数値計算 試験問題

対象：計算機科学コース・ソフトウェア科学コース・数理科学コース

担当教員：大木 健太郎

2016 年 7 月 28 日 (木曜日 5 時限)

試験中の注意

- 電卓および電卓機能を有する携帯端末の持ち込み可（6 インチ以下のサイズのみ.）
- 教科書・ノート等，およびそれに類する電子ファイルの閲覧は不可.
- 電卓機能および計時機能以外の携帯端末等の利用は不可（とくにネットワーク機能は不可）.
- 試験中であっても教員が許可しないものは使用不可とし，試験終了時刻まで没収する.
- どうしても解けない場合，問題の意味を損なわない程度に簡単にして解いてよい．簡単にする旨を明記して解くこと．この場合，配点の 8 割を上限とし，作成した問題の程度に応じて減点する.
- とくに指定されてない場合，計算過程は 10 進数で 3 桁以上の浮動小数点数表示で行うこと.

1. 対称行列の固有値問題を解く手法に，べき乗法と呼ばれるものがある．これについて，以下の問いに答えよ.
   (a) 次の行列は，べき乗法を単純に用いても，固有値，固有ベクトルが求められない．その理由を述べよ.
   $$B = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{bmatrix}$$
   (b) 次の行列を考える：$A := sI + B$．ただし，$I \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ は単位行列で，$s = 3$ とする．このとき，$x^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}^\top$ とし，
   $$x^{(k)} = Ax^{(k-1)}, \qquad k = 1, 2, \cdots$$
   を $k = 2$ まで計算し，そのときに得られる固有ベクトル x と固有値 $\tilde{\lambda}$ を，10 進 3 桁の浮動小数点数表示で表せ.
   $$\tilde{\lambda} = \frac{x^{(2)\top} x^{(2)}}{x^{(2)\top} x^{(1)}}, \quad x = \frac{x^{(2)}}{\|x^{(2)}\|}$$
   (c) 上で定義した行列 A の固有値 $\tilde{\lambda}$ は，B の固有値 λ に s を加えたものであり，得られる固有ベクトル x は B の固有値 λ に対応する固有ベクトルであることを示せ.
   (d) 一般の実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が，$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ の固有値を持つ場合，べき乗法による収束の速度が $|\lambda_2|/|\lambda_1|$ によって決まることを示せ.

2. 実対称行列の固有値問題の解法に，Jacobi 法がある．以下の問いに答えよ．

(a) Jacobi 法のアルゴリズムを説明せよ．

(b) Jacobi 法は，必ず対角行列に収束する．これを証明せよ．

(c) Jacobi 法の収束は，1 次収束である．これを示せ．

3. 次の係数行列およびベクトルを考える．

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix},\ b = 1$$

これらを用いた連立一次方程式 $Ax = b$ の解 $x \in \mathbb{R}^2$ を求めたい．次の二次関数を最小化することを考え，解を求めよう．

$$S(x) := (Ax - b)^\top (Ax - b)$$

(a) 初期値を $x^{(0)} = [1,\ 1]^\top$ として，最急降下法を用いて解を求める．最急降下法とは，ベクトルの修正の方向 $p^{(k)} = -\nabla S(x)$ を用いて，$S(x^{(k+1)})$ が最小になるように $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$ の α_k を決め，更新する手法である．$a_1 = 3, a_2 = 1$ のとき，$x^{(1)}$ を求めよ（10 進 3 桁の浮動小数点で表すこと）．また，これが $Ax^{(1)} = b$ を満たすかどうか確認せよ．

(b) 目的関数 $S(x)$ に対し，$\epsilon\|x\|^2$ を加えた次の目的関数を考える．

$$S_1(x) := \frac{1}{2}(Ax - b)^\top (Ax - b) + \epsilon \|x\|_2^2$$

ただし，$\epsilon > 0$，$\|\bullet\|_2$ は Euclid ノルムとする．このとき，S_1 を最小にする $x \in \mathbb{R}^2$ を求めよ．また，これが $Ax = b$ の解になるかどうか確認せよ．

(c) $Ax = b$ の制約条件下で，$\frac{1}{2}\|x\|^2$ を最小化する問題を考える．この解を得るには，Lagrange の未定乗数法より，

$$S_2(x, \lambda) := \lambda(Ax - b) + \frac{1}{2}\|x\|_2^2$$

の極値を求めればよい．ただし，$\lambda \in \mathbb{R}$ は Lagrange 未定乗数である．このとき，最適解を求めよ．また，これが $Ax = b$ の解になるかどうか確認せよ．

4. 有限区間 K 上の連続関数 $f(x)$ は，多項式 $p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i x^i$ で，L_2 ノルムの意味でいくらでも良い精度で近似できることが知られている．

(a) n を固定したとき，もっとも良い近似を与える係数を求める問題が連立一次方程式になることを示せ．

(b) 上で求めた連立一次方程式は，解きにくい問題に陥りやすいことを示し，その対策を述べよ．

配点と採点時の注意

- 配点：
  - 1 (a) 5 点，　1 (b) 5 点，　1 (c) 5 点，　1 (d) 5 点
  - 2 (a) 10 点，　2 (b) 10 点，　1 (c) 10 点，
  - 3 (a) 10 点，　3 (b) 10 点，　1 (c) 10 点，
  - 4 (a) 10 点，　4 (b) 10 点
- 計算過程から明らかに計算ミス，あるいは書き間違いと分かるは，減点しない．

得点率

受講者数 51 名中，試験を受けた人（24 名）の平均点は，44 点で，各問題の得点率は表 1 の通り．最高点は 100 点（1 名）．受験者のうち，試験のみで合格点 (60 点) に達した学生は，6 名（25%）．

表 1　各問題の得点率（10 進数 2 桁）と配点

問題	問 1 (a)	(b)	(c)	(d)	問 2 (a)	(b)	(c)	問 3 (a)	(b)	(c)	問 4 (a)	(b)
得点率	0.77	0.91	0.6	0.28	0.65	0.36	0.23	0.4	0.2	0.23	0.56	0.47
配点	5	5	5	5	10	10	10	10	10	10	10	10

解答例

1.（a）行列の対角成分の和は，固有値の和に一致する．行列 B の対角成分の和は零になり，また実対称行列であることから，固有値は実数である．これより，固有値はある正の実数 λ を用いて $\pm\lambda$ となり，絶対値を取ると同じ大きさになる．べき乗法は，

$$x^{(k)} = Bx^{(k-1)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

で更新するアルゴリズムであり，また任意のベクトル $y \in \mathbb{R}^2$ が B の正規化された固有ベクトル $u_1, u_2 \in \mathbb{R}^2$ を用いて

$$y = c_1u_1 + c_2u_2$$

と展開できるので，$x^{(0)}$ も同様に展開して考えると，

$$Bx^{(0)} = c_1\lambda u_1 - c_2\lambda u_2 = \lambda\left(c_1u_1 + (-1)c_2u_2\right)$$

となる．すなわち，べき乗法を続けても

$$x^{(k)} = \lambda^k\left(c_1u_1 + (-1)^kc_2u_2\right)$$

が得られるのみであり，固有値の近似値の計算法をそのまま用いたとして，

$$\frac{x^{(n)\top}x^{(n)}}{x^{(n)\top}x^{(n-1)}} = \lambda\frac{c_1^2 + c_2^2}{c_1^2 - c_2^2}$$

となる．ここで u_1 と u_2 の直交性を用いた．これは初期ベクトルの選び方に完全に依存し，固有値を返さない．また，固有ベクトルも u_2 方向成分の正負が変わるのみで，どちらかの固有ベクトル方向が強調されていくということはない．

【補足】

ただし，考えている行列に同じ大きさの固有値があることが "事前に" 分かっている場合は，別である．とくに 2×2 の行列では，同じ大きさの固有値が 2 つあることがわかっているので，

$$\frac{x^{(n)\top}x^{(n)}}{x^{(n)\top}x^{(n-2)}} = \lambda^2\frac{c_1^2 + c_2^2}{c_1^2 + c_2^2} = \lambda^2$$

となり，固有値は正負両方あるため，行列 B の場合はここから固有値が計算できる．また，固有ベクトルも，固有値が分かれば，

$$u_1 = \frac{\lambda x^{(0)} + x^{(1)}}{\|\lambda x^{(0)} + x^{(1)}\|}, \quad u_2 = \frac{\lambda x^{(0)} - x^{(1)}}{\|\lambda x^{(0)} - x^{(1)}\|}$$

となり，求めることができる．

（b）重複した固有値に対してべき乗法を使いたい場合に，固有値シフトを用いる手法がある．

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 4 \\ 4 & 0 \end{bmatrix}$$

より，べき乗法の定義通りに計算すると，

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 10 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} 76 \\ 40 \end{bmatrix}$$

を得る．これより，

$$\tilde{\lambda} \simeq 8.02, \quad x \simeq \begin{bmatrix} 0.885 \\ 0.466 \end{bmatrix}$$

を得る．A の固有値は，8 と -2 なので，2 回の反復でかなり近い数字を得ることができた．

【補足】

固有値の絶対値の大きさが $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ で並んでいる場合，べき乗法の反復の速さは，$|\lambda_2/\lambda_1|$ で決まる．例えば，$s = 5$ の場合では，1 回で固有ベクトルが求められる．

（c）x が B の固有値 λ の固有ベクトルであるとする．このとき，

$$Ax = sx + Bx = (s + \lambda)x$$

となるので，x は A の固有ベクトルでもあり，また対応する固有値は $\lambda + s$ である．

（d）対称行列 A の固有値に $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ なる順序がある場合を考えるさいは，2 つ目に大きな固有値以降が重根でもよい．$\lambda_2 = 0$ の場合は自明なので，以下では，$\lambda_2 \neq 0$ の場合のみを考える．それぞれの固有値に対応する固有ベクトルを u_i，$i = 1, 2, \ldots, n$ とし，重根がある場合でも直交するようにとると，これは直交基底となる（対称行列の場合，重根があっても直交基底がとれることに注意）．このとき，任意のゼロでないベクトル $x \in \mathbb{R}^n$ は，この直交基底を用いて

$$x = \sum_{i=1}^{n} c_i u_i$$

と分解できる．この x がどの固有ベクトルとも一致しない場合，x を初期値 $x^{(0)} = x$ としてべき乗法を用いると，

$$\begin{aligned} x^{(k)} =& A^k x^{(0)} \\ =& |\lambda_1|^k c_1 \left(\frac{\lambda_1}{|\lambda_1|}\right)^k u_1 + \sum_{i=2}^{n} c_i \left(\frac{\lambda_i}{|\lambda_1|}\right)^k \\ =& |\lambda_1|^k c_1 \left(\frac{\lambda_1}{|\lambda_1|}\right)^k u_1 + |\lambda_1|^k \sum_{i=2}^{n} c_i \left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|^k \left(\frac{\lambda_i}{|\lambda_i|}\right)^k \end{aligned}$$

となる．ただし，$|\lambda_n| > 0$ とした（$\lambda_n = 0$ ならば 1 ステップでゼロになるので，以下の議論には関係ない）．ここで $|\lambda_1| > |\lambda_i|, i = 2, 3, \ldots, n$ より，$|\lambda_i|/|\lambda_1| < 1$，$i = 2, \ldots, n$ であるので，k が大きくなるにつれ，λ_1 を除いた各固有値の固有ベクトルの係数は小さくなっていく．しかし，

$$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| \geq \left|\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right| \geq \cdots \geq \left|\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right|$$

であるので，収束が最も遅くなるのは $|\lambda_2|/|\lambda_1|$ の項である．よって，べき乗法の収束の速度は，$|\lambda_2|/|\lambda_1|$ で決まる．

2. (a) 固有値問題における Jacobi 法とは，Givens 変換と呼ばれる，特定の非対角要素を 0 にする直交行列による変換を繰り返すことで，対称行列を対角化する手法である．このとき，対角化された行列の対角成分には，元の対称行列の固有値が並んでおり，直交行列の積が，対応する固有ベクトルを並べたものになっている．具体的には，行列 A の p, q 行および p, q 列に対して回転操作を与える行列

$$P = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos(\phi) & \cdots & \sin(\phi) & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -\sin(\phi) & \cdots & \cos(\phi) & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

を用いて，$A \mapsto P^\top AP$ により $(P^\top AP)_{pq} = (P^\top AP)_{qp} = 0$ となるよう，ϕ を選び，(p, q) を変えてこの操作を繰り返すことで A を対角化する方法が，Jacobi 法である．アルゴリズムを $A^{(k)} = P_k^\top A^{(k-1)} P_k$ で表すと，

$$A^{(k)} = P_k^\top P_{k-1}^\top \dots P_1^\top AP_1 \dots P_{k-1}P_k$$

となり，$Q = \lim_{k\to\infty} P_1P_2 \dots P_k$ が A の固有ベクトルを並べたものと等しくなる．

(b) $B = P^\top AP$ とする．行列の非対角成分の二乗和を

$$F = \sum_{i\neq j} a_{ij}^2, \quad \tilde{F} = \sum_{i\neq j} (P^\top AP)_{ij}^2 = \sum_{i\neq j} b_{ij}^2$$

とする．ここで B の要素は，

$$\begin{aligned} b_{ij} =& a_{ij},\ (i, j \neq q, p), \\ b_{pj} =& b_{jp} = a_{pj}\cos(\phi) - a_{pj}\sin(\phi),\ (j \neq q, p) \\ b_{qj} =& b_{jq} = a_{qj}\cos(\phi) + a_{qj}\sin(\phi),\ (j \neq q, p) \\ b_{pp} =& \frac{a_{pp} + a_{qq}}{2} - \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\cos(2\phi) - a_{pq}\sin(2\phi), \\ b_{qq} =& \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2} - \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\cos(2\phi) + a_{pq}\sin(2\phi), \\ b_{pq} =& b_{qp} = 0 \end{aligned}$$

である．

$$\begin{bmatrix} b_{pj} \\ b_{qj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{pj} \\ a_{qj} \end{bmatrix}$$

より，

$$\begin{aligned} b_{pj}^2 + b_{qj}^2 = \begin{bmatrix} b_{pj} & b_{qj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{pj} \\ b_{qj} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} a_{pj} & a_{qj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{pj} \\ a_{qj} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_{pj} & a_{qj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{pj} \\ a_{qj} \end{bmatrix} = a_{pj}^2 + a_{qj}^2 \end{aligned}$$

である．したがって，

$$
\begin{aligned}
\tilde{F} - F =& \sum_{i \neq j} (b_{ij}^2 - a_{ij}^2) \\
=& \underbrace{\sum_{i \neq j,\ i,j \neq p,q} (b_{ij}^2 - a_{ij}^2)}_{=0} + 2 \underbrace{\sum_{j \neq p,q} (b_{pj}^2 + b_{qj}^2 - a_{pj}^2 - a_{qj}^2)}_{=0} + 2(\underbrace{b_{pq}^2}_{=0} - a_{pq}^2) \\
=& -2a_{pq}^2
\end{aligned}
$$

を得る．したがって，$a_{pq} \neq 0$ となる添え字を選び続ければ，対角行列に収束する．

（c）$A^{(k)} = P_k A^{(k-1)} P_k$ の非対角成分の二乗の総和を F_k で表すと，先の問題の通り，

$$
F_k - F_{k-1} = -2(a_{pq}^{(k-1)})^2
$$

である．ここで $a_{pq}^{(k-1)}$ が絶対値の意味で非対角成分の最大値であるとすると，

$$
F_{k-1} = \sum_{i \neq j} (a_{ij}^{(k-1)})^2 \leq \sum_{i \neq j} (a_{pq}^{(k-1)})^2 = n(n-1)(a_{pq}^{(k-1)})^2
$$

より，

$$
F_{k-1} - F_k = 2(a_{pq}^{(k-1)})^2 \geq \frac{2}{n(n-1)} F_{k-1}
$$

を得る．式変形して整理すれば，

$$
F_k \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-2)}\right) F_{k-1}
$$

であり，1 次収束する．

3. (b) および (c) で $(a_1,\ a_2) = (3,\ 1)$ を用いて数値的に求めた場合は，問題を変更したとみなした．$(a_1,\ a_2) = (3,\ 1)$ を用いても，結果を解析的に求めた場合は，減点しない．

（a）この問題は，初期値に寄らずに $Ax = b$ を満たす解へと収束する．まず，修正の方向は

$$
p^{(0)} = -\nabla S(x) = -2A^\top (Ax - b) \left(= -2(a_1 x_1 + a_2 x_2 - b) \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \right)
$$

となる．また，$S(x^{(1)})$ は α_1 に対して 2 次関数になるので，α_0 で微分して零になる点が最小になる．このとき，

$$
\frac{\partial S(x^{(1)})}{\partial \alpha_0} = 2Ap^{(0)} \left(\alpha_0 A p^{(0)} + Ax^{(0)} - b\right) = 0
$$

より，

$$
\alpha_0 = -\frac{Ax^{(0)} - b}{Ap^{(0)}} = \frac{1}{2AA^\top} \left(= \frac{1}{2(a_1^2 + a_2^2)} \right)
$$

となる．よって

$$
\begin{aligned}
x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 p^{(0)} =& x^{(0)} - \frac{1}{AA^\top} \left(A^\top A x^{(0)} - A^\top b\right) \\
=& \left(I - \frac{A^\top A}{AA^\top}\right) x^{(0)} + \frac{b}{AA^\top} A^\top
\end{aligned}
$$

を得る．この $x^{(1)}$ が $Ax=b$ の解となっているかどうか，確認しよう．

$$\begin{aligned}Ax^{(1)} =& A\left(I-\frac{A^\top A}{AA^\top}\right)x^{(0)}+A\frac{b}{AA^\top}A^\top\\=&b\end{aligned}$$

となるので，$Ax^{(1)}=b$ となることが確認できた．

（b）$S_1(x)$ を，x に関して平方完成すると，

$$\begin{aligned}S_1(x) =& \frac{1}{2}x^\top A^\top Ax - Axb + \frac{1}{2}b^2 + \epsilon x^\top x\\=&\frac{1}{2}x^\top\left(A^\top A+2\epsilon I\right)x - Axb + \frac{1}{2}b^2\\=&\frac{1}{2}\left(\left(A^\top A+2\epsilon I\right)x - bA^\top\right)\left(A^\top A+2\epsilon I\right)^{-1}\left(\left(A^\top A+2\epsilon I\right)x - bA^\top\right)\\&-\frac{b^2}{2}A\left(A^\top A+2\epsilon I\right)^{-1}A^\top+\frac{1}{2}b^2\end{aligned}$$

を得る．これを最小にする x は，

$$\left(A^\top A+2\epsilon I\right)x=bA^\top$$

であり，

$$x=b\left(A^\top A+2\epsilon I\right)^{-1}A^\top$$

が解である．これは，$Ax=b$ を満たさない；

$$\begin{aligned}Ax =& bA\left(A^\top A+2\epsilon I\right)^{-1}A^\top\\=&bA\frac{1}{2\epsilon(a_1^2+a_2^2)+4\epsilon^2}\begin{bmatrix}a_2^2+2\epsilon & -a_1a_2\\-a_1a_2 & a_1^2+2\epsilon\end{bmatrix}A^\top\\=&b\frac{1}{2\epsilon(a_1^2+a_2^2)+4\epsilon^2}(2\epsilon(a_1^2+a_2^2))\\=&b\frac{a_1^2+a_2^2}{a_1^2+a_2^2+2\epsilon}\neq b\end{aligned}$$

しかし，$\epsilon\to 0$ の極限で，$Ax=b$ の解に漸近する．

（c）それぞれの変数で偏微分する．

$$\frac{\partial S(x,\lambda)}{\partial x}=\lambda A^\top + x = 0,\quad \frac{\partial S(x,\lambda)}{\partial\lambda}=Ax-b=0$$

よって，

$$x=\lambda A^\top$$

であり，これを 2 つ目の式に代入すると，

$$\lambda=\frac{b}{AA^\top}$$

を得るので，解は次で表される．

$$x=\frac{b}{AA^\top}A^\top$$

これは，直接計算することで $Ax=b$ の解となっていることが確かめられる（この解は，(a) で初期ベクトルを 0 ベクトルにしたときの解と一致する）．

4.（a）多項式 $p(x) := \sum_{n=0}^{n} \alpha_i x^i$ とする単項式 $p_i(x) = x^i$, $i = 0, 1, \ldots, n$ を用いると，

$$p(x) = \begin{bmatrix} p_0(x) & p_1(x) & \ldots & p_n(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}$$

と定義できる．関数 g, h の内積を

$$\langle h, g \rangle := \int_K h(x) g(x) dx$$

で定めると，問題は f を L_2 ノルムの意味で最小化する α_i を求める次の問題へ帰着される．

$$\min_{\alpha_i \in \mathbb{R},\ i=0,1,2} \int_K |f(x) - p(x)|^2 dx$$

有限区間 K を $K = [a, b]$ とおいてもよい．くと，

$$\begin{aligned} \int_K |f(x) - p(x)|^2 dx =& \langle f - p, f - p \rangle \\ =& \langle f - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i p_i, f - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i p_i \rangle \\ =& \langle f, f \rangle - 2 \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle f, p_i \rangle + \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j \langle p_i, p_j \rangle \end{aligned}$$

となる．ここで

$$A := \begin{bmatrix} \langle p_0, p_0 \rangle & \langle p_0, p_1 \rangle & \ldots & \langle p_0, p_n \rangle \\ \langle p_1, p_0 \rangle & \langle p_1, p_1 \rangle & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \langle p_n, p_0 \rangle & \ldots & & \langle p_n, p_n \rangle \end{bmatrix},\ y := \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix},\ b := \begin{bmatrix} \langle p_0, f \rangle \\ \langle p_1, f \rangle \\ \vdots \\ \langle p_n, f \rangle \end{bmatrix}$$

とおくと，

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j \langle p_i, p_j \rangle - 2 \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle f, p_i \rangle =& y^\top A y - 2 y^\top b \\ =& (Ay - b)^\top A^{-1} (Ay - b) - b^\top A^{-1} b \end{aligned}$$

より，パラメータ α_i（ベクトル y）を平方完成によりくくりだせる．ここで，A は正則であることに注意されたい．したがって，解くべき問題は

$$\min_{y \in \mathbb{R}^{n+1}} (Ay - b)^\top A^{-1} (Ay - b)$$

となり，その最小値は $Ay = b$ の解である．

（b）n を大きくしていくと，A の n 行ベクトルと $n+1$ 行ベクトルがほぼ同じ方向を向いてしまって条件数が悪くなってしまい，解きにくい連立一次方程式になってしまう．対策としては，直交多項式を用いるなど，A がなるべく対角行列になるように基底関数の取り方を工夫すればよい．