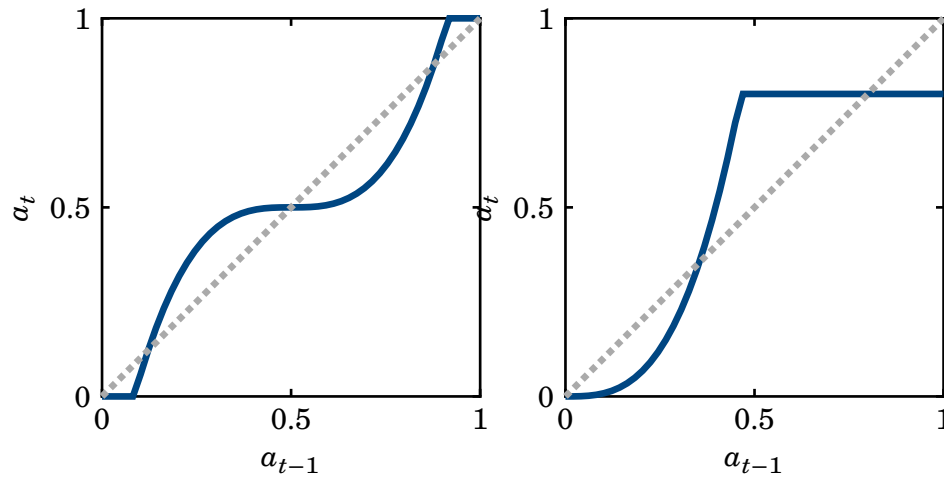
2.2. 不動点の安定性

不動点があったとしても，数列 (a_t) がそこに辿り着くとは限らない．例えば， $f(x) = x^2 + x$ は $x = 0$ が定常状態である．しかし初期値が $a_0 = 1$ であれば，だんだん値が大きくなっていき，最終的には発散する．

このことを下記の図に書き込んで確かめてみよう．まず， $a_0 = 1$ が初期値である．すると， $a_1 = f(1) = 1 + 1 = 2$ となる．順々に計算していけば $a_2 = f(2) = 6$ ，... となってどんどん大きくなる．



一方で、次の左図で、 $a_0 = 0.6$ ぐらいであればどうだろうか？これは次第に真ん中に寄っていくはずである。右の図ならどうだろうか？



初期値が不動点 a に十分に近ければ $a_t \rightarrow a$ となるとき、不動点 a は**局所安定**であるという。特に、初期値がどこであっても $a_t \rightarrow a$ となれば**大域安定**であるという。局所安定でないときにはその不動点は**不安定**であるという。

不動点が局所安定であるためには $|a_t - a_{t-1}|$ がだんだん小さくなっていく必要がある。ということは $a_{t+1} = f(a_t), a_t = f(a_{t-1})$ であるから、局所安定であるときには

A large area for taking notes, consisting of a solid blue horizontal line at the top, followed by a series of horizontal dotted lines, and a solid blue horizontal line at the bottom.

$$|f(a_t) - f(a_{t-1})| < |a_t - a_{t-1}|$$

が成り立って欲しい。変形すれば

$$\frac{|f(a_t) - f(a_{t-1})|}{|a_t - a_{t-1}|} < 1$$

という式である。これは $a_t \rightarrow a$ となれば $|a_t - a_{t-1}| \rightarrow 0$ となるので、上の不等式の左辺は微分の絶対値、 $|f'(a)|$ である。つまり、 $|f'(a)| < 1$ となることが局所安定となるための必要条件である。これは十分条件であることも実は言えるので、局所安定かどうかを確かめるには不動点において、微分をすることでその絶対値が 1 より小さいかどうかがいればよい。

蜘蛛の巣過程を考えよう。 $f(p) = D^{-1}(S(p))$ と考えられるので、これを微分すれば

$$f'(p) = \frac{S'(p)}{D'(p)}$$

となるので、蜘蛛の巣過程の定常状態が安定である条件は $|S'(p)| < |D'(p)|$ である。

課題 2.

1. ソロー・モデルおよびネットワーク外部性のモデル（ただし、 $G(x) = x^a$ とする）の定常状態を求めてみよう。
2. 1 で求めた定常状態はどのような条件のもとで安定になるだろうか？
3. ソロー・モデルにおける定常状態での消費 $(1-s)Y$ を最大にする貯蓄率 s を計算してみよう（この貯蓄率は黄金律と呼ばれる）。

3. 動学的最適化問題と動的計画法

3.1. 動学的最適化問題

時間を通じた最適化問題、いわゆる**動学的最適化問題**を考える。例えば次のような問題を考えてみよう。

資産が A だけあり、毎年それを切り崩して生活している人を考える。 t 年の消費を C_t 、 t 年までに残っている資産を A_t と書くことにする。 t 年の消費は A_t に依存することになるので A_t の関数として $C_t = C(A_t)$ と書ける。 そうすれば次の年の資産 A_{t+1} は次のように書ける。

$A_{t+1} = A_t - C(A_t)$ よって、 $f(A) = A - C(A)$ と考えれば、資産の数列 $(A_t)_t$ がある種の動学システムになることを確認できる。

問題は消費者はどのように資産を切り崩すのがベストかというところで、このようなことを考えるのが動学的最適化問題である。

動学的最適化問題の一例として次のような問題を考える。

$$\begin{aligned} \max_{x_1, x_2, \dots} \quad & u(x_1) + \delta \cdot u(x_2) + \delta^2 \cdot u(x_3) + \dots + \delta^k \cdot u(x_{k+1}) + \dots \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 + \dots = A \end{aligned} \quad (4)$$

つまりは「資産をちょうど使い切るように目的関数を最大化する x_1, x_2, \dots を決めなさい」ということである。ただしすべての i について $0 \leq x_i \leq A$ であるとする。²ここでの δ は割引因子になり、この目的関数は効用の割引現在価値の総和を表していることになる。ただし消費する期間（人生）が無限に続くことに注意せよ³。

3.2. 動的計画法

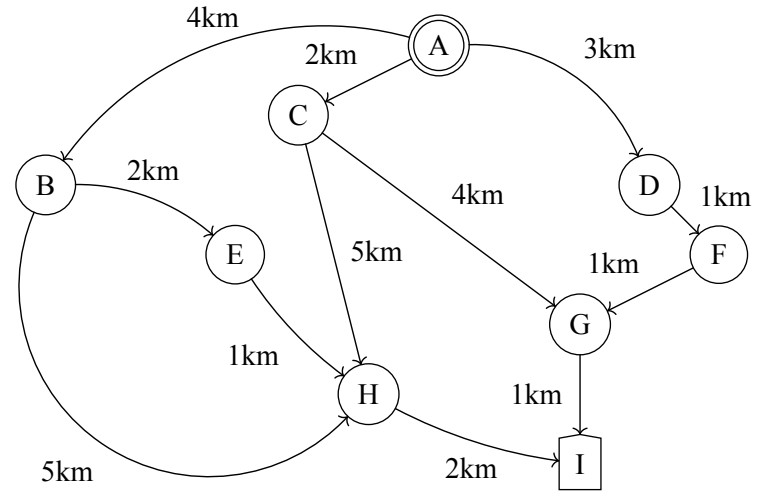
3.2.1. 最短経路問題

動学最適化問題を解くためには動的計画法がよく使われる。その発想を見るため、以下のような問題を考えよう。

²つまりマイナスの消費や資産総額を超える消費はできないとする。

³人生は無限には続かないと思うかもしれないが、これはいつ人生が終わるかわからない（ δ は人生が終わる確率である）ということを表現しているとも言える。

ある都市から別の都市に行くためにはいくつかの道がある. このとき, 最短距離で行くためにはどの道を通ればよいかを考える. この経路は次の図で表される.



このとき, 上の図の A から I に行くにはどの道を通ればいいだろうか?

単純に考えれば最短距離で行くためには, A から B に行くのにかかる距離, A から C に行くのにかかる距離, A から D に行くのにかかる距離を計算し, それぞれの都市に行くのにかかる距離を計算し, 最後にそれらの距離を足し合わせればよい. しかしこれでは計算が大変である.

そこで, 発想を逆転させて, ゴールから辿っていく方法を考える. つまり, まず I から G に行くのにかかる距離, I から H に行くのにかかる距離を計算する. すると,

に行けば良いということだ。このようにして、動的計画法は最短経路問題を解くのに使われる。

動的計画法の発想は次の通りである。まずゴールから逆算するという事。そして、一度ゴールからの距離を計算できた後はそれを考えないことである。実際に、上の方法では距離を計算できたらその地点を消して距離だけを記録していた。このようにして計算を減らすことができるのである。

3.2.2. ベルマン方程式

さて、以上のような発想を用いて動学最適化問題をどう解くかということを考える。消費する期間が無限に続くということ変数が無限にあるのでラグランジュ乗数法は使えない。このとき、役に立つのが**ベルマンの最適性原理**と呼ばれるものである。この考えを説明するために、(4)式の目的関数に注目しよう。もしこの最大化問題の解が $x_1 = x_1^*$ を満たせば(4)式は次のように変形できる。

$$u(x_1^*) + \delta \times \max_{x_2, x_3, \dots} \left[u(x_2) + \delta \cdot u(x_3) + \dots + \delta^{k-1} \cdot u(x_{k+1}) + \dots \right] \quad (5)$$

$$\text{s.t. } x_2 + x_3 + \dots = A - x_1^*$$

ただし第2項目のmax以降はs.t.以下の制約条件を満たす上での $u(x_2) + \delta \cdot u(x_3) + \dots + \delta^{k-1} \cdot u(x_{k+1}) + \dots$ の最大値という意味である。(5)式のように第2項目以降をカッコでくくればこの角カッコの中身は(4)式と同じような問題が繰り返し広げられているということになる。これは x_k が無限に続いていることによる。ただしこの場合は資産がAから第1期の消費額を引いた $A - x_1^*$ になることに注意である。制約も第1期の消費を除いた第2期から始まっている。

さてここで、達成できる効用の最大値が資産Aの関数であると考えれば、そのときの最大値を以下のように $W(A)$ と置くことができる。

$$W(A) = \max_{x_1, x_2, \dots} u(x_1) + \delta \cdot u(x_2) + \delta^2 \cdot u(x_3) + \dots + \delta^k \cdot u(x_{k+1}) + \dots$$

$$\text{s.t. } x_1 + x_2 + \dots = A$$

そうすると、第 2 項目以降が資産が $A - x_1^*$ である以外は (4) 式と同じ問題になるということより、以下の等式が言える⁴。

$$W(A - x_1) = \max_{x_2, x_3, \dots} \left[u(x_2) + \delta \cdot u(x_3) + \dots + \delta^{k-1} \cdot u(x_{k+1}) + \dots \right]$$

$$\text{s.t. } x_2 + x_3 + \dots = A - x_1$$

したがって、第 2 項目以降を δ でくくれば、以下のように (5) 式を変形できることになる。

$$W(A) = \max_{x_1} [u(x_1) + \delta \times W(A - x_1)] \quad (6)$$

(4) 式の最大化問題をこのような形に変形できることを**ベルマンの最適性原理**と呼び、(6) 式を**ベルマン方程式**と呼ぶ。またここで出てくる W は**価値関数**と呼ばれる。ベルマン方程式を使った最適化問題の解法を**ダイナミック・プログラミング (動的計画法)** と呼ぶ。

これが最初に見た最短経路問題とどのような関係があるか見ていこう。ここで考えるゴールとは無限先の地点である。この場合では、資本の量 A がその地点である。そして、地点 A から地点 $A - x_1$ に行く「距離」が $u(x_1)$ であると考えることができる。 $W(A - x_1)$ は地点 $A - x_1$ からゴール地点に行く最短距離である。このようにして、最短経路問題と動的計画法の関係がわかる。ただし、最短経路問題では距離をなるべく小さくしたいので「最短」であったが、この場合は効用を「最大」にしたいので最短距離は最大化された効用に対応することに注意である。

ベルマン方程式の特徴は関数の定義の中にその関数自身が含まれていることである。こういったものは**再帰的**であると言う。このような考え方によって動学システムにおける問題を比較的簡単に扱うことができるようになる。

3.3. 最適貯蓄問題

ベルマンの最適性原理をどのように使うかを例を使って説明する。 $u(x) = \ln(x)$ とします。すると、ベルマン方程式によれば以下の通りになる。

⁴ここで考える期間が無限であるということが効いている。

$$W(A) = \max_x [\ln(x) + \delta \cdot W(A - x)]$$

ただし、 W の中に A, x の両方が入っているのが面倒なので $A - x = y$ と置き換え、問題を次のように置き換える。これは y を貯蓄額と考えれば自然なことである。

$$W(A) = \max_y [\ln(A - y) + \delta \cdot W(y)] \quad (7)$$

右辺は単なる最大化問題として考えれば良いので、微分を使って考える。つまり以下の等式が一階条件になる⁵。

$$\frac{1}{A - y} = \delta \cdot W'(y) \quad (8)$$

と言っても W がどんな関数かわからないのでこれだけでは解けない。そこで、 W を適当に予想してみ、そしてそれがベルマン方程式を満たすかどうかを確認するという方法を考える。この手法を**推測と確認** (guess and verify) と呼ぶ。例えば $W(y) = \beta \ln(\alpha y)$ と推測する。すると (8) 式より一回の条件は以下のとおりになる。

$$\frac{1}{A - y} = \delta \beta \frac{1}{y} \quad (9)$$

(9) 式の解を y^* とすれば $y^* = \frac{\delta \beta}{1 + \delta \beta} A$ と計算できる。これをベルマン方程式に代入すれば以下の等式が成立することになる。

$$W(A) = \ln(A - y^*) + \delta \cdot W(y^*)$$

$$\beta \ln(\alpha A) = \ln\left(\frac{1}{1 + \delta \beta} A\right) + \delta \beta \ln\left(\alpha A \frac{\delta}{1 + \delta \beta}\right)$$

$$\beta \ln(A) + \dots = (\delta \beta + 1) \cdot \ln(A) + \dots$$

この式がどんな A についても成り立たなくてはいけないので、両辺の $\ln A$ の係数が一致するように β の値を求める。つまり $\beta = \delta \beta + 1$ 、変形

⁵本当は W が凹関数かどうかを考えなければいけないが、この講義ではそこは良いものとする。

すると $\beta = \frac{1}{1-\delta}$ とならなければいけない。これによって、推測の式 $W(y) = \beta \ln(\alpha y)$ に求めた α, β を代入して $W(A) = \frac{1}{1-\delta} \ln\left(A \cdot (1-\delta) \cdot \delta^{\frac{\delta}{1+\delta}}\right)$ が得られる。実際これはベルマン方程式を満たし、 $W(A)$ が資産が A のときの効用の最大値であることがわかる。

そして、このベルマン方程式によって定義される最大化問題 $\max_y \ln(A - y) + \delta W(y)$ の解が最適な貯蓄額 y となる。つまり、 $\beta = \frac{1}{1-\delta}$ であることを使えば最適な貯蓄額は $y = \delta A$ と計算でき、これによって資産が A のときの最適な消費量は $x = (1 - \delta)A$ となる。

ところでどこからこのような推測が出てくるのかと疑問に思うかもしれない。これは次のようにして考える。まず適当な関数、 $W_0(A) = 0$ を取ってきて、 $W(y) = W_0(y)$ だと思って最適化問題 (7) 式を解く。そうすると $\ln(A - y) + 0$ を最大化することになり、そのときの最大化解は $y = 0$ で最大値は

$$\ln(A - 0) = \ln(A)$$

である。したがって、 $W_1(A) = \ln A$ とおいて、それを $W(y) = W_1(y)$ として同じように (7) 式を解く。そうすると、そのときの最大値はある実数 α, β について、 $\beta \ln(\alpha A)$ といった形になっている。これを「推測」として使用する。なぜこの方法でうまくいくかは Section 5 で議論することになる。

課題 3.

$u(x) = x^{\frac{1}{2}}$ のとき、(4) 式の最大化問題を解いてみよう。

4. 最適停止問題

この章では最適停止問題と呼ばれる問題を導入し、ダイナミックプログラミングの手法を用いて分析する。確率が入ってくるが、初歩的な範囲では大して影響はない。最適停止問題とは、大雑把に言えば、読んで字の如く「いつやめるべきか」を考える問題である。

最適停止問題の具体例として次の問題を考えてみよう。

1. **職探し (サーチ問題)**: 職探しをしている A さんがいる. 毎日 1 件のオファーがあり, 一度断るとそこには就職できない. オファーは賃金だけが異なり, それは w_t と書かれる. これは $w_t \in [0, 1]$ の確率変数で, $[0, 1]$ 上を一様に分布しているとする. どれほどのオファーが出たら職探しをやめるべきだろうか?
2. **バンディット問題**: スロットマシンがある. スロットマシンを動かすには 100 円が必要で, あたりが出たら 1000 円の賞金が出る. スロットマシンが壊れていなければあたりは出ない. 一方でスロットマシンが壊れていたら確率 q であたりが出て, $1000q > 100$ らしい. 壊れている確率は p らしい. さて, 何回チャレンジしたら諦めるべきだろうか?

4.1. サーチ問題

サーチの最適停止問題を考えてみよう. まず, w だけの賃金を提案されたときの「価値」を考える. これは次のように計算できる.

$$V(w) = \max \left\{ w, \delta \int_0^1 V(w') dw' \right\}$$

これは, もしオファーを受けることを決断すれば w だけの賃金が得られ, 逆に断れば職探しをやり直すからである. 今すぐ職探しをやめて w だけの賃金を得るか, 1 日待って, 別のオファーが来るのを待つか, そのどちらか良い方を選ぶのである. 待つと割引因子 δ がかかることに注意である. これは待つことのコストを意味している. また, そのときは w' だけの賃金をオファーされるので, そのことの価値の期待値を考えている.

今, その基準を \bar{w} とする. つまり $w < \bar{w}$ なら職探しを続け, そうでないなら職探しをやめる. すると, 以下の等式が成り立つ.

$$V(w) = \begin{cases} w & \text{if } w > \bar{w} \\ \delta \int_0^1 V(w') dw' & \text{if } w \leq \bar{w} \end{cases} \quad (10)$$

ここから, 以下の等式が言える.

$$\delta \int_0^1 V(w') dw' = \bar{w} \quad (11)$$

さて, (10) 式より,

$$\begin{aligned} \int_0^1 V(w') dw' &= \int_0^{\bar{w}} \bar{w} dw' + \int_{\bar{w}}^1 w' dw' \\ &= \bar{w}^2 + \frac{1}{2}(1 - \bar{w}^2) = \frac{1}{2} + \bar{w}^2 \end{aligned}$$

であるので, (11) 式に代入すれば

$$\bar{w} = \frac{\delta}{2} \cdot (1 + \bar{w}^2)$$

と言う式が成立する. この二次方程式を解けば職探しをやめる基準の賃金を求めることができる.

4.2. バンディット問題

スロットマシンがある. スロットマシンを動かすには 100 円が必要で, あたりが出たら 1000 円の賞金が出る. スロットマシンが壊れていなければあたりは出ない. 一方でスロットマシンが壊れていたら確率 q であたりが出て, $1000q > 100$ らしい. 壊れている確率は p らしい. さて, 何回チャレンジしたら諦めるべきだろうか?

まずすぐわかることは, あたりが出た時点でそのスロットマシンは故障していることがわかる. 一方でハズレが出る限りでは故障しているかどうかはわからない. また, チャレンジしなければスロットマシンについての情報は得られない. いま, t 回チャレンジし, ハズレが出た時点で故障している確率を p_t とする. $p_0 = p$ である.

条件付き確率の計算式から, p_t は次のように推移する

$$p_t = \frac{(1-q) \cdot p_{t-1}}{(1-q) \cdot p_{t-1} + (1-p_{t-1})}$$

$$p_t - p_{t-1} = -\frac{q(1-p_{t-1})p_{t-1}}{1-p_{t-1}q}$$

また、 t 回ハズレが出た時点での価値を V_t 、あたりが出たときの価値を V^* とする。これは割引因子を δ とすると、

$$\sum_{i=0}^{\infty} \delta^i (1000q - 100) = \frac{1}{1 - \delta} (1000q - 100)$$

となる。これらを用いればベルマン方程式は次のように書ける。

$$V_t = \max\{p_t V^* + (1 - p_t) \delta V_{t+1} - 100, 0\}$$

ここで、 T 回ハズレが出たらチャレンジをやめるとしよう。そうすると、

$$p_{T+1} V^* - 100 < 0$$

となっているはずである。ここから、これを満たすような最小の T を求めればチャレンジをやめるべき時点を求めることができる。そして、これより $V_{T+1} = 0$ がわかるので、 $V_T = p_T V^* - 100$ となり、あとは順々に計算していけば V_t を計算することができる。

課題 4.

1. 現実の問題で最適停止問題と考えられるものにはどのようなものがあるだろうか？一つ例を挙げ、(1) 何が時間とともに変化し、(2) 何を決めるのか答えなさい。
2. サーチ問題で、オファーされた賃金をキープしたまま職探しを続けることができた場合、職探しをやめる基準はどのように変化するだろうか？計算しなさい。

5. 動的計画法の最適性

5.1. ベルマンの最適性原理

動学的最適化問題を次のように一般化して書こう。

$$\begin{aligned} \max_{(x_t)} & \left[u(x_0, x_1) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t, x_{t+1}) \right] \\ \text{s.t.} & \quad x_{t+1} \in G(x_t) \end{aligned}$$

ここで、 G は制約条件である。例えば、 x_t を t 期の資産だとすると $G(x_t) = [0, x_t]$ となる。この場合、 t 期の消費は $x_{t+1} - x_t$ である。

ここで、以下のように価値関数を定義する。

$$V(x) = \max_{(x_t)} \left[u(x_0, x_1) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t, x_{t+1}) \right]$$

$$\text{s.t. } x_{t+1} \in G(x_t)$$

$$x_0 = x$$

このとき、もし (x_t^*) が以下の等式を満たすとすると、

$$V(x) = \left[u(x_0, x_1^*) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t^*, x_{t+1}^*) \right]$$

$$\text{s.t. } x_{t+1}^* \in G(x_t^*)$$

そうすると、以下の等式が成り立つ。

$$V(x_0) = u(x_0, x_1^*) + \delta \cdot V(x_1^*)$$

$$V(x_t^*) = u(x_t^*, x_{t+1}^*) + \delta \cdot V(x_{t+1}^*)$$

これを示そう。 (x_t^*) は最大値を与えるので、 $x_1^* = x_1$ かつ $x_{t+1} \in G(x_t)$ をみたすすべての (x_t) について、

$$u(x_0, x_1^*) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t^*, x_{t+1}^*) \geq u(x_0, x_1^*) + \delta \cdot u(x_1^*, x_2) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^{t+1} u(x_{t+1}, x_{t+2})$$

$$\delta \cdot u(x_1^*, x_2^*) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^{t+1} u(x_t^*, x_{t+1}^*) \geq \delta \cdot u(x_1^*, x_2) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^{t+1} u(x_{t+1}, x_{t+2})$$

$$u(x_1^*, x_2^*) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t^*, x_{t+1}^*) \geq u(x_1^*, x_2) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_{t+1}, x_{t+2})$$

となる。これより、左辺が $V(x_1^*)$ であることがわかるので、 $V(x_0) = u(x_0, x_1^*) + \delta \cdot V(x_1^*)$ であることがわかる。

つぎに、ベルマン方程式、 $W(x) = \max_{y \in G(x)} \{u(x, y) + \delta W(y)\}$ の解、 W が V に等しいことを示そう。

まず、最適性を用いて W を次のように展開していく。

$$\begin{aligned} W(x) &\geq u(x, x_1) + \delta W(x_1) \\ &\geq u(x, x_1) + \delta u(x_1, x_2) + \delta^2 W(x_2) \\ &\geq \left[u(x, x_1) + \sum_{i=1}^n u(x_i, x_{i+1}) \right] + \delta^{n+1} W(x_{n+1}) \end{aligned}$$

そうすると、 $\delta \in (0, 1)$ ならば $\lim_{n \rightarrow \infty} \delta^{n+1} W(x_{n+1}) = 0$ となるので、 $W(x) \geq u(x, x_1) + \sum_{t=1}^{\infty} \delta^t u(x_t, x_{t+1})$ であることが $x_0 = x$ を満たすどんな (x_t) についても成立することがわかる。これは $W(x)$ が最大値を与えていることを意味するので、 $W(x) = V(x)$ であることがわかる。

5.2. 関数方程式の解の存在とバナッハの不動点定理

ベルマン方程式は関数方程式である。つまり、解が「関数」になっている方程式のことである。このような方程式の解が存在するかどうかは一つの重要な問題である。この節ではベルマン方程式に解が存在することを示そう。

そのために、以下を準備する。まず、入力に関数、出力も関数とするような関数を考える。これは**汎関数**と呼ばれる。汎関数の値を $\Phi[f]$ などと書くことにする。 $\Phi[f]$ 自身が関数である。例えばベルマン方程式の右辺は汎関数である。積分も汎関数の例である。汎関数の値自身が関数であるので、その関数の入力が x のときの値を $\Phi[f](x)$ と書くことにする。

つぎに、関数同士の距離を考えよう。これには色々な種類がある。例えばもし関数 f, g が積分できるならば

$$\int |f(x) - g(x)| dx$$

は一種の距離のような性質を満たす。これは L^1 距離という⁶。また、

⁶距離というためには距離が0になるものは同じものだけという条件がある。言い換えれば、 $x \neq y$ なら x と y の距離は0でなく正であって欲しいのである。 L^1 距離は実際には擬距離というものに分類される。これは $f \neq g$ でも $\int |f(x) - g(x)| dx = 0$ のケースがあるからである。例えば $x \neq 1$ なら $f(x) = g(x)$ だが $x = 1$ なら $f(x) = g(x) + 1$ となるようなふたつの関数 f, g だと L^1 距離はゼロであるが $f \neq g$ である。

$\max_x (f(x) - g(x))$ という距離も考えられる。これは最大値距離、あるいは L^∞ 距離という。

ここでは関数間の距離を $d(f, g)$ と書くことにする。距離であればなんでも良いのでこう言った書き方をする。

さて、ある汎関数 Φ が**縮小写像**であるとは、実数 $\rho \in (0, 1)$ について、次の不等式を満たすことをいう。

$$d(\Phi[f], \Phi[g]) < \rho \cdot d(f, g)$$

縮小写像には一般に次の結果が成り立つ。

定理 1 (バナッハの不動点定理). Φ を縮小写像とすると、 $\Phi[f] = f$ となる f がただ一つ存在する。

これを見るため、 $f_n = \Phi[f_{n-1}]$ という関数の列を作る。こうすると、縮小写像の性質から次の不等式が成り立つ。

$$\begin{aligned} d(f_n, f_{n-1}) &= d(\Phi[f_{n-1}], \Phi[f_{n-2}]) \\ &\leq \delta d(f_{n-1}, f_{n-2}) \\ &\dots \leq \delta^{n-1} d(f_1, f_0) \end{aligned}$$

そうすると、 f_n と f_{n-1} の差は縮まり、 $n \rightarrow \infty$ となればこの列は収束する。⁷ 収束先では $f_n = \Phi[f_{n-1}]$ が成立するのでそれは**不動点**だというわけだ。

また、この不動点は一つしかない。もし不動点が f と g の二つあれば、 $d(f, g) > 0$ となるわけであり、さらに $f = \Phi[f], g = \Phi[g]$ となる。しかし

$$d(f, g) = d(\Phi[f], \Phi[g]) \leq \delta d(f, g)$$

となってしまう、 $\delta < 1$ なので矛盾が発生する。

⁷実際には、 f_n と f_{n-1} の差が 0 に収束したとしても収束先がちゃんと目標の関数となっているとは限らない。このようなことがうまくいくためには完備空間というものを考える必要があるがここではそう言ったことはうまくいくものとしてしよう。

不動点が一つしかなく、また不動点の作り方からこうして作った列は初期値がどこであっても不動点に収束することがわかる。

それでは、このバナッハの不動点定理を使ってベルマン関数の解の存在を示そう。

まず、次の性質を満たす汎関数が縮小写像であることを示す。距離は最大値距離を考えよう。

$$\Phi[f + \alpha] \leq \Phi[f] + \delta\alpha$$

$$\Phi[f] \geq \Phi[g] \text{ if } f \geq g$$

ここで α は常に定数 α を出力する関数であり、 $\alpha > 0$ としている。また、 $\delta \in (0, 1)$ である。ただし、関数 f, g について、 $f \geq g$ は $f(x) \geq g(x)$ がすべての x について成立することをいう。

これを確かめるために適当な関数 f, g をとる。まず、 $d(f, g) = \max_x |f(x) - g(x)|$ であることから

$$f(x) \leq g(x) + d(f, g)$$

であるので、 $\alpha = d(f, g)$ とおけば $f \leq g + \alpha$ 。すると、以下の不等式が成立する。

$$\Phi[f] \leq \Phi(g + d(f, g)) \leq \Phi[g] + \delta \cdot d(f, g)$$

そうすれば

$$\Phi[f] - \Phi[g] \leq \delta \cdot d(f, g)$$

となる。同様に $\Phi[g] - \Phi[f] \leq \delta \cdot d(f, g)$ も示すことができるので、 Φ は縮小写像であることがわかる。

さて、ベルマン方程式の右辺を Φ と置こう。すると以下の通りである。

$$\Phi[W](x) = \max_{y \in G(x)} \{u(x, y) + \delta \cdot W(y)\}$$

すると、 $\Phi[W]$ は W の値が増えれば増え、さらに正の定数 α について次の等式が成り立つ。

$$\begin{aligned}\Phi[W + \alpha](x) &= \max_{y \in G(x)} \{u(x, y) + \delta \cdot (W(y) + \alpha)\} \\ &= \max_{y \in G(x)} \{u(x, y) + \delta \cdot (W(y))\} + \delta\alpha \\ &= \Phi[W] + \delta\alpha\end{aligned}$$

よって Φ が縮小写像であることがわかり、さらにベルマン方程式は $W = \Phi(W)$ であるので、その解が一意に存在することがわかる。

さらに言えば、 W_0 を適当な関数として、 $W_{t+1} = \Phi[W_t]$ を計算していくことで、バナッハの不動点定理の証明のように (W_t) が不動点、つまりベルマン方程式の解に収束することを保証する。実際にコンピューターによってベルマン方程式の解を見つけるときはこのようにして計算する。この方法は **価値反復法** (value iteration) と呼ばれる。

課題 5.

次のいずれかのひとつの問いに答えなさい。

1. 価値反復法を使って、次のベルマン方程式の解を数値的に求めなさい。

$$W(x) = \max_{y \in [0,1]} \{x(1-y) + 0.9 \times W(y)\}$$

ただし、 $x \in [0, 1]$ である。

2. $|\lambda|$ が十分小さいとき、次の関数方程式 (線形ヴォルテラ積分方程式) に解が存在することを示しなさい。

$$f(x) = h(x) + \lambda \int_0^x \varphi(x, t) f(t) dt.$$

ただし、 $\varphi(x, t)$ の定義域は $0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq 1$ であり、 $\max_{x,t} |\varphi(x, t)| < M$ となる実数 $M < \infty$ が存在するとする。

6. 多変数の動学システム

今までは一変数の動学システムを扱った。この章からは多変数の動学システムを扱う。

6.1. 例

1. (決定論的) **IS-LM モデル**. y を GDP, π をインフレ率, i を利子率とする. このとき, IS-LM モデルではこれらに次の関係がある.

$$y_{t+1} = \rho \cdot y_t - \sigma \cdot (i_t - \pi_{t+1})$$

$$\pi_{t+1} = \gamma \cdot \pi_t + \alpha \cdot y_t$$

$$i_t = q_1 \cdot \pi_t + q_2 \cdot y_t$$

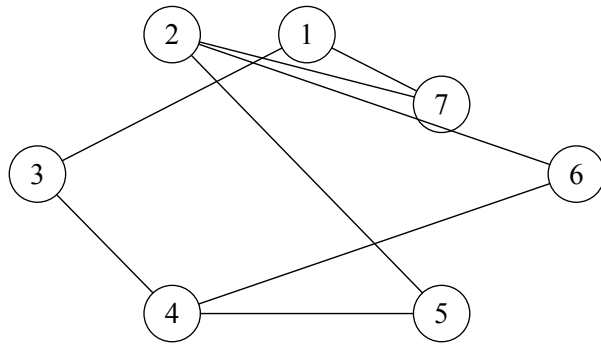
2. **マルコフ連鎖**. 人々は失業・就業・教育の三つのうちいずれかの状態であるとする. 失業している状態から就業する確率は p_1 , 教育を受ける確率は q_1 , 就業している状態から失業する確率は r_2 , 教育を受ける確率は q_2 , 教育を受けている状態から就業する確率は p_3 , 失業状態になる確率は r_3 とする. このとき, 失業割合を R , 就業割合を P , 教育割合を Q とすれば以下のようなになる.

$$R_{t+1} = r_1 R_t + r_2 P_t + r_3 Q_t$$

$$Q_{t+1} = q_1 R_t + q_2 P_t + q_3 Q_t$$

$$P_{t+1} = p_1 R_t + p_2 P_t + p_3 Q_t$$

3. **ネットワーク上の伝播**. n 人からなるネットワークを考える. i と j がつながっているとき, (i, j) 成分が 1 となるような行列 A を考える. この行列によって, 人と人とのつながりが表現されているものとする. ある日, $i = 3, 4, 7$ に z だけのショックが発生し, そのショックの δ の割合だけ, そことつながりがある人々に伝播するとしよう. そうすると, その最初の影響は $x_{ij}^1 = \delta z a_{ij}$ と表現できる. 更にその翌日にはそのショックがさらに別の人々に伝播するとしよう. そうすると, その影響はネットワークを介して広がっていくことになる.



多くの例では、動学システムはベクトルの列 (\vec{x}_t) で、これは行列 A を使って

$$\vec{x}_t = A\vec{x}_{t-1}$$

という形で表すことができる。このような形は遷移関数が行列という線形関数で書けるので線形システムとも言う。

このような線形動学システムでは、 t 期先の状態は $\vec{x}_t = A^t \vec{x}_0$ と表される。したがって、 A^t がどのようなカタチをしているのかを知ることができれば、この動学システム自体がどのような振る舞いをするのかを理解することができる。続く節では A^t がどのようなカタチをしているのかを理解するための道具を導入しよう。

課題 6.

例で挙げた動学システムをそれぞれ行列で表現しなさい。

7. 行列の復習

以下は非常に一般的に書いているが、講義では非常にシンプルなケースに限って同じことを説明する。特殊なケースで理解できたのであれば、一般のケースに挑戦してみよう。

7.1. 線形関数と行列

n 次元ベクトルから m 次元ベクトルへの関数 f を考える. この関数が線形関数であるとは, ベクトル $x, y \in \mathbb{R}^n$ について, 次の条件を満たすことである.

$$f(x + y) = f(x) + f(y)$$

$$f(\lambda x) = \lambda f(x)$$

ただし $\lambda \in \mathbb{R}$ である. ところで, $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ とするとき,

$$\vec{x} = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \cdots + x_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

と書けることに注意しよう. ここで \vec{e}_i を i 番目の成分が 1, それ以外の成分が 0 であるベクトルとおけば

$$\vec{x} = x_1 \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2 + \cdots + x_n \vec{e}_n$$

と書ける. ここで, 関数の線形性を使えば

$$f(\vec{x}) = x_1 f(\vec{e}_1) + x_2 f(\vec{e}_2) + \cdots + x_n f(\vec{e}_n)$$

と書けることになる.

したがって n 個のベクトル, $f(\vec{e}_1), f(\vec{e}_2), \dots, f(\vec{e}_n)$ がわかっているならば関数 f については十分わかったことになる. これらのベクトルを $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ と書く. ただし

$$\vec{a}_i = \begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{mi} \end{bmatrix}$$

である. そうすると, これらのベクトルを横に並べた以下のような表記を考えることができる.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

これを**行列**と呼び、 $f(x) = A\vec{x}$ と書くものとする。その値のベクトルは以下のように計算できる。

$$A\vec{x} = \sum_{i=1}^n x_i a_i = \sum_{i=1}^n x_i \begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{mi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum a_{1i}x_i \\ \vdots \\ \sum a_{mi}x_i \end{bmatrix}$$

こうしてできた行列は縦に m 個、横に n 個の数を並べたものである。こういう場合は $m \times n$ 行列、あるいは m 行 n 列の行列と言う。

行列の、上から数えて縦に i 番目、左から数えて横に j 番目の数を (i,j) 成分と呼ぶ。例えば次の行列の $(2,4)$ 成分は 8 である。

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ a & b & c & d \end{bmatrix}$$

この資料では一般的に、行列 A の (i,j) 成分を a_{ij} か A_{ij} と書く。

以上は行列 A にベクトル x を作用させるケースであったが、今度は行列 X を作用させるケースを考えてみる。これは行列を ℓ 個の縦ベクトル

$$X = [\vec{x}_1 \ \cdots \ \vec{x}_\ell]$$

と考えると、 $A\vec{x}_1, \dots, A\vec{x}_\ell$ を並べたものとする。ただし、 $\vec{x}_i = \begin{bmatrix} x_{1i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{bmatrix}$ である。

つまり

$$\begin{aligned} AX &= [A\vec{x}_1 \ \cdots \ A\vec{x}_\ell] \\ &= \left[\sum_{i=1}^n x_{i1} a_i \ \cdots \ \sum_{i=1}^n x_{i\ell} a_i \right] \\ &= \left[\sum_{i=1}^n x_{i1} \begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{mi} \end{bmatrix} \ \cdots \ \sum_{i=1}^n x_{i\ell} \begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{mi} \end{bmatrix} \right] \end{aligned}$$

となる。

したがって、 AX は $m \times \ell$ 行列になり、その (i,j) 成分は $\sum_{k=1}^n a_{ik}x_{kj}$ となる。

行列の中で最も基本的なものひとつは単位行列と呼ばれるものである。これは $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 1 \end{bmatrix} = [\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n]$ となる行列である。ただし、 $n = m$ としている。 A が $n \times n$ 行列であれば $AI = A$ となる⁸。

7.2. 行列式

$n \times n$ 行列 $A = [\vec{a}_1 \dots \vec{a}_n]$ を考える。以下の性質を満たすものを A の行列式と呼び、 $\det(A)$ で書き表す。

分配法則

$$\det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_i + \vec{b}_i \dots \vec{a}_n]) = \det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_i \dots \vec{a}_n]) + \det([\vec{a}_1 \dots \vec{b}_i \dots \vec{a}_n])$$

スカラー倍法則 $\det([\vec{a}_1 \dots \lambda \vec{a}_i \dots \vec{a}_n]) = \lambda \det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_i \dots \vec{a}_n])$

交代法則 $\det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_i \dots \vec{a}_j \dots \vec{a}_n]) = -\det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_j \dots \vec{a}_i \dots \vec{a}_n])$

一致退化法則 もし $\vec{a}_i = \vec{a}_j$ が相異なる i, j について成り立つならば $\det([\vec{a}_1 \dots \vec{a}_n]) = 0$

基準化 $\det(I) = 1$

では行列式が一般にどのように計算できるかを考えてみよう。まず、 \vec{e}_i を i 番目の成分が 1、それ以外の成分が 0 であるベクトルであることを思い出そう。したがって、 $I = [\vec{e}_1 \dots \vec{e}_n]$ である。また、列ベクトル $\vec{a}_j = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix}$ は次のように書ける。

$$\vec{a}_j = \sum_{i=1}^n \vec{e}_i a_{ij}$$

行列式 $\det(A)$ を分配法則を使って分解することを考えると、以下のような展開が可能である。

⁸ $n \times n$ の単位行列であることを強調するために I_n などと書くこともある。

$$\begin{aligned}
\det(A) &= \det([\vec{a}_1 \ \cdots \ \vec{a}_n]) \\
&= \det\left(\left[\sum_{i=1}^n \vec{e}_i a_{i1} \ \vec{a}_2 \ \cdots \ \vec{a}_n\right]\right) \\
&= \sum_{i=1}^n a_{i1} \det([\vec{e}_i \ \vec{a}_2 \ \cdots \ \vec{a}_n]) \\
&\cdots = \sum_{i_1=1}^n a_{i_1 1} \cdots \sum_{i_n=1}^n a_{i_n n} \det([\vec{e}_{i_1} \ \cdots \ \vec{e}_{i_n}]) \\
&= \sum_{(i_1, \dots, i_n) \in \{1, \dots, n\}^n} \prod_{j=1}^n a_{i_j j} \det([\vec{e}_{i_1} \ \cdots \ \vec{e}_{i_n}])
\end{aligned}$$

ここで、 i_1, \dots, i_n は 1 から n のインデックスのあり得る組み合わせすべてを考える。たとえば $n = 4$ で考えてみると $(i_1, \dots, i_4) = (1, 2, 3, 4)$ や $(2, 3, 3, 2), (3, 2, 1, 4)$ などがありうる。

ただし i_1, \dots, i_n はインデックスが被れば一致退化法則から $\det([\vec{e}_{i_1} \ \cdots \ \vec{e}_{i_n}]) = 0$ となることから、 i_1, \dots, i_n は 1 から n のインデックスの並び替えに限定できる。

σ を並び替えの関数を表すものとしてみよう。例えば $(\sigma(1), \sigma(2), \sigma(3)) = (3, 1, 2)$ と定義できるような関数である。もちろん並び替えの種類によって σ のパターンはいろいろ考えられるので、並び替え関数すべてを集めてきた集合を Σ^* としてみよう。すると、

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in \Sigma^*} \prod_{j=1}^n a_{\sigma(j)j} \det([\vec{e}_{\sigma(1)} \ \cdots \ \vec{e}_{\sigma(n)}])$$

と書くことができる。さらに、 $1, \dots, n$ の並び替え、 σ に対して、偶数回並び替えると $1, \dots, n$ に戻るとき、1 を割り当て、奇数回並び替えれば $1, \dots, n$ に戻るとき、 -1 を割り当てる関数を sgn としてみよう。例えば $(\sigma(1), \sigma(2), \sigma(3)) = (3, 1, 2)$ の場合、 $(3, 1, 2) \Rightarrow (1, 3, 2) \Rightarrow (1, 2, 3)$ と 2 回で $1, 2, 3$ に並び替えられるので、 $\text{sgn}(\sigma) = 1$ である。そうすると交

代法則により, $\det([\vec{e}_{\sigma(1)} \cdots \vec{e}_{\sigma(n)}]) = \text{sgn}(\sigma) \det(I)$ となることがわかる.
 $\det(I) = 1$ であるので以下の事実を確認することができる.

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in \Sigma^*} \text{sgn}(\sigma) \prod_{j=1}^n a_{\sigma(j)j}$$

行列式のこの計算式を行列式の定義として採用することも多い.

さて, 行列式には以下の性質がある.

1. $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ が一次従属であることと $\det([\vec{a}_1 \cdots \vec{a}_n]) = 0$ であることは同値である
2. $\det(AB) = \det(A) \det(B)$

どちらの性質も, 行列式の定義と性質を駆使すればそれを確認することができるので以下でやってみよう.

$\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ がそれぞれ $\vec{0}$ でないとする. このとき, $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ が一次従属であることと $\det([\vec{a}_1 \cdots \vec{a}_n]) = 0$ であることは同値である.

(証明) $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ が一次従属なら $\det([\vec{a}_1 \cdots \vec{a}_n]) = 0$ であることは定義と一致退化法則から簡単に示すことができる.

$\det([\vec{a}_1 \cdots \vec{a}_n]) = 0$ であるとしよう. $n = 2$ のケースは簡単である.
 $a_{11}a_{22} = a_{21}a_{12}$ を意味するので, 以下の式が成り立つ.

$$a_{11} = a_{21} \frac{a_{12}}{a_{22}}$$

したがって,

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} = a_{21} \begin{bmatrix} \frac{a_{12}}{a_{22}} \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{a_{21}}{a_{22}} \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{bmatrix}$$

となるので一次従属であることがわかる⁹. 対偶を取れば, 一次独立なら $\det([\vec{a}_1 \cdots \vec{a}_n]) \neq 0$ ということである.

⁹ $a_{22} \neq 0$ であること前提だが, そうでないケースも同様にできる.

帰納法を用いてこれを拡張しよう。そのため、 $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ を一次独立とする。行列式は同じベクトルを他の列ベクトルに足しても値が変わらない。したがって、 $-\frac{a_{1i}}{a_{11}}\vec{a}_1$ というベクトルを i 列の列ベクトルに足せば

$$\det([\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n]) = \det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} + \frac{a_{1i}}{a_{11}}a_{21} & \dots & \\ \vdots & \ddots & & \end{bmatrix}\right)$$

という感じで、 $2, \dots, n$ 列目の第一行成分だけ 0 になるような行列の行列式と等しいことがわかる¹⁰。そしてこれは

$$\det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} + \frac{a_{1i}}{a_{11}}a_{21} & \dots & \\ \vdots & \ddots & & \\ a_{22} + \frac{a_{1i}}{a_{11}}a_{21} & \dots & & \\ \vdots & \ddots & & \end{bmatrix}\right) = a_{11} \det\left(\begin{bmatrix} a_{22} + \frac{a_{1i}}{a_{11}}a_{21} & \dots & \\ \vdots & \ddots & \end{bmatrix}\right)$$

という行列式に等しい。つまり、2行2列目以降だけが残る形である。この行列の列ベクトルたちは一次独立である。帰納法の仮定より $(n-1) \times (n-1)$ 行列の行列式は 0 ではないので、それに a_{11} をかけたものも 0 ではない¹¹。したがって、 $\det([\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n]) \neq 0$ である。

$$\det(AB) = \det(A) \det(B)$$

(証明) まず行列積の定義から以下の等式を確認する。

$$AB = \left[\sum_{i=1}^n b_{i1}a_i \ \dots \ \sum_{i=1}^n b_{in}a_i \right]$$

行列式の分配法則とスカラー倍法則から以下の等式が成り立つ。

¹⁰これは行列(式)の**基本変形**と呼ばれるテクニックである。

¹¹ $a_{11} \neq 0$ であることが前提であるが、そうでなければ $a_{i1} \neq 0$ となるような i を探して同じことをする。

$$\begin{aligned}
 \det(AB) &= \det\left(\left[\sum_{i=1}^n b_{i1}a_i \ \cdots \ \sum_{i=1}^n b_{in}a_i\right]\right) \\
 &= \sum_{i_1=1}^n b_{i_1 1} \det\left(\left[a_{i_1} \ \cdots \ \sum_{i=1}^n b_{in}a_i\right]\right) \\
 &= \sum_{i_1=1}^n b_{i_1 1} \cdots \sum_{i_n=1}^n b_{i_n n} \det\left(\left[a_{i_1} \ \cdots \ a_{i_n}\right]\right) \\
 &= \sum_{i_1, \dots, i_n} \prod_{j=1}^n b_{i_j j} \det\left(\left[a_{i_1} \ \cdots \ a_{i_n}\right]\right)
 \end{aligned}$$

さらに一致退化法則から，以下の等式が言える．

$$\det(AB) = \sum_{\sigma \in \Sigma^*} \prod_{j=1}^n b_{\sigma(j)j} \det\left(\left[a_{\sigma(1)} \ \cdots \ a_{\sigma(n)}\right]\right)$$

交代法則を用いると以下の式が成り立つ．

$$\begin{aligned}
 \det(AB) &= \sum_{\sigma \in \Sigma^*} \prod_{j=1}^n b_{\sigma(j)j} \operatorname{sgn}(\sigma) \det\left(\left[a_1 \ \cdots \ a_n\right]\right) \\
 &= \det\left(\left[a_1 \ \cdots \ a_n\right]\right) \sum_{\sigma \in \Sigma^*} \prod_{j=1}^n b_{\sigma(j)j} \operatorname{sgn}(\sigma)
 \end{aligned}$$

このとき， $\sum_{\sigma \in \Sigma^*} \prod_{j=1}^n b_{\sigma(j)j} \operatorname{sgn}(\sigma) = \det(B)$ であるので， $\det(AB) = \det(A) \det(B)$ を確認することができた．

7.3. 行列のあれこれ

7.3.1. クラメールの公式

次のような連立方程式を考える．

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$\vdots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$

これは行列とベクトルの掛け算として，以下のように表現できる．

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

このような連立方程式の解は行列式を使って表現することができる。まず、 $A = [\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n]$ として、以下のように書けることに注意する。

$$A\vec{x} = \sum_{i=1}^n \vec{a}_i x_i$$

このとき、1 列目のベクトル \vec{a}_1 の代わりに \vec{b} を代入した行列 $[\vec{b} \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n]$ の行列式を考えてみよう。これは、分配法則、スカラー倍法則、一致退化法則から次のような変形が可能である。

$$\begin{aligned} \det([\vec{b} \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n]) &= \det([A\vec{x} \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n]) \\ &= \det([\sum_{i=1}^n \vec{a}_i x_i \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n]) \\ &= \sum_{i=1}^n x_i \det([\vec{a}_i \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n]) \\ &= x_1 \det([\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n]) \end{aligned}$$

こうすると、 $x_1 = \frac{\det([\vec{b} \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n])}{\det([\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n])}$ ということがわかる。同様に、 x_2, \dots, x_n を求めることができる。これを**クラメールの公式**という。

7.3.2. 転置行列

(i, j) 成分が $b_{ij} = a_{ji}$ と定義されるとき、行列 B は A の**転置行列**という。このとき、記号では A^T と書く。

$A = A^T$ となるとき、 A は**対称行列**であるという。例えばヘッセ行列は対称行列である。

積でできた行列 AB について、その行列の転置 $(AB)^T$ について、

$$(AB)^T = B^T A^T$$

が成り立つ。LIVE-EVIL の法則ともいう。

7.3.3. 逆行列

$AB = I$ となる行列 B のことを A の逆行列という。逆行列は A^{-1} と表記する。そう言われてもどうやって求めるのか、と思うかもしれないが、行列の掛け算の仕組みを思い出せば大したことはない。求めたい逆行列、 A^{-1} を

$[\vec{x}_1 \ \dots \ \vec{x}_n]$ とおいてみよう。まず、逆行列の定義から、

$$AA^{-1} = I$$

$$[\vec{a}_1 \ \dots \ \vec{a}_n][\vec{x}_1 \ \dots \ \vec{x}_n] = [\vec{e}_1 \ \dots \ \vec{e}_n]$$

$$\left[\sum_{i=1}^n \vec{a}_i x_{i1} \ \dots \ \sum_{i=1}^n \vec{a}_i x_{in} \right] = [\vec{e}_1 \ \dots \ \vec{e}_n]$$

となる。つまりは

$$\sum_{i=1}^n \vec{a}_i x_{ij} = \vec{e}_j$$

という連立方程式を n 本解けばいいわけである。これはクラメールの公式を使えば、

$$x_{ij} = \frac{\det(\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_{i-1}, \vec{e}_j, \vec{a}_{i+1}, \dots, \vec{a}_n)}{\det(A)}$$

と計算できるのである。 $\det(A) \neq 0$ であればこういう計算ができるので、逆行列が存在する条件は $\det(A) \neq 0$ と考えることができる。

また、逆行列にも LIVE-EVIL の法則が成り立つ。つまり、 $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ である。これを証明することは、定義を具に追っていけばそこまで難しくない。

課題 7.

以下のうち、3つ以上に答えてください。

1. $AB \neq BA$ となる例を作れ。
2. $AB = 0$ となるような $A, B \neq 0$ の例を作れ
3. $A^{-1}A = I$ を示せ。
4. LIVE-EVIL の法則を示せ。
5. AA^T が対称行列であることを示せ。
6. $\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$ を示せ。
7. $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ が一次従属であれば $\det([\mathbf{a}_1 \ \dots \ \mathbf{a}_n]) = 0$ となることを示せ。
8. 行列式の交代法則が一致退化法則を意味することを確認しなさい。

9. 一致退化法則と分配法則を用いて行列式は同じベクトルを他の列ベクトルに足しても値が変わらないことを示せ。

8. 固有値分解

8.1. 固有値とは

「固有値ってなんですか?」「固有ベクトルを求めるためのものだよ」「なるほど、ところで固有ベクトルとは」「固有値がわかると得られるものだよ」「」

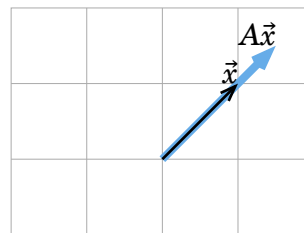
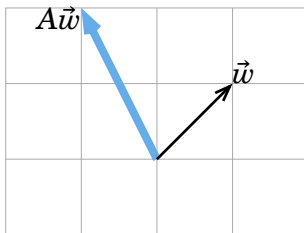
(Cohen, 2021, p.420)

$n \times n$ 行列 A を考えよう。次を満たすベクトル $\vec{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ とスカラー $\lambda \in \mathbb{R}$ を考えたい。

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \quad (12)$$

この式を満たすベクトル x を**固有ベクトル**, λ を**固有値**と呼ぶ。ただし固有ベクトルは 0 でないものとする。

図解で考えよう。行列をベクトルにかけると言うことは、ベクトルを回転・拡大する変形であった。一方で、下記の右図のように、ある方向のベクトルに行列を作用させれば、ちょうどそのベクトルと同じ方向で、その一定倍になるようにできることがある。固有ベクトルとはそのようなベクトルである。



8.2. 固有値・固有ベクトルの見つけ方

(12)式から, 固有値は以下の等式を満たすことになる. ただし, I を単位行列, つまり $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$ であるとする.

$$\begin{aligned} A\vec{x} - \lambda\vec{x} &= 0 \\ \Rightarrow A\vec{x} - \lambda I\vec{x} &= 0 \\ \Rightarrow (A - \lambda I)\vec{x} &= 0 \end{aligned}$$

もし行列 $(A - \lambda I)$ が逆行列を持つと, $\vec{x} = \mathbf{0}$ となってしまう. したがって, $(A - \lambda I)$ が逆行列を持たない必要がある. この条件は $\det(A - \lambda I) = 0$ である.

具体例として, $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ で考えてみよう.

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{bmatrix}$$

であることに注意しよう. $\det(A - \lambda I) = 0$ であることから考える. すると, 行列式を計算すれば

$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - bc = 0$$

となることがわかる. 上の方程式は固有多項式と呼ばれる. この方程式の解を計算した値が固有値である. 例えば, $A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$ であれば固有多項式は

$$\lambda^2 - 4 = 0$$

であるので, 固有値は $\lambda = \pm 2$ となる.

基本的には $n \times n$ 行列には n 個 (重複を含む) の固有値があり, それぞれに固有値がある.

8.3. 固有値分解・対角化

固有多項式を計算することで固有値を得られることで固有ベクトルを計算できる. 固有ベクトルとは $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$ をみたす x である. 具体例として $A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$ で考えよう. 固有値 $\lambda = 2$ のケースで考えると

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \vec{x} &= 2\vec{x} \\ \Rightarrow \begin{bmatrix} 2x_1 + 3x_2 \\ -2x_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

を満たす $\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ がこの固有値に対応する固有ベクトルである。ざっと計算すればわかるが、 $x_2 = 0$ であれば x_1 はなんだって満たすので、例えば $x_1 = 1$ とし、 $\vec{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ としてみよう。

同じように $\lambda = -2$ のケースでは以下の通りである。

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \vec{y} &= -2\vec{y} \\ \Rightarrow \begin{bmatrix} 2y_1 + 3y_2 \\ -2y_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -2y_1 \\ -2y_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

y_2 が 0 だと $y_1 = 0$ になってしまい、 $y = 0$ なので、そうならないようにするためには $y_2 \neq 0$ としなければいけない。しかし 0 以外であれば y_2 はなんだって良いので、 $y_2 = 1$ としてみれば $y_1 = -\frac{3}{4}$ と計算でき、 $\vec{y} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{4} \\ 1 \end{bmatrix}$ はこの固有値に対する固有ベクトルになる。

さてこうして得られた固有値と固有ベクトルを以下のように並べてみよう。

$$\begin{aligned} [A\vec{x} \ A\vec{y}] &= [2\vec{x} \ -2\vec{y}] \\ \Rightarrow A[\vec{x} \ \vec{y}] &= [\vec{x} \ \vec{y}] \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \\ \Rightarrow A &= [\vec{x} \ \vec{y}] \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} [\vec{x} \ \vec{y}]^{-1} \end{aligned}$$

こうすることで、 A という行列を、 PDP^{-1} という形に分解できることになる。ただし、 $P = [\vec{x} \ \vec{y}]$ であり、 D は**対角行列**である¹²。このような形に分解する方法を**対角化**と呼ぶ。

¹²対角成分 ((i, i) 成分のように斜めに並んだ部分) 以外にはすべて 0 が並んでいる行列のこと。

対角化をすることで、行列のべき乗は非常にシンプルな形になる。例えば A^2 を計算したいとき、

$$A^2 = PDP^{-1}PDP^{-1} = PD^2P^{-1}$$

と計算できるのである。対角行列は対角成分以外がすべて 0 であるので D^2 の (i,j) 成分を b_{ij} と書けば

$$b_{ij} = \sum_{k=1}^n d_{ik}d_{kj}$$

となるが、 $i \neq j$ であれば d_{ik} か d_{kj} のどちらか一方は 0 であるので 0、 $i = j$ であれば $i = k = j$ のときのみ $(d_{ii})^2$ 、それ以外は 0 であるので

$$b_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if } i \neq j \\ (d_{ii})^2 & \text{if } i = j \end{cases}$$

という対角行列になる。 $n = 2$ のケースでは、 A の固有値を λ_1, λ_2 とすると、

$$D^2 = \begin{bmatrix} (\lambda_1)^2 & 0 \\ 0 & (\lambda_2)^2 \end{bmatrix}$$

という形になる。したがって、

$$A^2 = P \begin{bmatrix} (\lambda_1)^2 & 0 \\ 0 & (\lambda_2)^2 \end{bmatrix} P^{-1}$$

と計算できることになる。同様に、

$$A^n = P \begin{bmatrix} (\lambda_1)^n & 0 \\ 0 & (\lambda_2)^n \end{bmatrix} P^{-1}$$

とできることがわかるだろう。

ところで、このような対角化ができるためには $P = [\vec{x} \ \vec{y}]$ が逆行列を持つ、言い換えれば $\det(\vec{x}, \vec{y}) \neq 0$ 、さらに言い換えれば固有ベクトル \vec{x}, \vec{y} が一次独立であるように取れる必要がある。結論から言えば、固有値がすべて異なるのであれば必ずこのようにできる。それを以下で詳しく述べていくことにしよう。

8.3.1. 固有多項式が相異なる解を持つとき

まず、固有多項式が相異なる解を持つケースを考えよう。このとき、それに対応する n 個の固有ベクトルは一次独立となる。これを考えるため、まず固有値 λ_i に対する固有ベクトルを x_i と書き、 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ とし、 x_1, x_2 が一次独立、つまり、 $\vec{x}_1 = \mu \vec{x}_2$ となるような実数 μ が見つからないことを証明しよう。

背理法で考えるため、もし $x_1 = \mu x_2$ で書けたとしてみよう。すると

$$\begin{aligned} A\vec{x}_1 &= \lambda_1\vec{x}_1 \\ \Rightarrow A\mu\vec{x}_2 &= \lambda_1\mu\vec{x}_2 \\ \Rightarrow A\vec{x}_2 &= \lambda_1\vec{x}_2 \end{aligned}$$

となる。しかし、 $A\vec{x}_2 = \lambda_2\vec{x}_2$ であるため、 $\lambda_1 = \lambda_2$ となってしまう矛盾である。

したがって $k = 2$ 個のベクトルについて一次独立になることが示された。数学的帰納法を使ってこれを $k = n$ についても成り立つことを示そう。このため、 $k = n - 1$ 個のベクトルが一次独立であるとする。ここで n 個のベクトルが一次独立でない、つまり $x_n = \sum_{j \neq n} \mu_j x_j$ と書けるとしよう。すると、以下のように計算することができる。

$$\begin{aligned} A\vec{x}_n &= \lambda_n\vec{x}_n \\ \Rightarrow A \sum_{j \neq n} \mu_j \vec{x}_j &= \lambda_n \sum_{j \neq n} \mu_j \vec{x}_j \\ \Rightarrow \sum_{j \neq n} (A\vec{x}_j - \lambda_n \vec{x}_j) \mu_j &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{j \neq n} (\lambda_j - \lambda_n) \mu_j \vec{x}_j &= 0 \end{aligned}$$

$\lambda_j \neq \lambda_n$ がすべての $j \neq n$ について成り立つので、上の式は $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{n-1}$ が一次従属であることを意味する。しかしこれは $n - 1$ 個のベクトルが一次独

立であるという帰納法の仮定に矛盾するため、 n 個のベクトルが一次独立であることを示すことができる。

n 個のベクトルが一次独立であることは $\det(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) \neq 0$ であること、つまり $[\vec{x}_1 \ \dots \ \vec{x}_n]$ が逆行列を持つことを意味する。したがって、固有多項式が n 個の相異なる固有値を持つときには対角化が可能になる。

8.3.2. 固有値の性質

固有値分解によって行列 A が対角化できるのであれば以下の性質を容易に示すことができる。

1. A のトレース ($\sum_{i=1}^n a_{ii}$) は固有値の和に等しい、
2. A の行列式の値は固有値の積に等しい。

また、対称行列には次の性質が成り立つ。

定理 2. 対称行列は対角化可能である。

これもラフな証明を与えよう¹³。まず、次の事実を証明する。

対称行列の異なる固有値 (λ, μ) に対する固有ベクトル \vec{u}, \vec{v} について、 $\vec{u}^\top \vec{v} = 0$ となる。

(証明) まず、 $(A\vec{u})^\top = (\lambda\vec{u})^\top$ である。また、 $(A\vec{u})^\top = \vec{u}^\top A^\top = \vec{u}^\top A$ である。よって、

$$\vec{u}^\top A = \lambda \vec{u}^\top$$

となる。一方で、 $A\vec{v} = \mu\vec{v}$ より

$$\vec{u}^\top A\vec{v} = \mu \vec{u}^\top \vec{v}$$

¹³この証明は Robert M. Freund (2014) “Symmetric Matrices and Eigendecomposition”による。

である。したがって、 $\lambda \vec{u}^\top \vec{v} = \mu \vec{u}^\top \vec{v}$ である。 $\lambda \neq \mu$ であるので、 $\vec{u}^\top \vec{v} = 0$ となる。

\vec{u} が固有ベクトルならそのスカラー倍も固有ベクトルなので、 $\|\vec{u}\| = 1$ となるようにとる。すべての固有値ベクトル \vec{u}, \vec{v} について、 $\|\vec{u}\| = 1$ かつ $\vec{u} \neq \vec{v}$ ならば $\vec{u}^\top \vec{v} = 0$ となるとき、固有ベクトルを並べた行列、 Q は**正規直交行列**という。正規直交行列は一次独立になるようにできる。

固有ベクトルが直交性を満たせば n 個の一次独立な固有ベクトルを作ることができる。

(証明) まず、 $n = 1$ なら自明に一次独立である。つぎに k 個の一次独立な固有ベクトルを持ってこれるとしよう。それによって作った行列を U とする。これは $n \times k$ の行列である。したがって、 $AU = [\lambda_1 \vec{u}_1 \dots \lambda_k \vec{u}_k]$ である。次に $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k$ と直交する $n - k$ 個のベクトルからなる行列を V としよう。また、そうすると

$$U^\top V = 0$$

となる。また、

$$V^\top AU = 0$$

である。ここで、 \vec{w} を $V^\top AV$ の固有値で、 μ をその固有ベクトルとする。つまり、

$$V^\top AV \vec{w} = \mu \vec{w}$$

である。このとき、 $\vec{u}_{k+1} = V \vec{w}$ とする。そうすると次の性質が言える。

$$U^\top \vec{u}_{k+1} = U^\top V \vec{w} = 0 \vec{w} = 0$$

また, $\vec{d} = Au_{k+1} - \mu u_{k+1}$ とする. このとき以下のような計算が可能である.

$$\begin{aligned} V^T d &= V^T Au_{k+1} - \mu V^T u_{k+1} \\ &= V^T AV\vec{w} - \mu V^T V\vec{w} \\ &= V^T AV\vec{w} - \mu\vec{w} = 0 \end{aligned}$$

したがって, \vec{d} と V は直交する. これは d は V のベクトルの (線形結合の) 中にはないことを意味する. したがって, $\vec{d} = U\vec{r}$ とかける. これにより,

$$\vec{r} = U^T U\vec{r} = U^T d = U^T AV\vec{w} - \mu U^T V\vec{w} = 0$$

となるので, $\vec{r} = 0$, つまり $\vec{d} = 0$ である. よって,

$$Au_{k+1} = \mu u_{k+1}$$

つまり, u_{k+1} は A の固有ベクトルであり, また U のどのベクトルとも直交するので, 相異なる固有ベクトルであることがわかる. これを続けていけば n 個の相異なる固有ベクトルを得ることができる.

固有ベクトルが異なり, またお互いに直交するので, 一次独立となり, 対角化可能である.

8.4. 動学システムの挙動

それでは以上準備してきた事柄を用いて動学システムの挙動を見る. 考えるのは以下のようなものである.

$$\vec{x}_{t+1} = A\vec{x}_t$$

このような動学システムを線形システムと言う.

8.4.1. 線形システムの収束

線形動学システムは

$$\vec{x}_{t+1} = A^t \vec{x}_1$$

と書き直すことができる。固有値分解ができるのであればこれをさらに

$$\vec{x}_{t+1} = PD^tP^{-1}\vec{x}_1$$

とできる。A が 2×2 だとしてみよう。すると、

$$\vec{x}_{t+1} = P \begin{bmatrix} \lambda_1^t & 0 \\ 0 & \lambda_2^t \end{bmatrix} P^{-1}\vec{x}_1$$

と書くことができる。 $P = [\vec{p}_1 \ \vec{p}_2]$ とおけば以下のようになる。

$$\vec{x}_{t+1} = [\lambda_1^t \vec{p}_1 \ \lambda_2^t \vec{p}_2] P^{-1}\vec{x}_1$$

さらに $P^{-1}\vec{x}_1 = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$ とすれば

$$\vec{x}_{t+1} = \lambda_1^t c_1 \vec{p}_1 + \lambda_2^t c_2 \vec{p}_2$$

と書ける。また初期値は $\vec{x}_1 = c_1 \vec{p}_1 + c_2 \vec{p}_2$ と書ける。

ではこのとき、 $t \rightarrow \infty$ としたらどうだろうか。これは固有値 λ_i の絶対値がどうなるか次第である。もし、固有値が実数で $\lambda_1 > 1 > \lambda_2 > 0$ だとしてみよう。すると、初期値が \vec{p}_2 に平行なベクトルであると 0 に収束し、 \vec{p}_1 に平行なベクトルであると発散することになる。

8.4.2. 非線形動学システムとハートマン=グロブマンの定理

ではより一般的に f が線形関数ではなく、 $\vec{x}_{t+1} = f(\vec{x}_t)$ となる場合であればどうだろうか？ただし、 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ であるとする。つまりは

$$f(\vec{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}) \end{bmatrix}$$

というように n 個の関数のベクトルだと思えば良い。

これを考えるために、まず、 f の不動点 \vec{x}^* を考える。その上でこの関数をテイラー展開すると

$$f(\vec{x}) = f(\vec{x}^*) + J_f(\vec{y})(\vec{x} - \vec{x}^*)$$

と書くことができる。ただし、 J_f はヤコビ行列といい、以下のような偏微分からなる行列である。ただし、 f の第 i 成分による偏微分を $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ と書いている。

$$J_f(\vec{y}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\vec{y}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\vec{y}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\vec{y}) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\vec{y}) \end{bmatrix}$$

いま、不動点の周辺にある点を初期値とする動学を考えよう。すると、

$$f(\vec{x}) \approx f(\vec{x}^*) + J_f(\vec{x}^*)(\vec{x} - \vec{x}^*)$$

となる。ここで、 $\vec{x}_{t+1} = f(\vec{x}_t)$ であり、 $f(\vec{x}^*) = \vec{x}^*$ であることより

$$\vec{x}_{t+1} - \vec{x}^* \approx J_f(\vec{x}^*)(\vec{x}_t - \vec{x}^*)$$

となることがわかる。 $(\vec{x}_t - \vec{x}^*) = \vec{y}_t$ とおけば、

$$\vec{y}_{t+1} \approx J_f(\vec{x}^*)\vec{y}_t$$

と言う線形動学システムとほとんど同じ挙動だと考えることができる。実際それは、(固有値の絶対値が 1 となる場合を除いて) 保証されている (ハートマン=グロブマンの定理)。

したがって、不動点の周辺では非線形システムの挙動をヤコビ行列の固有値と固有ベクトルによって特徴づけることができる。

課題 8.

次のうち、3 つ以上の問いに答えなさい。

1. $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$ を対角化しなさい。
2. \vec{u} が固有ベクトルであるとき、スカラー $a \in \mathbb{R}$ について $a\vec{u}$ も固有ベクトルであることを示せ。
3. A が $A = PDP^{-1}$ と対角化できるとき、以下の事実を示せ。
 - a. PDP^{-1} の (i, i) 成分を計算することで A のトレース $(\sum_{i=1}^n a_{ii})$ は固有値の和に等しいことを示せ。

- b. $\det(AB) = \det(A) \det(B)$ を利用し, A の行列式の値は固有値の積に等しいことを示せ.
4. 正規直交行列 Q について, $QQ^T = I$ であることを示せ.
5. $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n$ が互いに直交する $\vec{0}$ でないベクトルであるとき, $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n$ が一次独立であることを示せ.
6. 対称行列で固有値が重複する例を作りなさい.

9. ペロン・フロベニウスの定理

9.1. ノイマン級数

等比数列 $a_n = a^n$ について, $|a| < 1$ であれば, $\sum_{n=0}^{\infty} a^n = \frac{1}{1-a}$ であることはよく知られている. 実はこれは行列でも成り立ち, もし以下の級数が収束するのであれば

$$\sum_{n=0}^{\infty} A^n = (I - A)^{-1}$$

となることが知られている (ノイマン級数). この場合, 等比数列の $|a| < 1$ に相当する条件はどのようなものだろうか?

これを考えるため, $r(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ は } A \text{ の固有値}\}$ を考える. このとき次の事実が言える.

$$r(A) < 1 \text{ であるとき, } \sum_{n=0}^{\infty} A^n = (I - A)^{-1} \text{ となる.}$$

この事実の証明は普通の無限等比数列の場合の話と同じである. $\sum_{n=0}^{\infty} A^n$ が固有値を使って, 実際に収束することを示せば良い.

$r(A)$ はスペクトル半径と呼ばれる.

9.2. ペロン・フロベニウスの定理

$n \times m$ 行列 A について,

- $A \geq 0$ となるとき, この行列の各成分が非負であることを意味する. このような行列を非負行列という.

- $A > 0$ となるとき, この行列の各成分が非負であり, なおかつ $A \neq 0$ であることを意味する.
- $A \gg 0$ となるとき, この行列の各成分が正であることを意味する. このような行列を正行列という.

この不等式はベクトルについても同じように定義される.

$n \times n$ 行列の非負行列 A について, $A \geq 0$ が**規約** (irreducible) であるとは, $\sum_{m=0}^{\infty} A^m \gg 0$ であることを言い, $A^m \gg 0$ となる m が存在するとき, A は**原始的** (primitive) であると言う. これらの行列について, 次の関係が成り立つ.

$A \gg 0$ ならば A は原始的であり, 原始的ならば規約であり, 規約ならば $A \geq 0$ である.

規約であることは次のようにも言い換えられる. つまり, $\sum_{m=0}^{\infty} A^m \gg 0$ であるということは, どんな i, j についても, いずれかの m について, $[A^m]_{ij} > 0$ であることである. ここで $[A^m]_{ij}$ は A^m という行列の (i, j) 成分を指す.

規約であることは $A_{ij} = 0$ となる (i, j) があっても成り立つことがあることに注意する. 例えば $A_{15} = 0$ であるが, $A_{12} > 0, A_{23} > 0, A_{34} > 0, A_{45} > 0$ となっていたとする. ここで,

$$[A^2]_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} A_{kj}$$

となるので, $[A^2]_{13} > 0$ がわかる. これは, $A_{12} A_{23} > 0$ で, 他の (i, j) について, $A_{ij} \geq 0$ であることからきている. 同様にして $[A^2]_{35} > 0$ がわかる.

そして, 同じようにして

$$[A^4]_{ij} = \sum_{k=1}^n [A^2]_{ik} [A^2]_{kj}$$

であるので, $[A^4]_{15} > 0$ となることが言える. このように, 1 から 5 まで 0

にならない経路を辿ることができれば、何乗かすることで正の値を得ることができるのである。

非負行列については次の定理が有名である。

定理 3 (ペロン・フロベニウスの定理). A が非負行列であるとき、 $r(A)$ は A の固有値であり、以下を満たすようなゼロでない非負のベクトル、 $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}_+^n$ が存在する。

$$A\vec{x} = r(A)\vec{x}$$

$$A^T\vec{y} = r(A)\vec{y}$$

もし A が規約であれば、さらに以下の 3 つの性質が成り立つ。

1. $r(A) > 0$ かつ固有ベクトルはそのスカラー倍を除いて一意である。
2. $\vec{x}, \vec{y} \gg 0$.
3. 他の固有値に対する固有ベクトルは非負にならない。

もし原始的ならば加えて次の 2 つの性質が成り立つ。

4. 他の固有値 λ に対して、 $|\lambda| < r(A)$
5. \vec{y}, \vec{x} を $\vec{y}^T \vec{x} = 1$ が成り立つように基準化すれば

$$\lim_{m \rightarrow \infty} A^m (r(A))^{-m} = \vec{x} \vec{y}^T$$

となる。

この定理の証明は、かなり長く、この講義のレベルを超えるので省略する。このうち、比較的容易に証明できるものについては、後の節で証明を行う。

ある固有値 λ に対してそれに対応する固有ベクトルがそのスカラー倍を除いて一意であるとき、 λ は**単純固有値**であると言う。 $r(A)$ が単純固有値であるとき、 $r(A)$ は A の**ペロン根**という。

非負行列については次の性質がある。

$A \geq 0$ とするとき次が成り立つ。

1. $\min_j \sum_i a_{ij} \leq r(A) \leq \max_j \sum_i a_{ij}$
2. $\min_i \sum_j a_{ij} \leq r(A) \leq \max_i \sum_j a_{ij}$

(証明) 1 を証明する。ペロン・フロベニウスの定理より、 $r(A)$ は A の固有値である。したがって、 $\vec{y}^T A = \vec{y}^T r(A)$ となるような非負のベクトル \vec{y} が存在する。すると、以下の通りである。

$$\sum_j a_{ij} y_j = r(A) y_i$$

これを i について足し合わせると

$$\sum_i \sum_j a_{ij} y_j = r(A) \sum_i y_i$$

$$r(A) = \frac{\sum_i \sum_j a_{ij} y_j}{\sum_k y_k}$$

$$r(A) = \sum_j \frac{y_j}{\sum_k y_k} \sum_i a_{ij}$$

となり、 $r(A)$ は $\sum_i a_{ij}$ という値の線形結合になる。したがって、 $\min_j \sum_i a_{ij} \leq r(A) \leq \max_j \sum_i a_{ij}$ である。

9.3. 応用：産業連関分析

ペロン・フロベニウスの定理は産業連関分析にも応用される。産業連関分析とは、ある産業から他の産業に向けての需要を行列で表現し、その行列の固有値を求めることで、どの産業が重要であるかを知ることができる。

具体的に見てみよう。まず、経済が n 部門あり、各部門は 1 種類の財を生産するとする。このとき、各部門の生産関数は

$$y_j = s_j \ell^\alpha \prod_{i=1}^n (q_{ij})^{\alpha_{ij}}$$

と書くことができる。ここで、 y_j は部門 j の生産量、 s_j は部門 j の技術シヨツ

ク、 l_j は部門 j で雇用されている労働力、 q_{ij} は部門 j が部門 i から購入する財の量である。また、 $\sum_i a_{ij} + \alpha = 1$ かつ $a, a_{ij} \geq 0$ とする。

部門 i の生産財価格を p_i 、賃金を w とすれば各部門の企業の利潤は次のように書ける。

$$\pi_j = p_j y_j - w l_j - \sum_i p_i q_{ij}$$

企業の利潤を最大にする q_{ij} は次のように計算できる。

$$q_{ij} = \left(\frac{p_j}{p_i} \right) a_{ij} y_j$$

$$l_j = \frac{p_j}{w} \alpha y_j$$

これを生産関数に代入すれば

$$y_j = s_j \left(\frac{p_j}{w} \alpha y_j \right)^\alpha \prod_{i=1}^n (q_{ij})^{a_{ij}} = s_j \left(\frac{p_j}{w} \alpha y_j \right)^\alpha \prod_{i=1}^n \left(\left(\frac{p_j}{p_i} \right) a_{ij} y_j \right)^{a_{ij}}$$

となる。この両辺を対数をとって整理すると以下の通りである。

$$\rho_j = \sum_i a_{ij} \rho_i - \varepsilon_j$$

ただし、 $\rho_j = \ln(p_j)$ であり、 ε_j はその他の項をまとめたものである。行列表記すれば

$$\vec{\rho} = A^T \vec{\rho} - \vec{\varepsilon}$$

と書ける。よって、 $\vec{\rho} = -(I - A^T)^{-1} \vec{\varepsilon}$ となる。 $(I - A^T)^{-1}$ が存在する十分条件はノイマン級数が収束することと同じなので、 $r(A^T) < 1$ であることが必要である。これをチェックしよう。 $A \geq 0$ であるので最大固有値は $r(A^T)$ で与えられ、ペロン・フロベニウスの定理より、 $r(A^T) < 1$ がわかる (なぜか?)。したがって、 $(I - A^T)^{-1}$ は存在する。これは**レオンチェフ逆行列**ともいう。

9.4. 応用：マルコフ連鎖

次の例を考えてみよう。

ある感染症の罹患者と回復者の割合がそれぞれ x, y と表されるとする。このとき、感染者が回復者になる確率を p 、回復者が感染者になる確率を q とする。 t 日目の感染者割合を x_t 、回復者割合を y_t とするとき、 $t + 1$ 日目の感染者と回復者の割合は次のように表される。

$$x_{t+1} = (1 - p)x_t + qy_t$$

$$y_{t+1} = px_t + (1 - q)y_t$$

上の例は確率的に決まる動学システムであると言える。

より一般的に考えてみよう。状態が n 個あり、その間を確率的に移動するようなことを考える。これは確率的な動学システムで表現することができる。 **マルコフ連鎖**はそのような確率的な動学システムの一つである。マルコフ連鎖は次のように定義される。

マルコフ連鎖とは、ある状態から次の状態に遷移する確率が現在の状態にだけ依存し、過去の状態に依存しない。まず、 \vec{x} を状態の分布とする。つまり、 x_i は状態 i にいる確率である。このとき、 A を遷移行列として、 $P\vec{x}$ は次の状態の分布を表す。ここで (i, j) 成分は状態 j から状態 i に遷移する確率である。

遷移行列 P は次の条件を満たす行列である。

- $P \geq 0$
- $\mathbf{1}^\top P = \mathbf{1}^\top$ ¹⁴

ただし、 P は $n \times n$ 行列であり、 $\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$ である。 P を **確率行列**ともいう。

遷移行列 P について、 $\vec{x} = P\vec{x}$ となるとき、 \vec{x} を **定常分布**という。つまり、 \vec{x} は遷移行列をかけても変わらない状態の分布である。

マルコフ連鎖については次の事実が成り立つ。

1. P, Q が確率行列ならば PQ も確率行列である。

¹⁴ $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$ とする流儀もある。

2. $r(P) = 1$ である.
3. 定常分布が存在する.

さらに P が原始的ならば定常分布は一意である.

(証明)

1. P, Q が確率行列であるとき, PQ の (i, j) 成分は $\sum_k p_{ik}q_{kj}$ である. p_{ik}, q_{kj} は非負であるので, $\sum_k p_{ik}q_{kj}$ も非負である. また,

$$\mathbf{1}^\top PQ = \mathbf{1}^\top P = \mathbf{1}^\top$$

となるので, PQ も確率行列である.

2. P は確率行列なので $\mathbf{1}^\top P = \mathbf{1}^\top$ である. また, $\mathbf{1}^\top P = [\sum_k p_{k1} \cdots \sum_k p_{kn}]$ であるので, $\sum_k p_{ki} = 1$ がすべての i について成り立つ. $\min_i \sum_k p_{ki} \leq r(P) \leq \max_i \sum_k p_{ki}$ であるので $r(P) = 1$ である.

3. ペロン・フロベニウスの定理より, $P\vec{x} = r(P)\vec{x}$ となる非負の \vec{x} が存在する. $r(P) = 1$ であり, また, $x'_j = \frac{x_j}{\sum_i x_i}$ とすれば \vec{x}' は定常分布である.

さらに P が原始的であれば, ペロン・フロベニウスの定理より \vec{x} はそのスカラー倍を除いて一意であるので, 和が 1 となるものは他にない. よって定常分布は一意である.

課題 9.

以下のうち, 2 つ以上の問いに答えなさい.

1. A が対角化可能でスペクトル半径 $r(A)$ が 1 より小さいとき, $\sum_{n=0}^{\infty} A^n = (I - A)^{-1}$ であることを示せ.
2. 行列 A が非負行列であるとき, $A \gg 0$ ならば A は原始的であり, 原始的ならば規約であり, 規約ならば $A \geq 0$ であることを示せ.
3. $A \geq 0$ のとき $\min_i \sum_j a_{ij} \leq r(A) \leq \max_i \sum_j a_{ij}$ を示せ.

9.5. ペロン・フロベニウスの定理の証明 (一部)

この節では、ペロン・フロベニウスの定理のうち、比較的容易に証明できるいくつかの性質を示そう。

定理を証明するために次の関数を定義する。

$$L(\vec{x}) = \max\{s \in \mathbb{R} : s\vec{x} \leq A\vec{x}\}$$

このとき、任意のスカラー μ について、 $L(\vec{x}) = L(\mu\vec{x})$ であることに注意せよ。そして、 $S = \{\vec{x} \in \mathbb{R}_+^n : \sum_i x_i = 1\}$ と書く。このとき、

$$\lambda = \max_{\vec{x} \in S} L(\vec{x})$$

とする。さらに、 $P = (I + A)^n$ とする。これは $P = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} A^k$ と書ける。そうすると、 $P \geq 0$ であり、また、 A が規約であれば $P \gg 0$ が十分大きい n について成り立つ。

このとき、次の性質が成り立つ。

1. λ は A の固有値である。
2. λ に対応する固有ベクトルは非負である。
3. $\lambda = r(A)$

(証明)

1. まず、 $s\vec{x} \leq A\vec{x}$ ならば、 $sP\vec{x} \leq PA\vec{x} = AP\vec{x}$ である。このことから、 $L(\vec{x}) \leq L(P\vec{x})$ といえる。ここでもし、 $L(\vec{x})$ が \vec{x} の固有値でなければ、 $s\vec{x} \leq A\vec{x}$ となるどんな s についても $sP\vec{x} < AP\vec{x}$ が成り立つ。つまり、 $s < \min_{i; x_i \neq 0} \frac{[AP\vec{x}]_i}{[P\vec{x}]_i}$ と言える。したがって、 $L(\vec{x}) < L(P\vec{x})$ である。

また、 $L(P\vec{z}) = L\left(\frac{1}{z^*} P\vec{z}\right) \leq \lambda$ である。ただし、 $z^* = \sum_i [P\vec{z}]_i$ としている。これはなぜなら $P\vec{z} \geq 0$ であり、 $\frac{1}{z^*} P\vec{z} \in S$ であるからである。すると、 \vec{x} を L の最大化解とすれば $\lambda = L(\vec{x}) \leq L(P\vec{x}) \leq \lambda$ と

なる。したがって、 $\lambda = L(P\vec{x}) = L(\vec{x})$ であり、 λ は A の固有値である。

- 1 で構成した \vec{x} が固有ベクトルになっており、これは取り方から非負である。
3. 固有値 μ を考えると、 A の各成分が非負であることから次が満たされる。

$$\begin{aligned}\mu \vec{z} &= A\vec{z} \\ |\mu| |z_i| &= \left| \sum_{j=1}^n A_{ij} z_j \right| \\ &\leq \sum_{j=1}^n |A_{ij} z_j| \\ &= \sum_{j=1}^n A_{ij} |z_j|\end{aligned}$$

そうすると、この式全体を $z^* = \sum_i |z_i|$ でわることで、得られたベクトルは S に含まれる。したがって、 $|\mu| \leq L(z) \leq \lambda$ である。これは λ がスペクトル半径であることを意味する。

次に規約である場合の性質を示そう。 $P = \sum \binom{n}{k} A^k$ であるので、

$$P\vec{x} = \sum \binom{n}{k} A^{k-1} A\vec{x} = \sum \binom{n}{k} \lambda^k \vec{x}.$$

したがって、 A が規約なら $P \gg 0$ となるので、

$$[P\vec{x}]_i = \sum_{j=1}^n P_{ij} x_j > 0$$

が言える。よってこれから $\lambda > 0$ かつ、 $\vec{x} \gg 0$ が言えることになる。

\vec{x} が単純固有値であることは次のように示される。もし、 λ に対して、他の固有値 \vec{v} があったとしよう。そうすると、 $\vec{v} \gg 0$ であり、また、実数 $t = \min_i \frac{x_i}{v_i}$ とすれば、任意の j について、 $tv_j \leq \frac{x_j}{v_j} v_j = x_j$ となることから、

$$\vec{z} = \vec{x} - t\vec{v} \geq 0$$

かつ, $z_m = 0$ となるような m が存在する. また, \vec{x}, \vec{v} は一次独立なので, $\vec{z} \neq 0$ である. 一方で,

$$A\vec{z} = A\vec{x} + tA\vec{v} = \lambda\vec{z}$$

となることから, \vec{z} が A の固有ベクトルであることがわかるので, $\vec{z} \gg 0$ が示される. これは $z_m = 0$ であることと矛盾する. よって, \vec{x} が単純固有値となることがわかる.

3番目の性質は, 次のように示される. もし他の固有値に対する固有ベクトルが非負であるとしてみよう. そうすると, その固有値 $\mu < \lambda$ と対応する固有ベクトル \vec{v} が見つかる. このとき, もし, \vec{x} と \vec{v} が一次従属であれば, $t\vec{x} = \vec{v}$ とかける. すると,

$$\mu\vec{v} = A\vec{v} = tA\vec{x} = \lambda t\vec{x} = \lambda\vec{v}$$

となるので矛盾する. したがって, \vec{x} と \vec{v} は一次独立である. そうすると, \vec{x} が単純固有値であることの証明と同様にして $z = x - tv \geq 0, z_m = 0$ とすれば,

$$A\vec{z} = A\vec{x} + tA\vec{v} = (\lambda + t\mu)\vec{z}$$

となるので, \vec{z} が A の固有値であることが示せる. しかしこれは $\vec{z} \gg 0$ であることを意味するので, 矛盾である.

上記の証明では最大固有値が $\max_{\vec{x} \in S} L(\vec{x})$ であることを利用したが, 他の求め方もある. この説明のために, まず, **首座小行列**を定義する. これは以下のような行列のことである. つまり行列の右上から, $k \times k$ の部分行列を取り出したものである.

$$[a_{11}], \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}, \dots$$

「すべての首座小行列の行列式が正である」という条件を**ホーキングス・サイモンの条件** (H-S 条件) という。この条件に関して、まず次の定理を証明する。

B を対角成分以外が負の行列とする。このとき、H-S 条件が成り立つことと以下は同値である。

1. **弱可解性:** $B\vec{x} = c$ は任意の $c \in \mathbb{R}_+^n$ について、非負解 $\vec{x} \in \mathbb{R}_{++}^n$ をもつ
2. **強可解性:** $B\vec{x} = c$ は任意の $c \in \mathbb{R}_+^n$ について、非負解 $\vec{x} \in \mathbb{R}_+^n$ をもつ。

(証明) n に関する帰納法で行う。まず、 $n = 1$ のときは自明に成り立つので、 $n - 1$ のときに成り立つということを仮定する

1. まず、弱可解性を前提とし、H-S 条件を示す。

このとき、 $b_{1i} \leq 0, x_i \geq 0$ より以下が成り立つ

$$b_{11}x_1 = c_1 - \sum_{i \neq 1}^n b_{1i}x_i \geq c_1 > 0$$

これによって、 $b_{11} > 0$ である。これを連立方程式、 $B\vec{x} = c$ に代入すると以下のような新しい連立方程式を作ることができる。

$$b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \cdots + b_{1n}x_n = c_1$$

$$b'_{22}x_2 + \cdots + b'_{2n}x_n = c'_2$$

⋮

$$b'_{n2}x_2 + \cdots + b'_{nn}x_n = c'_n$$

ただし、 $b'_{ij} = b_{ij} - \frac{b_{i1}b_{1j}}{b_{11}} \leq 0, c'_i = c_i - \frac{b_{i1}c_1}{b_{11}} > 0$ である。また、もとのものと同じ方程式なので以下の連立方程式は非負解を持つ。

$$b'_{22}x_2 + \cdots + b'_{2n}x_n = c'_2$$

⋮

$$b'_{n2}x_2 + \cdots + b'_{nn}x_n = c'_n$$

よって帰納法の仮定から、H-S 条件が b' からなる行列について成立する。 b' からなる行列は元々の行列 B の基本変形によって得られたものである。したがって、元々の行列式についても成立する。

2. 次に H-S 条件を前提とし、強可解性を示す。これは先ほどの経路を逆に辿れば良い。つまり、以下の連立方程式によって作られる行列 B' が、H-S 条件を満たすことを確認し、それにより、非負解 x_2, \dots, x_n が存在することが帰納法の仮定から示される。

$$b'_{22}x_2 + \dots + b'_{2n}x_n = c'_2$$

$$\vdots$$

$$b'_{n2}x_2 + \dots + b'_{nn}x_n = c'_n$$

この事実を用いて、以下のようにすれば、非負解を持つことを示すことができる。

$$x_1 = \frac{c_1 - \sum_{i \neq 1}^n b_{1i}x_i}{b_{11}}$$

3. 最後に強可解性から弱可解性は自明に成り立つ。よって、すべての条件が同値であることを確認できる。

つぎに、非負行列、 A を考えよう。これに対して、行列 $B(\rho) = \rho I - A$ を考える。 ρ は実数である。この $B(\rho)$ は対角成分以外がすべて負の行列になっている。ここで $c \in \mathbb{R}_{++}^n$ に対して、次の方程式を考える。

$$B(\rho)\vec{x} = c$$

$B(\rho)$ が H-S 条件を満たすような ρ の集合を M とする。すると、どんな ρ に対しても上記の方程式の非負解が求められるので、それを \vec{x}^ρ と書くことにする。いま、 $\rho, \rho' \in M$ で、 $\rho \geq \rho'$ とすると、 $\vec{x}^{\rho'} \geq \vec{x}^\rho$ が成り立つ（確かめてみよ）。

M には最小値がないことに注意する。これは H-S 条件が厳密な不等号で定義されているからである。そこで、 $\inf M$ を考える。これは $\{a \in \mathbb{R} \mid a <$

$b, \forall b \in M\}$ という集合 (下界と呼ばれる) の中の最大値である。細かいところはごまかすが, ある集合 M に最小値がなければ, 下界には最大値があり, それが $\inf M$ である。これを $\lambda(A)$ と書くことにする¹⁵。

$\rho_n \rightarrow \lambda(A)$ となるような数列を考える。このとき, 実は $\eta_n := \sum_j x_j^{\rho_n} \rightarrow \infty$ となる。そうでなければ収束先で,

$$B(\lambda(A))\vec{x} = c$$

が成り立ってしまうが, これは $\lambda(A) \in M$ となって, M に最小値が存在することになってしまうからである。

したがって, $\rho_n \rightarrow \lambda(A)$ となるような数列を考えると, $\eta_n = \sum_j x_j^{\rho_n} \rightarrow \infty$ となる。これは, ρ_n が $\lambda(A)$ に収束するとき, \vec{x}^{ρ_n} が無限大に発散することを意味する。

そこで, 全体を η_n で割った, 以下のもの考える。

$$B(\rho_n) \frac{\vec{x}^{\rho_n}}{\eta_n} = \frac{c}{\eta_n}$$

ここで, $\frac{\vec{x}^{\rho_n}}{\eta_n}$ は成分の和が 1 となるベクトルである。

$n \rightarrow \infty$ としてやれば

$$B(\lambda(A))\vec{x} = 0$$

という形になる。これは $\lambda(A)$ が A の固有値であることを意味する。また, このときの \vec{x} は非負である。

さらに $\lambda(A) \geq 0$ であることが言える。これは H-S 条件が $B(\rho)$ の対角成分が正であることを要求していることからわかる。 A が非負で, $\rho \leq 0$ なら対角成分は負になってしまうのである。どんな $\rho \in M$ も, $\rho > 0$ であり, その極限の $\lambda(A)$ は負でない。

これによって負でない固有値が存在し, そのときの固有ベクトルが非負であることがわかった。次にそれが最大の固有値であることを示そう。も

¹⁵これをフロベニウス根という。

し $\lambda(A)$ より大きい固有値が存在すれば, H-S 条件を必ず満たす. したがって, $(\rho I - A)$ は逆行列を持つので, ρ は A の固有値ではない. これによって, $\lambda(A)$ が最大の固有値になることが確認できる.

フロベニウス根は首座小行列の行列式によって定義されるため, 首座小行列の行列式の値が同じならばフロベニウス根は同じである. 転置行列 A^T について, すべての首座小行列式は同じになるため, もともとの行列とその転置行列について, フロベニウス根は同じになる. フロベニウス根は最大固有値であるため, 最大固有値は元の行列とその転置行列で同じである.