行列の基本

行列とは

行列の基本形（行列 $\boldsymbol{A}$ の i 行 j 列の成分を a_{ij} と呼ぶ＝添え字の左は行、右が列）

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{i1} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{in} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ a_{m1} & \dots & a_{mj} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

行列はイタリック・ボールド体の大文字で表現する
行列を構成する 1 つ 1 つの数を、行列の成分あるいは要素という。
次数 $(n\times n)$ の行列を、n 次正方行列という。
正方行列以外の行列を、矩形行列という。
n 次正方行列の成分、$a_{11},...,a_{ii},...,a_{nn}$ を対角成分という。
対角成分以外の成分を非対角成分という。

$a_{ij=}a_{ji}$ であるような正方行列を対称行列という。（上三角部分に sym と記したり省略したりする場合がある。）
非対角成分がすべて 0 であるような対称行列を対角行列といい、$\mathbf{D}$ で表す。
対角成分がすべて 1 であるような対角行列を単位行列といい、$\mathbf{I}$ で表す。
すべての成分が 0 であるような行列をゼロ行列といい、$\mathbf{O}$ で表す。

転置行列

サイズ $(m\times n)$ の行列 $\mathbf{A}$ の各成分 a_{ij} を a_{ji} の位置に移動したサイズ $(n\times m)$ の行列を $\mathbf{A}$ の転置行列といい、$\mathbf{A}'$（または $\mathbf{A}^T$ ）と表記する。$\mathbf{A}$ プライムまたは $\mathbf{A}$ トランスポーズと読む。
転置行列を求めることを行列を転置するという。行列を 2 回転置すると元に戻る。すなわち、$(\mathbf{A}')' = \mathbf{A}$ である。

ベクトルとスカラー
列数が 1 である行列を列ベクトルまたは縦ベクトルという。

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \cdots \\ a_i \\ \cdots \\ a_m \end{bmatrix}$$

行数が 1 である行列を行ベクトル、または横ベクトルという。

$$\mathbf{a}' = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_i & \cdots & a_m \end{bmatrix}$$

特に断らない場合は、ベクトルとは列ベクトルのことであり、行ベクトルは上のように列ベクトルの転置で表現することが多い。

すべての成分が 0 であるようなベクトルをゼロベクトルといい、$\mathbf{o}$ であらわす。

すべての成分が 1 であるようなベクトルを 1 ベクトルといい、$\mathbf{1}$ であらわす。

1 つの成分の値が 1 で残りが 0 であるベクトルを単位ベクトルといい、$\mathbf{u}$ であらわすこともある。

行の数と列の数が 1 である行列は通常の数であり、特にスカラーと呼ばれる。

内積とノルム

$\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ の次数が等しいとき、対応する成分の積和を、

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{a}_i \mathbf{b}_i$$

と表し、その値をベクトル $\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ の内積と呼ぶ。内積が 0 である 2 つのベクトルは互いに直交しているという。自分自身との内積の平方根、

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})}$$

はベクトル $\mathbf{a}$ のノルムという。ノルムはそのベクトルの長さを表す。

行列と行列の和と差

$$\mathbf{A} \pm \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11} \pm b_{11} & \cdots & a_{1j} \pm b_{1j} & \cdots & a_{1n} \pm b_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{i1} \pm b_{i1} & \cdots & a_{ij} \pm b_{ij} & \cdots & a_{in} \pm b_{in} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ a_{m1} \pm b_{m1} & \cdots & a_{mj} \pm b_{mj} & \cdots & a_{mn} \pm b_{mn} \end{bmatrix}$$

二つのサイズの等しい行列の間で定義され、対応する成分の和と差を元の行列と同じ位置に配した行列となり、以下が成立する。

$$\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{B}+\mathbf{A}$$
$$(\mathbf{A}+\mathbf{B})+\mathbf{C}=\mathbf{A}+(\mathbf{B}+\mathbf{C})$$
$$(\mathbf{A}\pm\mathbf{B})'=\mathbf{A}'\pm\mathbf{B}'$$

スカラーと行列の積

スカラーと行列の積は、行列のすべての成分をスカラー倍することによって得られる。

$$x\mathbf{A}=\mathbf{A}x=\begin{bmatrix} xa_{11} & \dots & xa_{1j} & \dots & xa_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ xa_{i1} & \dots & xa_{ij} & \dots & xa_{in} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ xa_{m1} & \dots & xa_{mj} & \dots & xa_{mn} \end{bmatrix}$$

$$x(\mathbf{A}\pm\mathbf{B})=x\mathbf{A}\pm x\mathbf{B}$$
$$(x\pm y)\mathbf{A}=x\mathbf{A}\pm y\mathbf{A}$$

行列と行列の積

行列 $\mathbf{A}$ と行列 $\mathbf{B}$ の積は、 $\mathbf{A}$ の列の数と $\mathbf{B}$ の行の数とが等しい場合のみに定義され、 $\mathbf{A}(n\times m)$ と $\mathbf{B}(m\times l)$ の積 $\mathbf{C}(n\times l)$ は、

$$\mathbf{C}=\mathbf{AB}=\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{m} a_{1k}+b_{k1} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{1k}+b_{kj} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{1k}+b_{kl} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{k=1}^{m} a_{ik}+b_{k1} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{ik}+b_{kj} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{ik}+b_{kl} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \sum_{k=1}^{m} a_{nk}+b_{k1} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{nk}+b_{kj} & \dots & \sum_{k=1}^{m} a_{nk}+b_{kl} \end{bmatrix}$$

（注：感覚的な覚え方は、 $\mathbf{A}$ の i 列の成分と $\mathbf{B}$ の j 行の成分を掛け合わせてすべて足すと、 $\mathbf{C}$ の i 行 j 列の成分となる。すなわち、$\mathbf{C}$ の i 行 j 列は $\sum_{k=1}^{m} a_{ik}+b_{kj}$ である。）

性質は、

$\mathbf{AB}$ が定義されても $\mathbf{BA}$ が定義されるとは限らない

$$(\mathbf{AB})\mathbf{C}=\mathbf{A}(\mathbf{BC})$$
$$\mathbf{A}(\mathbf{B}\pm\mathbf{C})=\mathbf{AB}\pm\mathbf{AC}$$
$$\mathbf{IA}=\mathbf{A},\mathbf{AI}=\mathbf{A}$$
$$\mathbf{OA}=\mathbf{O},\mathbf{AO}=\mathbf{O}$$
$$(\mathbf{AB})'=\mathbf{B}'\mathbf{A}'$$

ベクトルの演算

ベクトルは行列の特殊な形であるから、演算規則は行列の規則に従う。

1. 行ベクトルと列ベクトルの積はスカラーとなる。$\mathbf{a}'\mathbf{b} = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) = c$
2. 列ベクトルと行ベクトルの積は行列となる。$\mathbf{ab}' = \mathbf{C}$
3. 行列と列ベクトルの積は列ベクトルとなる。$\mathbf{Ab} = \mathbf{c}$
4. 行ベクトルと行列の積は行ベクトルとなる。$\mathbf{b}'\mathbf{A} = \mathbf{c}'$

分割行列の積

積$\mathbf{AB}$が定義できる2つの行列を区切り、

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11} & \mathbf{B}_{12} \\ \mathbf{B}_{21} & \mathbf{B}_{22} \end{bmatrix}$$

のようにいくつかの領域に分けたとする。このとき、$\mathbf{A}$や$\mathbf{B}$を分割行列あるいは超行列といい、$\mathbf{A}_{ij}$や$\mathbf{B}_{ij}$を部分行列という。分割の仕方によっては$\mathbf{A}_{ij}$や$\mathbf{B}_{ij}$はベクトルやスカラーになる場合もある。積が定義されるように行列が定義されていれば、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11} & \mathbf{B}_{12} \\ \mathbf{B}_{21} & \mathbf{B}_{22} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}\mathbf{B}_{11} + \mathbf{A}_{12}\mathbf{B}_{21} & \mathbf{A}_{11}\mathbf{B}_{12} + \mathbf{A}_{12}\mathbf{B}_{22} \\ \mathbf{A}_{21}\mathbf{B}_{11} + \mathbf{A}_{22}\mathbf{B}_{21} & \mathbf{A}_{21}\mathbf{B}_{12} + \mathbf{A}_{22}\mathbf{B}_{22} \end{bmatrix}$$

が成り立つ。演算が定義できれば、分割した行列・ベクトル・スカラーの積はあたかもスカラーとみなして展開できる。

行列の対角要素の和

正方行列の対角成分の値を0にする操作を、

$$\mathbf{D} = diag(\mathbf{A})$$

で表す。ダイアゴナル$\mathbf{A}$と読む。

例として、

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} = diag\left(\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\right)$$

正方行列の対角成分の和を取る操作を、

$$c = tr(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

で表し、行列$\mathbf{A}$のトレースといい、トレース$\mathbf{A}$と読む。

例として、

$$5 = tr\left(\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\right)$$

トレースに関しては以下の公式が成り立つ。

1. $tr(\mathbf{A}+\mathbf{B}) = tr(\mathbf{A}) + tr(\mathbf{B})$
2. $tr(\mathbf{AB}) = tr(\mathbf{BA})$
3. $tr(c\mathbf{A}) = ctr(\mathbf{A})$
4. $tr(\mathbf{AA}') = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2$
5. $tr(\mathbf{A}bb') = b'\mathbf{A}b$

逆行列

次数の等しい正方行列 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ について、

$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$ である場合に $\mathbf{B}$ を $\mathbf{A}$ の逆行列といい、 $\mathbf{A}^{-1}$ と表記する。このとき、 $\mathbf{A}$ もまた $\mathbf{B}$ の逆行列 $\mathbf{B}^{-1}$ である。逆行列はあるとしても一つしかない。対称行列の逆行列はやはり対称行列である。サイズ 2 の逆行列は、

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \frac{1}{a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

で得られる。分母が 0 になったときには $\mathbf{A}$ には逆行列は存在しない。

行列のサイズによらず、対角行列の逆行列は、

$$\mathbf{D}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/d_{11} & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 1/d_{ii} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1/d_{nn} \end{bmatrix}$$

のように元の行列の要素の逆数を同じ場所に持つ対角行列として表現できる。 $\mathbf{DD}^{-1} = \mathbf{I}$ である。同じ行列を 2 度かけて元の対角行列 $\mathbf{D}$ に戻る行列も、

$$\mathbf{D}^{1/2}=\begin{bmatrix}\sqrt{d_{11}} & ... & 0 & ... & 0\\ ... & ... & ... & ... & ...\\ 0 & ... & \sqrt{d_{ii}} & ... & 0\\ ... & ... & ... & ... & ...\\ 0 & ... & 0 & ... & \sqrt{d_{nn}}\end{bmatrix}$$

として表現できる。$\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{D}^{1/2}=\mathbf{D}$ である。ただし元の行列 $\mathbf{D}$ の要素はすべて非負（正または0）でなくてはならない。また $\mathbf{D}^{1/2}$ の逆行列も、

$$\mathbf{D}^{-1/2}=\begin{bmatrix}\sqrt{1/d_{11}} & ... & 0 & ... & 0\\ ... & ... & ... & ... & ...\\ 0 & ... & \sqrt{1/d_{ii}} & ... & 0\\ ... & ... & ... & ... & ...\\ 0 & ... & 0 & ... & \sqrt{1/d_{nn}}\end{bmatrix}$$

となり、$\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{D}^{1/2}=\mathbf{I}$ である。

行列式

正方行列 $\mathbf{A}(n\times n)$ から n 個の要素 a_{ij} を取り出して、その積を c_k とする。ただし n 個の要素はすべての行と列から 1 回ずつ選ばなくてはならない。するとその取り出し方は順列の公式から n の階乗通りあり、c_k は $n!$ 個計算できる。例えば 3 次の行列ならば c_k は $3!=6$ 個であり、それは、

$c_1=a_{11}a_{22}a_{33}$
$c_2=a_{12}a_{23}a_{31}$
$c_3=a_{13}a_{21}a_{32}$
$c_4=a_{11}a_{23}a_{32}$
$c_5=a_{13}a_{22}a_{31}$
$c_6=a_{12}a_{21}a_{33}$

である。

c_k は一般に、

$$c_k=\prod_{i=n}^{n}a_{ij}$$

と書くことができ、j の順番を入れ換えることによって $n!$ の c_k が計算される。

ここで j の並びのうち 2 つを入れ換える操作を l 回繰り返して、その順番を $1,2,...,n$ にしてみる。例えば、上の 3 次の行列の場合 c_2 の j の並びは 2,3,1 だから 2 回の入れ替えで 1,2,3 となり、また c_4 は 1 回の並べ換えですむ。この時、入れ換え操作の回数 l が偶数であるか奇

数であるかは、操作の仕方に無関係に j の並びによってだけ決まることが知られている。そこで、l が偶数の場合には 1 をとり、奇数の場合には 0 をとる変数 δ_k を考える。例えば上の 3 次の行列の場合では、

$\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 1, \delta_4 = \delta_5 = \delta_6 = -1$

となる。この時スカラー

$$|\mathbf{A}| = \sum_{k=1}^{n!} \delta_k c_k$$

を n 次正方行列 $\mathbf{A}$ の行列式と定義する。上の例では、

$$|\mathbf{A}| = c_1 + c_2 + c_3 - c_4 - c_5 - c_6$$

となる。2 次行列の行列式を要素を用いて表すと、

$$|\mathbf{A}| = a_{11} + a_{22} - a_{12} - a_{21}$$

となる。この時、行列式 $|\mathbf{A}|$ の絶対値は、二つのベクトル $[a_{11}, a_{21}]'$ と $[a_{12}, a_{22}]'$ によって作られる平行四辺形の面積に一致し、3 次の場合には、行列式 $|\mathbf{A}|$ の絶対値は 3 つのベクトルによって作られる平行六面体の体積に一致する。一般に n 次の行列の行列式の絶対値は、n 次元空間に張られた $a_1, a_2, ..., a_n$ を 1 辺とする平行超立体の体積を表す。行列式の性質として以下がある。

$|\mathbf{A}'| = |\mathbf{A}|$

$|\mathbf{A}| = |\mathbf{A}||\mathbf{B}|$

$|\mathbf{A}^{-1}| = |\mathbf{A}|^{-1}$

直交行列

正方行列 $\mathbf{T}$ について、$\mathbf{TT}' = \mathbf{D}$ が成り立つ時、$\mathbf{T}$ を直交行列という。直交行列は、列を構成している任意の2つの縦ベクトルが直交している。この場合 $\mathbf{TT}'$ は必ずしも対角行列 $\mathbf{D}$ にはならない。さらに $\mathbf{TT}' = \mathbf{I}$ が成り立つとき、$\mathbf{T}$ を正規直交行列という。$\mathbf{T}$ が正規直交行列のとき、$\mathbf{TT}' = \mathbf{I}$ も成り立つ。正規直交行列の列を構成しているすべての縦ベクトルのノルム（長さ）は 1 である。

固有値と固有ベクトル

n 次正方行列 $\mathbf{A}$ とゼロベクトルでないベクトル $\mathbf{x}$ に関して、

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$$
が成り立つとき、λ を行列 $\mathbf{A}$ の固有値といい、$\mathbf{x}$ を固有ベクトルという。ただしここでは対称行列の固有値と固有ベクトルのみを扱う。固有値と固有ベクトルの組は高々 n 個しかない。対称行列 $\mathbf{A}$ に関する λ と $\mathbf{x}$ の方程式を固有値問題という。$\mathbf{A}$ が二つの対称行列の積であるとき、特に一般固有値問題というときがある。また固有値や固有ベクトルの値を求めることを固有値問題を解くという。
固有値を大きい順に $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ....$ のように並べたとき、λ_1 を第 1 固有値、それに対応する $\mathbf{x}_1$ を第 1 固有ベクトルという。また λ_i を第 i 固有値、それに対応する $\mathbf{x}_i$ を第 i 固有ベクトルという。明らかに、
$$\mathbf{A}(a\mathbf{x}_i) = \lambda_i(a\mathbf{x}_i), a \neq 0$$
が成り立つので、$a\mathbf{x}_i$ も無数に存在する第 i 固有ベクトルの一つとなる。
固有値を対角成分に配した対角行列 $\mathbf{\Lambda}$ と、それに対応する固有ベクトルを列に配した $\mathbf{X}$ を用いて、すべての固有値および固有ベクトルを同時に
$$\mathbf{AX} = \mathbf{X\Lambda}$$
と表現することができる。一般に $\mathbf{X}$ は直交行列になる。