２　逆行列

逆行列の計算は、連立一次方程式を数値的に解くために利用される。気象学の分野では線形系の応答問題を数値的に解くときに用いられることも多い。ここでは計算機を用いて逆行列を求める方法を学ぶ。

２．１　はじめに

たとえば、次のような連立一次方程式を解くことを考える。

$$\begin{cases} 7x + 5y = 9 \\ 3x + 2y = 4 \end{cases}$$

このような２元連立一次方程式は、代入法や消去法によって容易に解くことができる。解法をプログラミング言語によって記述することも困難ではない。では、次のような多元連立一次方程式はどうであろうか。

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 3x_3 + 2x_4 = 1 \\ 3x_1 - 2x_3 + 3x_4 = -2 \\ 2x_1 + x_2 + 2x_3 + 3x_4 = -1 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 + 5x_4 = 4 \end{cases}$$

原理的には、未知数と方程式の数が増えても、２元連立一次方程式の場合と同様に代入法や消去法によって解くことができるはずである。しかし現実には、計算の手順は煩雑となり、プログラミング言語によって記述することも容易ではなくなる。ｎ元連立一次方程式の解法を一般的に記述する方法はないだろうか。実は、このようなときには、連立一次方程式を行列によって記述すると便利である。すなわち、上の連立方程式は、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 0 & -2 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \\ 4 \end{pmatrix}$$

と書きかえることが可能である。もし、左辺の行列の逆行列を求めることができれば、この連立一次方程式の解は、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 0 & -2 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 5 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \\ 4 \end{pmatrix}$$

として計算することができる。以下では、このようなｎ次正方行列の逆行列を一般的に計算する方法を考えてみる。

２．２　正則行列と逆行列

ある正方行列Ａについて、

ＡＸ＝ＸＡ＝Ｅ　（ＥはＡと同じ型の単位行列）

となる正方行列Ｘが存在するとき、ＸをＡの**逆行列**といい、A^{-1}で表す。

例１：

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \text{に対して、} A^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

例２：

$$A=\begin{pmatrix}2&6&9\\1&4&6\\0&1&2\end{pmatrix}\text{に対して、}A^{-1}=\begin{pmatrix}2&-3&0\\-2&4&-3\\1&-2&2\end{pmatrix}$$

逆行列は常に存在するとは限らない。逆行列が存在する行列を**正則行列**という。

一般に、正則行列Ａの逆行列A^{-1}も正則であり、

$$(A^{-1})^{-1}=A$$

が成り立つ。また、２つの正則行列Ａ、Ｂの積ＡＢは正則であり、逆行列は、

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

である。

２次の正方行列$A=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$ に対して、$\Delta=ad-bc$ とおくと、

$\Delta\neq 0$ならば、Ａは正則であり、$A^{-1}=\frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix}d&-b\\-c&a\end{pmatrix}$

$\Delta=0$ならば、Ａは正則ではない。

問１． 以下の行列の逆行列を求めよ。

（１）$\begin{pmatrix}2&5\\1&3\end{pmatrix}$　（２）$\begin{pmatrix}3&1\\7&2\end{pmatrix}$　（３）$\begin{pmatrix}-4&2\\-5&3\end{pmatrix}$

２．３　連立一次方程式と逆行列

逆行列を使って連立一次方程式を解くことを考える。たとえば、

$$\begin{cases}2x+6y+9z=3\\ x+4y+6z=1\\ y+2z=-2\end{cases}$$

に関して、

$$A=\begin{pmatrix}2&6&9\\1&4&6\\0&1&2\end{pmatrix},\ \vec{b}=\begin{pmatrix}3\\1\\-2\end{pmatrix},\ \vec{x}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

とおくと、この連立一次方程式を

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

と表現することができる。ここで行列Ａが正則であれは、

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

となり、逆行列A^{-1}とベクトル$\vec{b}$の積を計算することによってベクトル$\vec{x}$を求めることができる。上の例では、行列Ａは実際に正則であって、

$$A^{-1}=\begin{pmatrix}2&-3&0\\-2&4&-3\\1&-2&2\end{pmatrix}$$

だから、

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

となって、

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

であることが分かる。

問２．以下の連立１次方程式を、逆行列を用いて解け。ただし、（３）では上の結果を用いてよい。

（１）$\begin{cases} 7x + 5y = 9 \\ 3x + 2y = 4 \end{cases}$　（２）$\begin{cases} 5x - 3y = 14 \\ 2x + y = -1 \end{cases}$　（３）$\begin{cases} 2x + 6y + 9z = 2 \\ x + 4y + 6z = 5 \\ y + 2z = -1 \end{cases}$

２．４　基本変形と階数

正方行列Ａに対して行なわれる、以下のような操作を**左基本変形**という。

１．二つの行を入れ替える。
２．ある行に０でない数をかける。
３．ある行に他のある行の定数倍を加える。

これらの操作は、行列Ａに対して左からある正方行列Ｐをかける演算として表現できる。このとき行列Ｐを基本行列という。

例１：２行目と３行目を入れ替える。

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

例２：２行目に３をかける。

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

例３：３行目に２行目の４倍を加える。

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

同様に、以下のような操作を**右基本変形**という。

１．二つの列を入れ替える。
２．ある列に０でない数をかける。
３．ある列に他のある列の定数倍を加える。

これらの操作は、行列Ａに対して右からある正方行列Ｑをかける演算として表現できる。行列Ｑも基本行列とよばれる。一般に基本行列は正則である。

任意のｎ次正方行列は、基本変形を何回か行なうことによって、以下のような標準形に変形することができる。

$$P_k \cdots P_2 P_1 A Q_1 Q_2 \cdots Q_\ell = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots^{\,r} & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots^{\,n-r} & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} \qquad (1)$$

このときｒを行列の**階数**という。一般に、行列の階数は一意に定まることが分かっている。階数が次数に等しければ、右辺は単位行列である。実は、階数が次数に等しい場合には、左基本変形か右基本変形のどちらか一方のみによって行列Ａを単位行列に変形できる。つまり、

$$P_m \cdots P_2 P_1 A = E$$

のように書くことができる。このとき、逆行列$A^{-1} = P_m \cdots P_2 P_1$が存在するから、行列Ａは正則である。逆に、一般に基本行列Ｐ、Ｑは正則だから、行列Ａが正則であれば、式（１）において、$P_k \cdots P_2 P_1 A Q_1 Q_2 \cdots Q_\ell$も正則である。右辺が正則であるためには単位行列でなければならないから、階数は次数に等しい。つまり、

正則である　⇔　逆行列が存在する　⇔　階数が次数に等しい

問３． ４次の正方行列に対する、以下の右基本変形を表す基本行列を求めよ。

（１）１列目と３列目を入れ替える。

（２）３列目に－２をかける。

（３）４列目に２列目の－３倍を加える。

２．５　逆行列の計算

正則行列では階数が次数に等しいので、左基本変形のみによって単位行列に変形できる。つまり、

$$P_m \cdots P_2 P_1 A = E$$

となる。ここで、逆行列の定義より、

$$A^{-1} = P_m \cdots P_2 P_1$$

である。このことを利用して、逆行列を求めることができる。すなわち、行列Ａを単位行列Ｅに変形するための基本変形を、単位行列に対しても同様に行なえば逆行列が得られる。

例：$A = \begin{pmatrix} 2 & 6 & 9 \\ 1 & 4 & 6 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$の逆行列を求める。

まず、行列Ａと単位行列Ｅを並べて書く。

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & 9 \\ 1 & 4 & 6 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

はじめに、１行目を１／２倍する。

$$\begin{pmatrix}1 & 3 & 9/2\\1 & 4 & 6\\0 & 1 & 2\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1/2 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

次に、１行目の－１倍を２行目に加える。

$$\begin{pmatrix}1 & 3 & 9/2\\0 & 1 & 3/2\\0 & 1 & 2\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1/2 & 0 & 0\\-1/2 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

２行目の－３倍を１行目に、－１倍を３行目に加える。

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 3/2\\0 & 0 & 1/2\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}2 & -3 & 0\\-1/2 & 1 & 0\\1/2 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

３行目を２倍する。

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 3/2\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}2 & -3 & 0\\-1/2 & 1 & 0\\1 & -2 & 2\end{pmatrix}$$

３行目の－３／２倍を２行目に加える。

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}2 & -3 & 0\\-2 & 4 & -3\\1 & -2 & 2\end{pmatrix}$$

したがって、

$$\mathrm{A}^{-1}=\begin{pmatrix}2 & -3 & 0\\-2 & 4 & -3\\1 & -2 & 2\end{pmatrix}$$

以上の操作をまとめると、次のようになる。

１．ｎ次正方行列Ａに関して、左側に行列Ａ、右側に同じ型の単位行列を書く。

２．ｍ＝１, . . . , ｎについて以下の操作を反復する。両方の行列に対して同じ操作を行なう。

ａ．各行列の第ｍ行に１／（左側の行列の（ｍ，ｍ）成分）をかける。

ｂ．各行列の第ｍ行以外のすべての行（第ℓ行）について、その行列の第ｍ行の－（左側の行列の（ℓ，ｍ）成分）倍を、その行列の第ℓ行に加える。

左側の行列の（ｍ，ｍ）成分がゼロになった場合は、他の行との入れ替えが必要である。どの行と入れ替えても左側の行列の（ｍ，ｍ）成分をゼロ以外の値にすることができない場合、つまり、左側の行列の第ｍ列がすべてゼロである場合は、正則ではなく、逆行列は存在しない。

右基本変形によっても同様にして逆行列を求めることができる。ただし、左基本変形と右基本変形の両方を同時に用いてはならない。

問４． 次の行列の逆行列を求めよ。

（１）$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\-2 & -3 & -4\\2 & 2 & 4\end{pmatrix}$　（２）$\begin{pmatrix}-2 & 4 & -3\\-2 & 3 & 0\\1 & -2 & 2\end{pmatrix}$　（３）$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\3 & 1 & -2 & 0\\0 & 2 & -3 & 0\\2 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$

２．６　行列式

正方行列が正則であるか判定するために**行列式**を用いることができる。２次の正方行列の逆行列の計算においてはΔ＝ad－bc という量が重要な意味を持っていた。すなわち、$\Delta \neq 0$であれば逆行列が存在して$A^{-1}=\frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$、$\Delta=0$であれば存在しなかった。以下では、$\Delta$に相当する量を行列式と呼ぶことにして、３次以上の正方行列についても、行列式を定義することができないか考えてみる。行列Ａの行列式を｜Ａ｜または detＡと書き、次のように定義する。

２次の正方行列$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ に対して、$|A|=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$

３次の正方行列$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ の場合には、

$D=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{11}a_{23}a_{32}$という数を定義して、
$D\neq 0$であれば逆行列が存在し、

$$A^{-1}=\frac{1}{D}\begin{pmatrix} a_{22}a_{33}-a_{23}a_{32} & -a_{12}a_{33}+a_{13}a_{32} & a_{12}a_{23}-a_{13}a_{22} \\ -a_{21}a_{33}+a_{23}a_{31} & a_{11}a_{33}-a_{13}a_{31} & -a_{11}a_{23}+a_{13}a_{21} \\ a_{21}a_{32}-a_{22}a_{31} & -a_{11}a_{32}-a_{12}a_{31} & a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21} \end{pmatrix}$$

である。$D=0$であれば、逆行列は存在しない。そこで、３次の正方行列の行列式を次のように定義する。

３次の正方行列$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ に対して、

$|A|=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{11}a_{23}a_{32}$

例１：$\det\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}=1$、例２：$\det\begin{pmatrix} 2 & 6 & 9 \\ 1 & 4 & 6 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}=1$

一般に、ｎ次の正方行列に対しては、**置換**を用いて行列式を定義する。置換とはｎ個の自然数が並んだ数列｛１，２，…，ｎ｝を何回か並べ替える操作のことである。例えば、ｎ＝４の場合、

数列｛１，２，３，４｝
↓　２番目の要素と３番目の要素を入れ替える
数列｛１，３，２，４｝
↓　３番目の要素と４番目の要素を入れ替える
数列｛１，３，４，２｝

のような置換を行なうことができる。このとき、置換σをσ（1）＝１、σ（2）＝３、σ（3）＝４、σ（4）＝２のように表す。一般に、ｎ個の要素の置換はｎ！個存在する。偶数回の並べ替えによって表現される置換を偶置換、奇数回の並べ替えによって表現される置換を奇置換という。一般に、ある置換が偶置換であるか奇置換であるかは一意に決まることが分かっている。置換σの符号 sgnσを、σが偶置換のとき sgnσ＝１、奇置換のとき sgnσ＝－１と定義する。このとき、ｎ次の正方行列の行列式は、

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \mathrm{sgn}\,\sigma \cdot x_{1\sigma(1)} \cdot x_{2\sigma(2)} \cdots x_{n\sigma(n)}$$

と定義される。ここで、$\sum_{\sigma \in S_n}$ はｎ個の要素に対する置換すべてに関する和を表す。

例：$\det\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 - 6 = -5$

以上のように定義された行列式が、逆行列の有無に対応しているか調べてみる。実は、行列式に関しては以下の性質が成り立っている。

$$|A||B| = |AB|$$

ここで、行列Ａに逆行列A^{-1}が存在するとする。このとき

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

が成り立つ。ゆえに

$$|A||A^{-1}| = |AA^{-1}| = |E| = 1$$

$|A||A^{-1}| \neq 0$だから$|A| \neq 0$である。すなわち、行列Ａの逆行列A^{-1}が存在すれば、行列式$|A|$の値はゼロではない。また、逆に、行列Ａの行列式$|A|$の値がゼロでなければ、逆行列A^{-1}が存在することも分かっている。つまり、

正則である　⇔　逆行列が存在する

⇔　階数が次数に等しい　⇔　行列式がゼロではない

問５． 以下の行列の行列式を計算し、逆行列の有無を判定せよ。

（１）$\begin{pmatrix} -2 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & 0 \\ 1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$　（２）$\begin{pmatrix} -2 & 4 & -3 \\ -2 & 4 & 0 \\ 1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$

（３）$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -3 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$　（４）$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & -2 & 0 \\ 4 & 2 & -4 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

課題２：①任意の正則なｎ次正方行列について、左基本変形によって逆行列を求めるプログラムを作成せよ。与える行列は正則であることを前提としてよい。また、基本変形の過程で「行の入れ替え」の必要は生じないことも前提としてよい。逆行列を求めるプログラムは INVMTX という名前のサブルーチン（C の場合は invmtx という名前の関数）として作成せよ。サブルーチン（関数）の中では、別に作成したサブルーチン（関数）を参照してもよい。主プログラム中ではｎの値は固定でよいが、サブルーチン（関数）は任意のｎに対して適用可能なもの（ｎの値を変更しても内部を書き替えなくてもよいもの）にせよ。

②適当な行列と、計算された逆行列との積を計算することによって、逆行列の演算が正しく行われたか検算せよ（提出は不要）。

③作成したサブルーチン（関数）を用いて以下の連立一次方程式を解け。

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 3x_3 + 2x_4 = 1 \\ 3x_1 - 2x_3 + 3x_4 = -2 \\ 2x_1 + x_2 + 2x_3 + 3x_4 = -1 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 + 5x_4 = 4 \end{cases}$$

計算に用いたプログラム（①で作成したサブルーチンまたは関数を使って③を解いたもの）（prog02.f または prog02.c）と、逆行列と連立方程式の解を記したテキストファイル（answer02.txt）を提出せよ。