情報処理 I：ガウス・ジョルダン 改訂版　松谷茂樹

2015.7.8

一次方程式とは

与えられた $n \times n$ 行列 A と n 次元ベクトル b,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \text{ に対し } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

に関する方程式

$$Ax = b$$

を解くことである．
つまり，n 次連立一次方程式

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

を満たす x_i を決定することである。
$A^{-1}A = E$ となる A^{-1} が存在した場合 $Ax = b$ を解くとは A^{-1} を両辺に掛け，

$$x = A^{-1}b$$

とすることである。つまり，**一次方程式を解くとは，逆行列を決定することである．**

但し，E は単位行列である：$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$

一次方程式 $n = 2$ の場合

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ と $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ に対し，$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ に関する方程式 $Ax = b$ を解くこと．
$Ax = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{pmatrix}$ より $Ax = b$ は
$\begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ に一致．
$Ax = b$ を解くとは $x = A^{-1}b$ により

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|}\begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} \text{ を利用して}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{|A|}\begin{pmatrix} a_{22}b_1 - a_{12}b_2 \\ -a_{21}b_1 + a_{11}b_2 \end{pmatrix}$$

一次方程式 $n = 3$ の場合

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ と $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$ に対し $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ に関する方程式 $Ax = b$ を解くこと．
$|A| = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{13}a_{21}a_{32} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33}$ より A^{-1} は以下のように書ける：
$A^{-1} = \frac{1}{|A|} \times$

$$\begin{pmatrix} a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} & -(a_{12}a_{33} - a_{13}a_{32}) & a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22} \\ -(a_{21}a_{33} - a_{23}a_{31}) & a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31} & -(a_{11}a_{23} - a_{13}a_{21}) \\ a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31} & -(a_{11}a_{32} - a_{12}a_{31}) & a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \end{pmatrix}.$$

これにより $x = A^{-1}b$ は解ける

一次方程式 $n = 4$ の場合

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$ と $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$ に対し、$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$ に関する方程式 $Ax = b$ を解くことである．
４次元以上では，逆行列を解く事は困難である．

一次方程式を解く鍵

$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{23} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{24} \end{pmatrix}$ の形の行列を**上三角行列**と呼ぶ．
特に対角成分が $a_{ii} \neq 0$ を仮定する．

A が上三角行列（$a_{ii} \neq 0$）のとき $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$ とにより $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$ に関する方程式 $Ax = b$ は

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +a_{13}x_3 & +a_{14}x_4 & = & b_1 \\ & a_{12}x_2 & +a_{23}x_3 & +a_{24}x_4 & = & b_2 \\ & & a_{33}x_3 & +a_{34}x_4 & = & b_3 \\ & & & a_{44}x_4 & = & b_4 \end{array}$$

となる。**これは解くことが可能である．**４次元以上でも上三角行列にすれば一次方程式は解く事が可能である．

ガウスの消去法 $n = 4$

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$ と $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$，に対し，拡張行列

$$(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{pmatrix}$$

を「**一次方程式の解として等価な**」を上三角行列

$(C|d) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & d_1 \\ 0 & c_{22} & c_{23} & c_{24} & d_2 \\ 0 & 0 & c_{33} & c_{34} & d_3 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & d_4 \end{pmatrix}$ に変形するアルゴリズム。

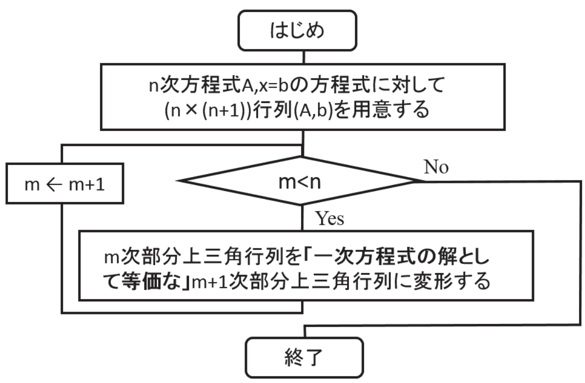
A は正則とし，$n \times (n+1)$ 行列 $(C|d)$ が上三角行列とは $n \times n$ 行列部 C が上三角行列となることである。

ガウスの消去法（直接法）

$n \times (n+1)$ 行列 $C =$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & a_{1,m+1} & a_{1,m+2} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2m} & a_{2,m+1} & a_{2,m+2} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ 0 & 0 & \cdots & a_{3m} & a_{3,m+1} & a_{3,m+2} & \cdots & a_{3n} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & a_{mm} & a_{m,m+1} & a_{m,m+2} & \cdots & a_{mn} & b_m \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{m+1,m+1} & a_{m+1,m+2} & \cdots & a_{m+1,n} & b_{m+1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{m+2,m+1} & a_{m+2,m+2} & \cdots & a_{m+2,n} & b_{m+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,m+1} & a_{n,m+1} & \cdots & a_{n,n} & b_n \end{pmatrix}$$

を m 次部分上三角行列と呼ぶこととする。但し、成分は a_{ij} とも $a_{i,j}$ とも記している。$a_{ij} = a_{i,j}$。
ガウスの消去法は m 次部分上三角行列を「**一次方程式の解として等価な**」$m+1$ 次部分上三角行列に変形することを繰り返す方法。
（ガウスの消去法の場合、その後、代入を行う過程があるがフローではそれは略した）

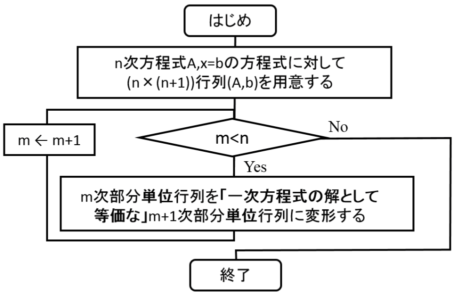


ガウス・ジョルダン法（直接法）

$n\times(n+1)$ 行列 $C=$

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & a_{1,m+1} & a_{1,m+2} & \cdots & a_{1n} & b_1\\
0 & 1 & \cdots & 0 & a_{2,m+1} & a_{2,m+2} & \cdots & a_{2n} & b_2\\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{3,m+1} & a_{3,m+2} & \cdots & a_{3n} & b_3\\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\
0 & 0 & \cdots & 1 & a_{m,m+1} & a_{m,m+2} & \cdots & a_{mn} & b_m\\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{m+1,m+1} & a_{m+1,m+2} & \cdots & a_{m+1,n} & b_{m+1}\\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{m+2,m+1} & a_{m+2,m+2} & \cdots & a_{m+2,n} & b_{m+2}\\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,m+1} & a_{n,m+1} & \cdots & a_{n,n} & b_{m+1}
\end{pmatrix}$$

を m 次部分単位行列と呼ぶこととする。(一般的な呼び方ではない）
ガウス・ジョルダン法は m 次部分単位行列を「**一次方程式の解として等価な**」$m+1$ 次部分単位行列に変形することを繰り返す方法。



一次方程式 $n=3$ の場合の具体例

$A=\begin{pmatrix}2&1&3\\1&3&2\\3&2&1\end{pmatrix}$ と $b=\begin{pmatrix}13\\13\\10\end{pmatrix}$ に対し、$x=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$ に関する方程式 $Ax=b$ を解く.

$Ax=b$ つまり、$\begin{pmatrix}2&1&3\\1&3&2\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}13\\13\\10\end{pmatrix}$ に対して、

ステップ１：

両辺に左から $\begin{pmatrix}1/2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると、つまり

$\begin{pmatrix}1/2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&3\\1&3&2\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1/2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}13\\13\\10\end{pmatrix}$ は
$\begin{pmatrix}1&1/2&3/2\\1&3&2\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}13/2\\13\\10\end{pmatrix}$ となる。

ステップ２：

この両辺に左から $\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-3&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると、つまり

$\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-3&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1/2&3/2\\1&3&2\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-3&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}13/2\\13\\10\end{pmatrix}$ は
$\begin{pmatrix}1&1/2&3/2\\0&5/2&1/2\\0&1/2&-7/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}13/2\\13/2\\-19/2\end{pmatrix}$ となる。

つまり、このように左辺から適当な $3\times\ 3$ 行列を両辺に掛けることにより $Ax=b$ を変形させてゆき、
$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}b'_1\\b'_2\\b'_3\end{pmatrix}$ なればよい。これにより
$x_1=b'_1,\ x_2=b'_2,\ x_3=b'_3$ を得ることになる。

しかし，もともと，$3\times\ 4$ 行列 (A,b) として、左辺からの適当な $3\times$ 3 行列の計算を行っているだけなので、次のようにも考えられる。

一次方程式 $n=3$ の場合の具体例の続き

方程式 $Ax=b$ を解くとは、
$\begin{pmatrix}2&1&3&13\\1&3&2&13\\3&2&1&10\end{pmatrix}$ を考え、

ステップ１：

左から $\begin{pmatrix}1/2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&1/2&3/2&13/2\\1&3&2&13\\3&2&1&10\end{pmatrix}$ となる。
(これは 1 行めに $1/2$ **を掛けたことに相当）**

ステップ２：

左から $\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-3&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&1/2&3/2&13/2\\0&5/2&1/2&13/2\\0&1/2&-7/2&-19/2\end{pmatrix}$ となる。
(これは”2 行目-1 行目”と”3 行目-3 × 1 行目”に相当）

つまり、このように左辺からの $3\times\ 3$ 行列の適当な行列を掛けることにより行列を変形させてゆき、
$\begin{pmatrix}1&0&0&b'_1\\0&1&0&b'_2\\0&0&1&b'_3\end{pmatrix}$ なればよい。

一次方程式 $n=3$ の場合の具体例の続き

$\begin{pmatrix}1&1/2&3/2&13/2\\0&5/2&1/2&13/2\\0&1/2&-7/2&-19/2\end{pmatrix}$ に対して

ステップ３：

$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2/5&0\\0&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&1/2&3/2&13/2\\0&1&1/5&13/5\\0&1/2&-7/2&-19/2\end{pmatrix}$
(これは 2 行めに $2/5$ **を掛けたことに相当）**

ステップ４.

$\begin{pmatrix}1&-1/2&0\\0&1&0\\0&-1/2&1\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&0&7/2&26/5\\0&1&1/5&13/5\\0&0&-18/5&-54/5\end{pmatrix}$
(これは”1 行目-1/2 × 2 行目”と”3 行目-1/2 × 2 行目”に相当）

ステップ５.

$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-5/18\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&0&7/2&26/5\\0&1&1/5&13/5\\0&0&1&3\end{pmatrix}$
(これは 3 行めに $-5/18$ **を掛けたことに相当）**

ステップ６.

$\begin{pmatrix}1&0&-7/2\\0&1&-1/5\\0&0&1\end{pmatrix}$ を掛けると $\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&1&0&2\\0&0&1&3\end{pmatrix}$
(これは”1 行目-7/2 × 3 行目”と”2 行目-1/5 × 3 行目”に相当）

これらにより
方程式 $Ax=b$ は（左辺に適当な行列を掛けることで）
$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$ となることを意味し、$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$
となる。

一次方程式 $n=3$ の場合の具体例の続き（行列を使わない説明）

方程式 $Ax=b$ を解くとは、

$$\begin{cases} 2x_1 & +x_2 & +3x_3 & = & 13 & (1) \\ x_1 & +3x_2 & +2x_3 & = & 13 & (2) \\ 3x_1 & +2x_2 & +x_3 & = & 10 & (3) \end{cases}$$

を考えることである。

ステップ１．**1** 式に $1/2$ を掛けることで

$$\begin{cases} x_1 & +(1/2)x_2 & +(3/2)x_3 & = & 13/2 & (1) \\ x_1 & +3x_2 & +2x_3 & = & 13 & (2) \\ 3x_1 & +2x_2 & +x_3 & = & 10 & (3) \end{cases}$$

ステップ２　**"2 式-1 式"と"3 式-3 × 1 式"**により

$$\begin{cases} x_1 & +(1/2)x_2 & +(3/2)x_3 & = & 13/2 & (1) \\ & (5/2)x_2 & +(1/2)x_3 & = & 13/2 & (2) \\ & +(1/2)x_2 & -(7/2)x_3 & = & -19/2 & (3) \end{cases}$$

ステップ３：**2** 式に $5/2$ を掛けることで

$$\begin{cases} x_1 & +(1/2)x_2 & +(3/2)x_3 & = & 13/2 & (1) \\ & x_2 & +(2/5)x_3 & = & 13/5 & (2) \\ & +(1/2)x_2 & -(7/2)x_3 & = & -19/2 & (3) \end{cases}$$

ステップ４．**"1 式-(1/2) × 2 式"と"3 式-(1/2) × 1 式"**により

$$\begin{cases} x_1 & & (7/2)x_3 & = & 26/5 & (1) \\ & x_2 & +(2/5)x_3 & = & 13/5 & (2) \\ & & -(18/5)x_3 & = & -54/5 & (3) \end{cases}$$

ステップ５．**3** 式に $-5/18$ を掛けることで

$$\begin{cases} x_1 & & (7/2)x_3 & = & 26/5 & (1) \\ & x_2 & +(2/5)x_3 & = & 13/5 & (2) \\ & & x_3 & = & 3 & (3) \end{cases}$$

ステップ６．**"1 式-(7/2) × 3 式"と"2 式-(1/2) × 3 式"**により

$$\begin{cases} x_1 & & & = & 1 & (1) \\ & x_2 & & = & 2 & (2) \\ & & x_3 & = & 3 & (3) \end{cases}$$

を得る。

これは、行列を用いた計算と等価である。

エクセルの行列演算

「行列の和」や「行列の積」「転置行列」「逆行列」「行列式」を計算する関数がエクセルでは用意されている。
n が数〜数 10 であれば、これらの関数により計算可能である。
但し，現在必要とされる行列のサイズの計算は $n=10^6$〜10^{12} の計算である．