第 4 章

連立一次方程式と掃き出し法

順問題と逆問題

世の中には、「ベクトル $\boldsymbol{x}$ を入力するとベクトル $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ が出力される」という形で表せる対象がたくさんある

この $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ という式は、

> 原因 $\boldsymbol{x}$ を知って結果 $\boldsymbol{y}$ を予測する

という場面（順問題）でそのまま使うことができる

一方、次のような

> 結果 $\boldsymbol{y}$ を知って原因 $\boldsymbol{x}$ を推定する

という問題（逆問題）を考えなければいけない場合もある

$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ という式（結果）から $\boldsymbol{x}$（原因）を求めるという問題は、連立一次方程式を解くということに他ならない

連立一次方程式の行列表記

未知数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ に関する連立方程式として

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}\ x_2 + \cdots + \ a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}\ x_2 + \cdots + \ a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \qquad \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

を考える

a_{ij} などは与えられた定数であり、係数と呼ばれる

i 番目の式の x_j の係数を a_{ij} と書いている

ここで、係数だけを集めて行列を作る

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

すると、先ほどの連立方程式は、ベクトル形で

$$x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + x_n\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{b}$$

と書ける

また、n 個の未知数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ からベクトルを作る

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

すると、ベクトル形の方程式の左辺のベクトルを、行列 A とベクトル $\boldsymbol{x}$ の積と考えて、$A\boldsymbol{x}$ と表記できる

こうして、もとの連立一次方程式は、行列形の方程式

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

に書き換えられる

行基本変形

連立一次方程式を行列によってとり扱うとき、1 つ 1 つの方程式は行列の行によって表されている

そこで、連立方程式の式変形に対応する操作として、行列の行に関する次のような操作（変形）を考える

def - 行基本変形

行列への次の 3 種類の操作を**行基本変形**という

i. ある行の定数倍を他の行に加える
ii. ある行に 0 でない数をかける
iii. 2 つの行を交換する

拡大係数行列

次のような連立一次方程式を考える

$$\begin{cases} x+y = 3 \\ -x + z = -1 \\ -2x - y + 2z = -4 \end{cases}$$

0 や 1 の係数を省略せずに書くと、

$$\begin{cases} 1x + 1y + 0z = 3 \\ -1x + 0y + 1z = -1 \\ -2x - 1y + 2z = -4 \end{cases}$$

となるので、これを行列で表すと、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ -2 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -4 \end{pmatrix}$$

左辺の行列は、連立方程式の係数だけを取り出した行列になっているので、係数行列と呼ばれる

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ -2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

また、右辺のベクトルは定数項をまとめたものになっているので、定数項ベクトルと呼ばれる

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -4 \end{pmatrix}$$

連立方程式の解を求める過程の式変形（行基本変形）によって、係数行列 A と定数項ベクトル $\boldsymbol{b}$ の成分が変化していく

そこで、変形の過程で変化する数（操作の対象）を、次のように 1 つの行列 $(A \mid \boldsymbol{b})$ としてまとめてしまおう

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 2 & -4 \end{array}\right)$$

このように、係数行列と定数項ベクトルを 1 つの行列としてまとめたものを拡大係数行列という

拡大係数行列に対して行基本変形を繰り返し行うことで、連立一次方程式の解を求めることができる

拡大係数行列の変形と単位行列

連立方程式に対する式変形の結果として得られる形にはさまざまなパターンがあるが、まずは最も単純な場合を考える

たとえば、最終的に次のような形になれば、解 x, y, z が求まったことになる（★ はそれぞれ異なる数でよい）

$$\begin{cases} x & & & = \bigstar \\ & y & & = \bigstar \\ & & z & = \bigstar \end{cases}$$

この理想形を拡大係数行列で表すと、次のようになる

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & \bigstar \\ 0 & 1 & 0 & \bigstar \\ 0 & 0 & 1 & \bigstar \end{array}\right)$$

つまり、$(A \mid \boldsymbol{b})$ という拡大係数行列に対して、$(E \mid \bigstar)$ という形を目指して行基本変形を施すことで、連立方程式を解くことができる

掃き出し法

具体的には、次のような手順によって、拡大係数行列を変形していく

ここで述べる手順は掃き出し法と呼ばれるものである

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 2 & -4 \end{array}\right) \end{array} \begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{array}$$

$$\begin{cases} x + y & = 3 \\ -x \quad + \ z & = -1 \\ -2x - y + 2z & = -4 \end{cases}$$

まず、$(1, 1)$ 成分より下の成分が 0 になるように基本変形を適用する

このことを、「$(1, 1)$ 成分を要にして第 1 列を掃き出す」と表現する

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ -2 & -1 & 2 & -4 \end{array}\right) R_2 + R_1$$

$$\begin{cases} x + y & = 3 \\ y + \ z & = 2 \\ -2x - y + 2z & = -4 \end{cases}$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 2 \end{array}\right) R_3 + 2R_1 \qquad \begin{cases} x + y = 3 \\ y + z = 2 \\ y + 2z = 2 \end{cases}$$

今度は、$(2, 2)$ 成分を要にして第 2 列を掃き出す

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right) R_3 - R_2 \qquad \begin{cases} x + y = 3 \\ y + z = 2 \\ z = 0 \end{cases}$$

これで、対角成分がすべて 1 になった

最後に、対角成分以外の成分を 0 にするための行基本変形を施す

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right) R_2 - R_3 \qquad \begin{cases} x + y = 3 \\ y = 2 \\ z = 0 \end{cases}$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right) R_1 - R_2 \qquad \begin{cases} x = 1 \\ y = 2 \\ z = 0 \end{cases}$$

拡大係数行列の変形と上三角形

ところで、先ほどの例では、対角成分以外の成分を 0 にしなくても、対角成分がすべて 1 になった時点で、解は十分に読み取れる形になっている

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right) \qquad \begin{cases} x + y = 3 \\ y + z = 2 \\ z = 0 \end{cases}$$

この時点でも、$z=0$ を代入すれば $y=2$ が得られ、さらに $y=2$ を代入すれば $x=1$ が得られることがすぐにわかる

このとき、係数行列は上三角行列になっているので、この形の方程式は上三角形と呼ばれる

上三角形を目指すことが、掃き出し法の基本方針である
しかし、いつでも上三角形に変形できるわけではない。

掃き出し法によって、係数行列を単位行列に変形できない場合もある。

- 解が一意に定まらない場合（解が無限個ある場合）
- 解が存在しない場合

解が無限個ある場合

まずは、解が一意に定まらない場合を見てみよう

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \end{array}\right)\begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ 2x + y = 2 \\ x - z = 1 \end{cases}$$

$(1,1)$ 成分を要にして第 1 列を掃き出す：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 3 & 6 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \end{array}\right)\begin{array}{l} \\ R_2 - 2R_1 \\ R_3 - R_1 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ 3y + 6z = 0 \\ y + 2z = 0 \end{cases}$$

$(2,2)$ 成分を 1 にする：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \end{array}\right)\begin{array}{l} \\ \frac{1}{3}R_2 \\ \\ \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ y + 2z = 0 \\ y + 2z = 0 \end{cases}$$

$(2,2)$ 成分を要にして第 2 列を掃き出す：

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \\ \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ R_3 - R_2 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ y + 2z = 0 \\ 0 = 0 \end{cases}$$

1 を対角成分として持つ列の対角成分以外を 0 にする：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} R_1 - R_2 \\ \\ \\ \end{array} \qquad \begin{cases} x \qquad - z = 1 \\ y + 2z = 0 \\ 0 = 0 \end{cases}$$

この連立方程式は、実質的に 2 本の方程式しか持たないことがわかる

$$\begin{cases} x \qquad - z = 1 \\ y + 2z = 0 \end{cases}$$

x, y について解くと、

$$\begin{cases} x = z + 1 \\ y = -2z \end{cases}$$

となるので、z に任意の数 $z = \alpha$ を与えて解が得られる

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + 1 \\ -2\alpha \\ \alpha \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解が存在しない場合

次のような連立一次方程式を考える

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \end{array}\right) \begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ 2x + y \qquad = 1 \\ x \qquad - z = 1 \end{cases}$$

$(1, 1)$ 成分を要にして第 1 列を掃き出す：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 3 & 6 & -1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ R_2 - 2R_1 \\ R_3 - R_1 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ \phantom{x-{}} 3y + 6z = -1 \\ \phantom{x-3{}} y + 2z = 0 \end{cases}$$

$(2,2)$ 成分を 1 にするため、第 2 行と第 3 行を入れ替える：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 6 & -1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ R_3 \\ R_2 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ \phantom{x-3{}} y + 2z = 0 \\ \phantom{x-{}} 3y + 6z = -1 \end{cases}$$

$(2,2)$ 成分を要にして第 2 列を掃き出す：

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \\ R_3 - 3R_2 \end{array} \qquad \begin{cases} x - y - 3z = 1 \\ \phantom{x-{}} y + 2z = 0 \\ 0 = -1 \end{cases}$$

$0 = -1$ という式が現れたので、この連立方程式には解が存在しない

掃き出し法の段階ごとに得られる形

ここまで見てきた、掃き出し法による連立方程式の解法をまとめると、大まかには次のような手順を踏むことになる

1. 左の列から順に、対角成分を 1 にする
2. 対角成分が 1 となっている列の対角成分以外を 0 にする

手順 1 で得られる形を**行階段行列**と呼び、手順 2 で得られる形を**既約行階段行列**と呼ぶ

ただし、$0 = -1$ が現れたときのように、手順 1（行階段行列への変形）だけで解が存在するかはわかってしまう

解の存在以外にも、行階段行列に変形した時点で読み取れる情報はさまざまある

行階段行列

掃き出し法では、あるステップで下の成分がすべて 0 になって、

$$
\begin{pmatrix}
\spadesuit & * & * & * & * & * & * & * \\
0 & \spadesuit & * & * & * & * & * & * \\
0 & 0 & \spadesuit & * & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & \spadesuit & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

のような形になるのが典型例である。

ここで、0 でない成分を $\spadesuit$ で、任意の値をもつ成分を $*$ で表している。

零行

一般には、成分が 0 ばかりの行が下にくる。そのような行を零行という。

零行が現れない場合もあるし、複数現れる場合もある。

主成分

零行でない行に対して、一番左の 0 でない成分 $\spadesuit$ を主成分あるいは行に関する要と呼ぶ。

行階段行列の一般形

先ほど示した形では、行の主成分 $\spadesuit$ は左上から斜め右下 45° 方向にまっすぐ並んでいるが、一般にはそうできるとは限らない。

しかし、次のような形には必ずできる。

$$
\begin{pmatrix}
0 & \spadesuit & * & * & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & \spadesuit & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & 0 & \spadesuit & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \spadesuit \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

def - 行階段行列

次の条件を満たす行列を行階段行列という。

- 零行でない行の主成分が、下の行ほど 1 つ以上右にある
- 零行がある場合は、まとめてすべて下にある

どんな行列も、行基本変形の繰り返しで行階段行列にできる。

既約行階段行列

必要に応じて、行階段行列をさらに変形して次のような形にする

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & * & 0 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

行の主成分はすべて 1 で、主成分のある列の主成分以外の成分はすべて 0 である

この形を簡約化された行階段行列あるいは既約行階段行列と呼ぶ

与えられた行列 A に対して、行基本変形の繰り返しで得られる行階段行列は一意的ではないが、既約行階段行列は一意的であることを後に議論する

そこで、既約行階段行列を $A_\circ$ と書くことにする

変形の過程を

$$\text{行列 } A \longrightarrow \text{行階段行列} \longrightarrow \text{簡約化された行階段行列 } A_\circ$$

と 2 段階にわけるのは、計算の効率以上の意味がある

行階段行列にするところまでで解決する問題（解の存在と一意性など）もあるからである