ORでわかる線形代数

小市　俊悟

理系の大学生であれば1年生で習うであろう，線形代数学の知識が，OR，特に最適化のなかでどのように使われているかを紹介する．線形代数学で学ぶことが必ずしもそのまま使われているわけではないが，そのアイディアは最適化のそこかしこに現れる．線形代数学の言葉を用いるならば，線形代数学はORという空間を張るベクトルの一つと言えよう．

キーワード：ガウスの消去法，線形結合（一次結合），対角化，線形計画問題，双対問題

1. はじめに

大学で「線形代数学」の講義を担当することになって，書店で線形代数学の教科書を探したが，その数の多さに驚いたことを思い出す．これは，線形代数学を理解してもらいたいという熱意ある著者が単純に多いためなのかもしれないが，多くの理系学生が線形代数学の理解に苦しんでいることの現れでもないかと思う．高校数学から「行列」が消えてしまい，大学に入って初めて「行列」に直面し，線形代数学に苦しむ学生がますます増えないかと心配である．

さて，本特集は，企業などでORに触れることとなった方や，ORを学び始めた学生を対象にした「ORと数学・統計」ということで，本稿は特にORで使われる「線形代数学」がテーマである．体系化された現代数学において，線形代数学は，線形空間と線形写像を研究する分野という位置づけであるが，ORを利用する人にとっては，ベクトルや行列を研究する分野という理解でもおよそ十分であろう．本稿も，ベクトルや行列を取り上げているので線形代数学というぐらいの立場である．線形代数学の講義で聞いた言葉がところどころに出てくるなぁ，という感じでお読みいただければ幸いである．

$$\begin{bmatrix}\text{形} & \text{線}\\ \text{数} & \text{代}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\text{線} & \text{形}\\ \text{代} & \text{数}\end{bmatrix}$$

線形代数学に関する標準的な用語については，線形代数学の専門書にゆずることにして，OR，特に最適化に関連する線形代数学について，ORを学びたい，もしくは学び始めた方に参考になる（かもしれない）ことを本稿に綴る．ベクトルの内積については，たとえば $\boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{y}$ のように行列（ベクトル）の転置（右肩に $\top$ を付けて表す）を利用して書くことにする．

こいち　しゅんご
南山大学
〒466–8673 愛知県名古屋市昭和区山里町18
shungo@nanzan-u.ac.jp

2. 数式も言葉

思い出せば，小学生の頃の「算数」では，数式 $3+2=5$ にも，「みかんが3個，リンゴが2個あるとき，全部で果物は何個あるでしょう」（答えは，もちろん5個）のような実際的な意味があった．ところが，おそらく方程式を扱うあたりから，「計算する」ことに重点が置かれるようになってしまう．「計算量」のような話をするまでもなく，「計算できなければ答えはでない」ところもあるので，それはそれで重要なことではあるものの計算ばかりをすることは，ややもすれば，「数学＝面倒＝つまらない」な印象を与えてしまう．

残念ながら，大学における線形代数学でも，特に初学者向けの講義では，「（行）基本変形」や「行列式の計算」といった煩雑な計算が中心になる．これは，線形代数学に出てくる定理の証明が計算と不可分，すなわち連立一次方程式を解くことに帰着されることも多いからであろう．しかし，特に初学者に，そこまでわかったうえで線形代数学を学んでもらうことは，なかなか期待できないことである．線形代数学で計算ばかりさせられたという印象が残るのも無理はない．

機械的な計算のために，数学がちょっぴり嫌いになってしまった方に対して，ORは算数的な楽しみを与えてくれるかもしれない．ORに出てくる数式には，抽象度が高いものもあるけれど，幸いにして実際的な意味をもつものが多い．さらに，幸いなことに，ORにおいて，実際に計算することは，一部の専門家を除いて計算機がすることである．ORを実践する人にとっては，数式の意味を理解すること，そして，意味ある数式を（これまた，技術的には良し悪しがあるが）立

てられることが（これまでの筆者の経験からすれば）重要である．

3. ガウスの消去法と線形計画問題

OR に出てくる数式には，実際的な意味があることの例として，次のような生産計画問題を取り上げ，それを線形計画問題として表現することにしよう．

> ともに原料 X と Y を使った 2 種類のジュース 1 と 2 がある．どちらも，10 ml 当たり 3 円で販売される．ジュース 1 は，10 ml 作るのに，原料 X を 2 ml，原料 Y を 3 ml 必要とする．ジュース 2 は，10 ml 作るのに，原料 X を 1 ml，原料 Y を 4 ml 必要とする．原料 X と Y は，それぞれ 40 ml，100 ml ある．作ったジュースはすべて売れるものとして，売り上げが最も大きくなるようにジュース 1 と 2 を作りなさい．

ジュース 1 を $x_1 \times 10\,\mathrm{ml}$，ジュース 2 を $x_2 \times 10\,\mathrm{ml}$ 作るものとしよう．このとき，売り上げは，ジュース 1 と 2 ともに 10 ml 当たり 3 円で販売されるので，

$$3x_1 + 3x_2$$

と表される．これを，最大化するのが目的である．さて，問題文を読めば，原料に限りがあるので，ジュースをいくらでも作ることができるわけではない．ジュース 1 を $x_1 \times 10\,\mathrm{ml}$，ジュース 2 を $x_2 \times 10\,\mathrm{ml}$ 作るとき，原料 X と Y について，その使用量は，それぞれ $2x_1 + x_2$，$3x_1 + 4x_2$ となる．これらが原料の利用可能量を超えてはいけないから，次の二つの（不等）式が成り立たないといけない．

$$2x_1 + x_2 \leq 40, \tag{1}$$
$$3x_1 + 4x_2 \leq 100. \tag{2}$$

作る量が負ということもありえないから，

$$x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0 \tag{3}$$

という条件も加えておく．以上は，まとめて次のように記述される．

$$\begin{array}{lll} \text{(P)} & \text{maximize} & 3x_1 + 3x_2 \\ & \text{subject to} & 2x_1 + x_2 \leq 40, \\ & & 3x_1 + 4x_2 \leq 100, \\ & & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0. \end{array}$$

ここで，行列やベクトル

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 40 \\ 100 \end{bmatrix}, \boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

を導入すれば，問題 (P) は，

$$\begin{array}{lll} \text{(P')} & \text{maximize} & \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \\ & \text{subject to} & A\boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{b}, \\ & & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}. \end{array}$$

と書ける．一般に，行列やベクトルを使って，問題 (P') のように書ける問題を線形計画問題と呼ぶ．次節の内容を含めて，線形計画問題についてもっと詳しく，またより実際的な問題を知りたい方は，文献 [1] などを参照していただきたい．

まずは，問題 (P) を解いてみよう．問題 (P) は，変数が x_1 と x_2 の二つだから平面に図示することができる．式 (1)，(2)，(3) を制約式と呼ぶが，図 1 では，それらを満たす変数の領域が灰色で示されている（境界を含む）．この領域に入る変数は，制約式を満たすという意味で実行可能であるとされ，この領域のことを実行可能領域と呼ぶ．図 1 において，原点を通る破線は，ベクトル $\boldsymbol{c}$ に平行な直線で，これを ℓ とする．問題 (P) の目的は，$\boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x}$ を最大化することであったが，ベクトル $\boldsymbol{c}$ と $\boldsymbol{x}$ のなす角を θ とすれば，$\boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{c}\|\|\boldsymbol{x}\| \cos\theta$ であることを思い出してもらい，さらに $\|\boldsymbol{c}\|$ が定数であることを踏まえると，結局，$\|\boldsymbol{x}\| \cos\theta$ を最大にすればよいことがわかる．またまた，ここで，$\|\boldsymbol{x}\| \cos\theta$ は，ベクトル $\boldsymbol{x}$（の先端）から直線 ℓ におろした垂線の足と原点を結ぶ線分の長さに等しいことを思い出してもらうと，図 1 から，$\boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x}$ を最大にするベクトル $\boldsymbol{x}^*$ は，直線 $2x_1 + x_2 = 40$ と $3x_1 + 4x_2 = 100$ の交点を表すベクトル

$$\boldsymbol{x}^* = \begin{bmatrix} 12 \\ 16 \end{bmatrix}$$

であり，売り上げの最大値は $3 \times 12 + 3 \times 16 = 84$ であることがわかるであろう．この程度の問題であれば，高校数学の知識でも解けなくはない．

さて，今の解法は，2 変数だからできたところもあるし，線形代数学といっても内積ぐらいしか出てこない．（線形代数学は幾何学という人もいるが）どちらかというと幾何学的な解法であった．それでは，もう少し線形代数学のテクニックを使ってみよう．線形代数学で習うテクニックと言えば，連立一次方程式を解くためのガウスの消去法である．行基本変形を使って，

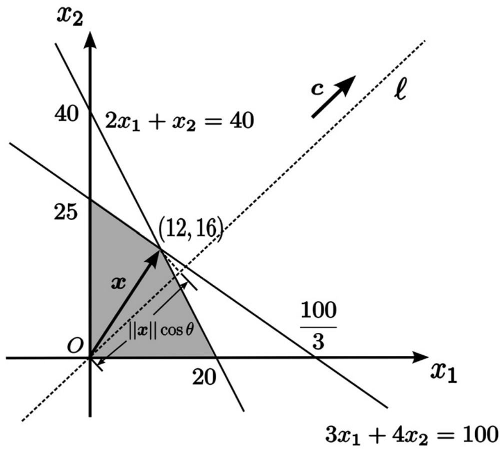

図 1　問題 (P) の実行可能領域

階段行列を作る，あれである．

とは言ってみたものの，問題 (P) にガウスの消去法を適用するにはいささか問題がある．それは，問題 (P) が不等式で書かれていることである．不等式は，辺々の足し算はできるが引き算はそうもいかない．そこで，$\boldsymbol{Ax} \leq \boldsymbol{b}$ の部分だけでも，新たな変数 s_1 と s_2 を導入することで等式にする．すなわち，制約式 (1)，(2)，(3) を次のように書き換える．

$$2x_1 + x_2 + s_1 = 40, \quad (4)$$
$$3x_1 + 4x_2 + s_2 = 100, \quad (5)$$
$$x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0,\ s_1 \geq 0,\ s_2 \geq 0. \quad (6)$$

このように書けることは，式 (4) を s_1 について解いて，$s_1 \geq 0$ に代入すれば，式 (1) が得られることなどからわかるだろう．それでは，新たな制約式 (4) と (5) の部分を線形代数学でおなじみの拡大係数行列と呼ばれる行列

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 40 \\ 3 & 4 & 0 & 1 & 100 \end{array}\right] \quad (7)$$

で表すことにしよう．制約式 (6) もあるが，しばらくはこの行列にのみ着目する．

さて，式 (7) の行列は，第 3 列と第 4 列でできる行列が単位行列であることからわかるように列を入れ替えれば，すぐに階段行列になる．もし，連立一次方程式を解く問題であれば，これ以上，行基本変形をする必要はない．$(x_1, x_2, s_1, s_2) = (0, 0, 40, 100)$ がその答え（解）である．単位行列（となる部分）の列に相当しない変数（この場合，x_1 と x_2）を 0 にしてしまうのが，ガウスの消去法による連立一次方程式の解法であったことを思い出してもらいたい．ところで，解 $(x_1, x_2, s_1, s_2) = (0, 0, 40, 100)$ は実行可能ではあるが，x_1 と x_2 が 0 では何の売り上げもないので問題 (P) の最大値を与えるような解ではない，すなわち，最適解ではないことは明らかであろう．

では，x_1 が正になるような解を求めてみよう．そのためには，第 1 列が単位行列の一部になるようにガウスの消去法を行えばよい．

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 40 \\ 3 & 4 & 0 & 1 & 100 \end{array}\right]$$
$$\longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 20 \\ 3 & 4 & 0 & 1 & 100 \end{array}\right]$$
$$\longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 20 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} & 1 & 40 \end{array}\right] \quad (8)$$

これで，$(x_1, x_2, s_1, s_2) = (20, 0, 0, 40)$ という解が得られた．この解が，先ほどの解よりよいのはすぐにわかるだろう．では，（この解が最適解でないことは知っているが）この解は最適解であろうか．これについては悩ましい．式 (8) の行列を一度，連立一次方程式の形式に戻そう．

$$x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{2}s_1 = 20, \quad (9)$$
$$\frac{5}{2}x_2 - \frac{3}{2}s_1 + s_2 = 40. \quad (10)$$

単純に考えて，x_2 が 0 なのはもったいない．しかし，s_1 はすでに 0 だから，式 (9) において x_2 を大きくしようとすると，x_1 を小さくしなければならない．トレードオフが生じるのである．これだから線形計画問題は難しい．式 (10) には，x_1 が現れないので，このトレードオフには関係しない．式 (9) にだけ着目しよう．変数 x_1 と x_2 の係数の比は $1 : 1/2$ なので，x_2 を 2 大きくしたら，x_1 を 1 小さくするという関係である．いま，ジュース 1 も 2 も 10 ml で 3 円だったので，x_1 を 1 小さくしてでも，x_2 を 2 大きくできるのであれば，それは売り上げに貢献する．ということで，x_2 を大きくするのが得策のようである．変数 x_2 も正になるようにガウスの消去法を再び用いれば，次のようになる．

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 20 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} & 1 & 40 \end{array}\right]$$
$$\longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 20 \\ 0 & 1 & -\frac{3}{5} & \frac{2}{5} & 16 \end{array}\right]$$
$$\longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \frac{4}{5} & -\frac{1}{5} & 12 \\ 0 & 1 & -\frac{3}{5} & \frac{2}{5} & 16 \end{array}\right]$$

これで，最適解 $(x_1, x_2, s_1, s_2) = (12, 16, 0, 0)$ が得られた．

ここまでに説明した解法は，単体法と呼ばれる線形計画問題の標準的な解法を参考にして，対象を問題 (P) に限定し，なおかつガウスの消去法（行基本変形）を知っていればできる計算で最適解が得られるようにしたものである．本来の単体法は，一般的な線形計画問題に適用できるように，辞書と呼ばれる，より簡便な表記法を用いたり，変数選択や（上でややごまかした）解の最適性などについて，より細かな条件設定がされている．単体法をもっときちんと知りたい方は，最適化法についての専門書 [2] などを読んでいただきたい．

単体法について，最後に付け加えたいことがある．上では解く過程で三つの解を得たが，変数 x_1 と x_2 だけに着目すると，それらは，

$$(x_1, x_2) = (0, 0) \to (20, 0) \to (12, 16)$$

というものだった．これら 3 点は，いずれも，四角形として図 1 に示された実行可能領域の頂点である．これは偶然ではないというのが，伝えたいことである．一般に，線形計画問題の実行可能領域は（凸な）多角形を一般化した多面体と呼ばれる集合になる．これに関連してよく知られた事実として，「もし，実行可能領域である多面体が頂点をもつならば，頂点（を表すベクトル）のなかに最適解がある」という事実がある．単体法にとって，この事実は重要であり，実際，単体法の手順を解析すると，単体法は，多面体が頂点をもつとき，頂点を辿ることで最適な頂点（解）を見つけるような手法になっている．線形計画法の理論的な研究においては，多面体の研究も盛んであり，そこでは行列の階数が頻出する．

4. 線形結合と双対問題

線形代数学の講義をもつと，意外とある質問が，「ベクトルの線形結合（一次結合）って何ですか」という質問である．簡単に答えるならば，「いくつかのベクトルがあるとき，それらに実数をかけて足したもの」とでもなろうか．補足として，「かける実数を変えると違うベクトルになるけど，それらも全部，線形結合」という具合である．きちんと，その定義を述べると次のようになる．ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ と実数 $t_1, t_2, \ldots, t_k$ に対して，

$$t_1\boldsymbol{a}_1 + t_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + t_k\boldsymbol{a}_k$$

をベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ の $t_1, t_2, \ldots, t_k$ を係数とする線形結合という．慣れれば，5 の倍数とか，3 で割って余りが 1 の整数，みたいなものと発想は同じような気もするが，ベクトルということもあって，とらえどころがないのかもしれない．

さて，この節では，前節に引き続き問題 (P) を用いて，その双対問題を考えつつ，この線形結合を振り返りたいと思うが，不等式が出てくることもあって，ベクトルにかける実数はすべて非負，すなわち 0 以上のものに限定する．この場合，線形結合ではなく非負結合と呼ぶのが一般的である．

ところで，最大化問題を解くときに，一番素直な考え方はおそらく，よりよい解はないかと探していき，最良の解を得る方法である．前節で説明した単体法（のような方法）は，まさにこの方法といえる．一方，最大値を得るという発想では，次のような方法も考えられるだろう．最大値について，これ以上は大きくないだろうという値を考え，その値を限界まで小さくする方法である．（限界まで小さくしたときに，最大値と一致するかは別問題であるが，）線形計画問題の双対問題は，この発想を具体化することで得られる．それを問題 (P) を使って説明しよう．

まずは，最大値より大きいだろうという値を見積もらないといけない．手掛かりとなるのは制約式くらいなので，制約式に着目しよう．問題 (P) の制約式 (1) の両辺を 3 倍すると次を得る．

$$6x_1 + 3x_2 \leq 120.$$

変数 x_1 と x_2 が非負であることを前提とすれば，次が成り立つ．

$$3x_1 + 3x_2 \leq 6x_1 + 3x_2 \leq 120.$$

これより，問題 (P) の最大値は 120 よりは大きくならないことがわかる．さて，同じことを制約式 (2) にも適用できるが，もっと大胆に，たとえば，制約式 (1), (2) の辺々を足してしまおう．すると，次を得る．

$$5x_1 + 5x_2 \leq 140. \tag{11}$$

問題 (P) の制約を満たす (x_1, x_2) であれば，この不等式 (11) も満たすことは明らかであろう．ここで，不等式 (11) の両辺を 3/5 倍すれば，

$$3x_1 + 3x_2 \leq 84$$

を得る．何と，問題 (P) の最大値 84 が出てきた．以上の手順を，数学的に記述したのが双対問題であり，限

界まで小さくすれば最大値まで得られるというのが，（強）双対定理と呼ばれるものである．双対定理については，専門書 [2] などに任せることとして，双対問題を作る部分については，以下に，もう少し詳細な解説をする．

上で行ったのは，ある不等式を 3 倍するとか，二つの不等式を足してから全体を3/5 倍する（これは，それぞれを 3/5 倍してから足すのと同じ）という操作である．これらは，（0 倍も含めれば）制約式 (1) と (2) に（不等号の向きを変えないために）非負の（変）数 y_1, y_2 をそれぞれかけて，足し合わせることで，

$$\begin{aligned} & y_1(2x_1 + x_2) + y_2(3x_1 + 4x_2) \\ &= (2y_1 + 3y_2)x_1 + (y_1 + 4y_2)x_2 \\ &\leq 40y_1 + 100y_2 \end{aligned}$$

という不等式を得ることの具体例といえる．ここで得られた $40y_1 + 100y_2$ という値が，問題 (P) の最大値以上の値であるためには，

$$\begin{aligned} 3x_1 + 3x_2 &\leq (2y_1 + 3y_2)x_1 + (y_1 + 4y_2)x_2 \\ &\leq 40y_1 + 100y_2 \end{aligned}$$

となればよいわけであるが，さらに x_1 と x_2 が非負であることを前提とすれば，x_1 と x_2 の係数について，

$$2y_1 + 3y_2 \geq 3, \tag{12}$$

$$y_1 + 4y_2 \geq 3 \tag{13}$$

が成り立てばよい．非負条件 $y_1 \geq 0, y_2 \geq 0$ と合わせて，これらが双対問題の制約式となる．双対問題の目的は，値 $40y_1 + 100y_2$ をなるべく小さくして，問題 (P) の最大値を探ることであったから，次のようにまとめられる．

$$\begin{array}{lll} \text{(D)} & \text{minimize} & 40y_1 + 100y_2 \\ & \text{subject to} & 2y_1 + 3y_2 \geq 3, \\ & & y_1 + 4y_2 \geq 3, \\ & & y_1 \geq 0,\ y_2 \geq 0. \end{array}$$

さて，いまの話の流れで，非負結合（線形結合）を持ち出すのは，やや蛇足的なところもあるが，いま一度，双対問題を作る過程を見てみよう．問題 (P’) を書くために導入した行列 $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ を思い出してもらって，行列 A の行ベクトル $[2\ \ 1], [3\ \ 4]$ を転置したものを

$$\tilde{\boldsymbol{a}}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix},\quad \tilde{\boldsymbol{a}}_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

と表す．上で述べた，制約式 (1) と (2) に y_1, y_2 をそれぞれかけて，足し合わせるという操作において，変数 x_1 と x_2 の係数をまとめるという計算は，ベクトル $\tilde{\boldsymbol{a}}_1, \tilde{\boldsymbol{a}}_2$ の y_1, y_2 を係数とする線形結合を作ることと同じである．実際，

$$y_1\tilde{\boldsymbol{a}}_1 + y_2\tilde{\boldsymbol{a}}_2 = \begin{bmatrix} 2y_1 + 3y_2 \\ y_1 + 4y_2 \end{bmatrix}$$

を得るが，第 1 成分，第 2 成分はそれぞれ双対問題 (D) の制約式 (12)，(13) の左辺に現れるものに他ならない．ベクトル $\tilde{\boldsymbol{a}}_1$ と $\tilde{\boldsymbol{a}}_2$ は行列 A の転置行列 $A^\top$ の列ベクトルであるから，ベクトル

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

として，

$$y_1\tilde{\boldsymbol{a}}_1 + y_2\tilde{\boldsymbol{a}}_2 = A^\top\boldsymbol{y}$$

のように書ける．これより，問題 (P) を表すのに導入した行列 A やベクトル $\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}, \boldsymbol{0}$ を使って，双対問題は

$$\begin{array}{lll} \text{(D')} & \text{minimize} & \boldsymbol{b}^\top\boldsymbol{y} \\ & \text{subject to} & A^\top\boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{c}, \\ & & \boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{0} \end{array}$$

と書ける．

双対問題を作る過程を，非負結合でとらえることは，双対問題を幾何学的に解釈するときに役に立つ．ベクトル $\tilde{\boldsymbol{a}}_1, \tilde{\boldsymbol{a}}_2$ は，それぞれ図 1 に示された二つの直線 $2x_1 + x_2 = 40, 3x_1 + 4x_2 = 100$ の法線ベクトルである．双対問題は，これら法線ベクトルの非負結合で $\boldsymbol{c}$ 以上のベクトルを作るとき，$\boldsymbol{b}^\top\boldsymbol{y}$ を最小にするような係数 y_1, y_2 を求める問題になっている．この辺りの話について，より詳しくは文献 [3] を参照していただきたい．

ところで，以上見てきたように，双対問題は少々技巧的にして得られる．2 節で，OR に現れる式には実際的な意味をもつものが多いと述べたが，双対問題に現れる式にも解釈は付けられるだろうか．正直なとこ

ろ，なかなか難しいのであるが，考えてみよう．制約式 (12)，(13) の右辺は単位が円なので，変数 y_1, y_2 は，各原料について，1 ml 当たりの金額換算された「何か」であろう．一つの解釈として，y_1, y_2 はそれぞれ，消費者に転嫁される原料 X と Y の価値のようなものといえるだろうか．消費者はジュースを買うとき，原料の価値，もう少し具体的に言うならば付加価値を含めた原料費を負担するものと考えられる．販売者からすれば，利益が必要なので，それは販売価格と同じか，それ以上である必要があろう．これが，双対問題の制約式で表されている．消費者にとっては，この負担は最小であることが望ましいので，最小化問題となる．議論あるところかと思うが，結論づけるのは難しく，実際，生産計画問題の双対問題については，探せば色々な解釈を見つけられる．それらを参考にしていただきたい．その際，「潜在価格」はキーワードの一つである．

5. 対角化と二次関数

一般に，線形計画問題とは，行列やベクトルを使って，(P') や (D') のように書ける問題をいうのであった．それから明らかなように，記述できる問題には限界がある．特に，最大化や最小化されるものは，変数同士のかけ算や 1 以外のべき乗も含まない，いわゆる一次関数でなければならない．一次関数でないものは非線形計画問題に分類される．この節では，非線形計画問題につながる線形代数学の話をしよう．

「非線形 = 複雑」となるのが一般的なので，「非線形計画問題 = 難しい」という気がするかもしれないが，必ずしもそうではない．解ける最適化問題か否かという観点では，「線形か非線形か」よりも「凸か非凸か」のほうが決定的とされる．

ここで，「凸とは何か」を確認しておこう．ベクトルを変数とし，実数値をとる関数 f が凸であるとは，任意のベクトル $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ と $0 \le \alpha \le 1$ であるような実数 α に対して，

$$\begin{aligned} &\alpha f(\boldsymbol{x}_1) + (1-\alpha) f(\boldsymbol{x}_2) \\ &\qquad \ge f(\alpha \boldsymbol{x}_1 + (1-\alpha)\boldsymbol{x}_2) \end{aligned} \tag{14}$$

が成り立つことをいう．図 2 は，凸関数，すなわち式 (14) を満たす関数の例である．内積を使って定義される関数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{x}$ については，内積の線形性から凸性が直ちに導かれる．実際，

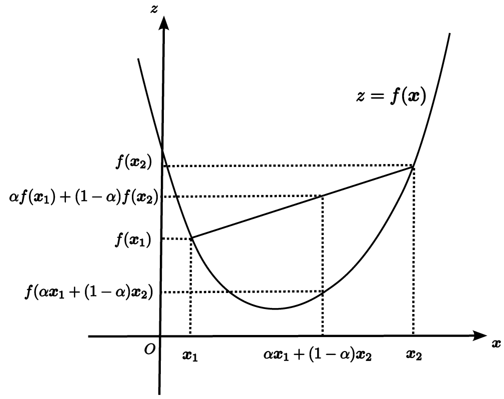

図 2　凸関数の例

$$\begin{aligned} &\alpha f(\boldsymbol{x}_1) + (1-\alpha) f(\boldsymbol{x}_2) \\ &= \alpha \boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{x}_1 + (1-\alpha) \boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{x}_2 \\ &= \boldsymbol{b}^\top (\alpha \boldsymbol{x}_1 + (1-\alpha)\boldsymbol{x}_2) \\ &= f(\alpha \boldsymbol{x}_1 + (1-\alpha)\boldsymbol{x}_2) \end{aligned} \tag{15}$$

のように，式 (14) における不等号を等号で満たす．

さて，1 変数 x の関数 $f(x)$ で凸関数といえば，二次の項 x^2 の係数 a が正の二次関数 $f(x) = ax^2 + bx + c$ である．2 変数以上の関数の場合の二次関数は，一般に，行列 $A, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ を用いて

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \tag{16}$$

と書ける．このとき，行列 A は対称行列，つまり $A^\top = A$ だと思ってよい．なぜなら，たとえば 2 変数で，

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & \frac{b+c}{2} \\ \frac{b+c}{2} & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

が成り立つからである．それでは，2 変数以上の二次関数において，凸か非凸かは何で決まるだろうか．2 変数関数の場合のそれについて考えてみよう．

まず，二次関数が凸か非凸かを議論するとき，式 (16) における $\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}$ の項は式 (15) で見たように不等号に影響しないので不要である．したがって，$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x}$ に話を限定する．まず，行列 A の簡単な例として，

$$A_1 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},\quad A_2 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},\quad A_3 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

を考えてもらうと，関数 f はそれぞれ，

$$f_1(\boldsymbol{x}) = 2x_1^2 + x_2^2,\ f_2(\boldsymbol{x}) = 2x_1^2,\ f_3(\boldsymbol{x}) = 2x_1^2 - x_2^2$$

となる．行列 A_2 のときの f_2 は凸だろう．凸関数の和は凸という事実を用いれば，A_1 のときは凸関数の和であるから f_1 も凸である．一方，A_3 のときは

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix},\ \boldsymbol{x}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},\ \alpha = \frac{1}{2}$$

に対して，式 (14) を確かめてもらえば成り立たないことから，f_3 は非凸であることがわかる．正方行列の左上から右下に向かう対角線上にある成分のことを対角成分と呼ぶ．対角成分以外の成分がすべて 0 である場合，どうやら対角成分がすべて非負であれば凸，負の成分があれば非凸になりそうである．この予想は正しいのであるが，あとでもう少し厳密に表現しよう．

ところで，どんな対称行列 A も適当な直交行列 P（すなわち，$P^{-1} = P^\top$）を下記のようにかけることにより，対角成分以外はすべて 0 となるような行列に変形できるのであった．

$$P^\top A P = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

いわゆる行列の対角化である．対角化により現れる対角成分 λ_1, λ_2 は，行列 A の固有値と呼ばれる値である．もちろんながら，上述の行列 A_1, A_2, A_3 について，対角化により得られる行列は，それら自身である．さらに，対称行列 A に対する対角化は，同じ直交行列 P を用いた $\boldsymbol{x}$ から $\tilde{\boldsymbol{x}}$ への変数変換

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} = P\tilde{\boldsymbol{x}} \iff \tilde{\boldsymbol{x}} = P^\top \boldsymbol{x}$$

を通じて，関数 $f(\boldsymbol{x})$ にも適用できる．すなわち，

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} \\ &= \tilde{\boldsymbol{x}}^\top P^\top A P \tilde{\boldsymbol{x}} \\ &= [\tilde{x}_1 \ \ \tilde{x}_2] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} \\ &= \lambda_1 \tilde{x}_1^2 + \lambda_2 \tilde{x}_2^2 \\ &= \tilde{f}(\tilde{\boldsymbol{x}}) \end{aligned}$$

を得る．

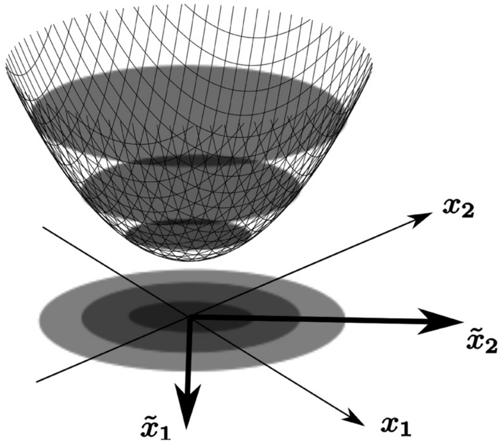

図 3　二次関数の変数変換

これらを踏まえて，関数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x}$ の凸性を論じよう．上の変数変換は，直交行列による変換なので座標軸の回転と反転である．直感的ではあるが，図 3 も参考にすれば，f が凸であれば，$\tilde{f}$ も凸であり，その逆も成り立つことがわかる．したがって，f_1, f_2, f_3 のような関数のみを考えればよいのである．対角成分以外はすべて 0 であるような行列からできる関数 f の凸・非凸については，先に述べたとおりであり，それを対角化を通じて，対称行列全般について換言すれば次のようになる．

> 関数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x}$ が凸であるためには，対称行列 A の固有値がすべて非負であること，すなわち，半正定値行列であることが必要十分である．

これは，3 変数以上の二次関数でも成り立つことである．

以上が二次関数の凸性に関する分類であるが，より一般の関数の（局所的な）凸性について，テイラー展開を通して同様の分類が可能である．再び，2 変数関数 $f(\boldsymbol{x})$ を例に挙げる．適当な仮定の下に，$f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}_0$ の周りで，

$$\begin{aligned} & f(\boldsymbol{x}) \\ &= f(\boldsymbol{x}_0) \\ &\quad + \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}_0) \ \ \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) \right] (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) \\ &\quad + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0)^\top \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\boldsymbol{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\boldsymbol{x}_0) \end{bmatrix} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) \\ &\quad + R(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{17}$$

と書ける．右辺第 3 項に現れた行列は，関数 f の $\boldsymbol{x}_0$ でのヘッセ行列と呼ばれるもので，$H_f(\boldsymbol{x}_0)$ と書く．も

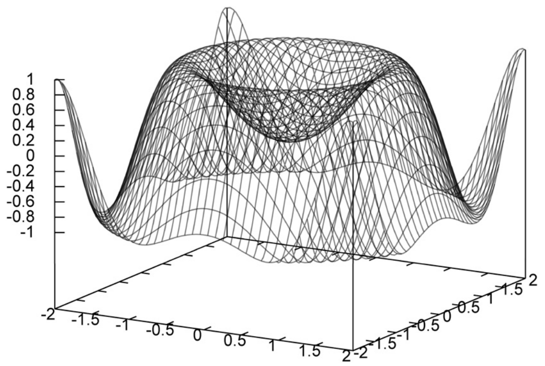

図 4　$f(x,y)=\sin(x^2+y^2)$ のグラフ

し，$f(\boldsymbol{x})$ が式 (16) のような二次関数であれば，ヘッセ行列は $\boldsymbol{x}_0$ によらずに，$H_f(\boldsymbol{x}_0)=2A$ である．さて，式 (17) は，$\boldsymbol{x}$ が $\boldsymbol{x}_0$ に十分近くて剰余項 $R(\boldsymbol{x})$ の影響が無視できるようなら関数 f は $\boldsymbol{x}_0$ の周りで二次関数のように振る舞うということを意味している（もちろん，$R(\boldsymbol{x})$ の影響の仕方は関数次第なので注意が必要である）．ということは，$\boldsymbol{x}_0$ の周りで「凸」であるためには，ヘッセ行列 $H_f(\boldsymbol{x}_0)$ が半正定値であればよい．

一つ例を見てみよう．読みやすさのために，変数は $(x_1,x_2)=(x,y)$ とし，2 変数関数 $f(\boldsymbol{x})=f(x,y)=\sin(x^2+y^2)$ について調べてみよう．

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x}&=2x\cos(x^2+y^2),\\ \frac{\partial f}{\partial x}&=2y\cos(x^2+y^2),\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}&=2\cos(x^2+y^2)-4x^2\sin(x^2+y^2),\\ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}&=2\cos(x^2+y^2)-4y^2\sin(x^2+y^2),\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}&=-4xy\sin(x^2+y^2)\end{aligned}$$

なので，$\boldsymbol{x}_0$ を原点 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{0}$ にとったとき，ヘッセ行列は，

$$H_f(\boldsymbol{0})=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\boldsymbol{0}) & \frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}(\boldsymbol{0})\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}(\boldsymbol{0}) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\boldsymbol{0})\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&0\\0&2\end{bmatrix}$$

となる．すでに対角化されていて，対角成分はいずれも 2 と非負なので，このヘッセ行列は半正定値である．したがって，関数 f は，原点の近くで，「凸っぽい」はずである．図 4 のグラフでそれを確認してもらいたい．

以上はあくまで，$\boldsymbol{x}_0$ の近くでの話であったが，ヘッセ行列の半正定値性は，下記のように（全域的な）凸性について言及する際にも使える．

> （滑らかな）関数 f が凸であるためには，各点でヘッセ行列が半正定値となることが必要十分である．

このようにヘッセ行列は，関数が「凸か非凸か」を議論する際に，重要な役割を果たすものである．問題を実際に解く際にも重要で，ヘッセ行列は，非線形計画問題を解く代表的な方法であるニュートン法などでも利用される．これらの詳細については，専門書 [2] などを参照していただきたい．

6. おわりに

タイトルに関して，「線形代数でわかる OR」が本来ながらも，「OR でわかる線形代数」とした．線形代数学にとって，最適化の理論は発展的内容かもしれないが，背伸びをして少し先の話を学ぶことが，理解を深めることはよくあることかと思う．本稿では，OR で使われる線形代数学を紹介することを第一義に，やや後付けではあるが，第二義的には，それを目指した．そんなこともあって付けたタイトルである．

おわりになってしまったが，釈迦のみなさまには，（読むなら）温かく読んでいただきたい．

参考文献

[1] 池辺淑子，“線形計画問題：物資の輸送を例として，” オペレーションズ・リサーチ：経営の科学，**54**(12), pp. 717–720, 2009.
[2] 田村明久，村松正和，『最適化法』，共立出版，2002.
[3] 鈴木久敏，“双対問題とは?,” オペレーションズ・リサーチ：経営の科学，**32**(6), pp. 309–315, 1987.

