行列式

行列式の関係を求めていきます。
大文字のローマ文字は行列、小文字とギリシャ文字はスカラー、太字はベクトルとしています。

行列式が出てくる理由を見るために、2 つの式による連立方程式

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

を持ち出します。これは a_{ij} を 2×2 行列、x_i を 2×1 行列、b_i を 2×1 行列の成分とみれば

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{2} a_{ij}x_j = b_i$$

と書けます。これだとただの表記ですが、x_1, x_2 が解を持つかを行列の成分から判別できます。x_1, x_2 を普通に求めると

$$x_1 = -\frac{a_{12}b_2 - a_{22}b_1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \ , \ x_2 = \frac{a_{11}b_2 - a_{21}b_1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}$$

このとき、分母が 0 でなければ解を持ちます。で、分母の形は行列の対角成分同士と非対角成分同士の積による形になっています。これを行列式 (determinant) と呼びます。行列式は $\det A$ や $|A|$ と表記され、2×2 行列の場合では

$$\det A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

となります。行列の形で書けば

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

と表記されます。
3 つの連立でも同様にできます。面倒なので結果だけ示せば、3×3 行列の行列式は

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

となります。
この手続きは $n\times n$ 行列に一般化されます。3×3 行列での行列式には 6 個の項があり、その符号がプラスなのは

$$a_{11}a_{22}a_{33},\ a_{12}a_{23}a_{31},\ a_{13}a_{21}a_{32}$$

マイナスなのは

$$a_{11}a_{23}a_{32},\ a_{12}a_{21}a_{33},\ a_{13}a_{22}a_{31}$$

各項での添え字の左側は $a_{1i}a_{2j}a_{3k}$ のように $1,2,3$ の並びになるようにしています。このように並べた時の i,j,k の並びに法則性があります。(i,j,k) の並びは、プラスではそれぞれ $(1,2,3)$、$(2,3,1)$、$(3,1,2)$ ($a_{11}a_{22}a_{33}$、$a_{12}a_{23}a_{31}$、$a_{13}a_{21}a_{32}$)、マイナスではそれぞれ $(1,3,2)$、$(2,1,3)$、$(3,2,1)$ となっています。つまり、プラスでは $(1,2,3)$ の並びに対して偶数回の入れ替え (偶置換) が行われ、マイナスでは奇数回の入れ替え (奇置換) が行われています。ここで言っている入れ替えは

$$
\begin{aligned}
&(1,2,3) \ \Rightarrow\ (2,1,3) \ \Rightarrow\ (2,3,1) \\
&(1,2,3) \ \Rightarrow\ (1,3,2) \ \Rightarrow\ (3,1,2)
\end{aligned}
$$

といったもので、これらは偶置換です。

　というわけで、3×3 行列の行列式は、$a_{1i}a_{2j}a_{3k}$ としたとき、$i=1,j=2,k=3$ の偶置換ではプラス、奇置換ではマイナスとして全て足したものになっています。具体的に行えば、$a_{11}a_{22}a_{33}$ から始めて、$2,3$ を交換した $a_{11}a_{23}a_{32}$ ではマイナス、これから $1,3$ を交換した $a_{13}a_{21}a_{32}$ ではプラス、さらに $1,2$ を交換した $a_{13}a_{22}a_{31}$ ではマイナス、さらに $2,3$ を交換した $a_{12}a_{23}a_{31}$ ではプラス、そして $1,3$ を交換した $a_{12}a_{21}a_{33}$ ではマイナスとなり、これらを足した

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

が行列式となります。$1,2,3$ の並びの組み合わせは $3!=6$ 個なので 6 個の項になります。

　この結果をそのまま一般化することで $n\times n$ 行列の行列式は

$$
\det A=\sum_{\mathrm{perm}}(-1)^{\sigma}a_{1k_1}a_{2k_2}\cdots a_{nk_n}
$$

となります。k_i は 1 から n の整数で、σ は $(k_1,k_2,\ldots,k_n)$ の並びが $(1,2,\ldots,n)$ に対して偶置換なら 0、奇置換なら $+1$ にし、和の記号はその並びによる全ての項の和を取ることを意味します。n 個の数字の並びの組み合わせから、$n!$ 個の項の和になります。

　もしくはレヴィ・チビタ記号 $\epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}$ によって

$$
\det A=\sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n=1}^{n}\epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}a_{1k_1}a_{2k_2}\cdots a_{nk_n} \tag{1}
$$

とも書かれます。和の記号は

$$
\sum_{k_1=1}^{n}\sum_{k_1=2}^{n}\cdots\sum_{k_n=1}^{n}
$$

を略して書いているだけです。レヴィ・チビタ記号は例えば、ϵ_{123} では

$$
\begin{aligned}
&\epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312}=+1 \\
&\epsilon_{132}=\epsilon_{213}=\epsilon_{321}=-1 \\
&\epsilon_{111}=\epsilon_{112}=\epsilon_{113}=\epsilon_{211}=\cdots=0
\end{aligned}
$$

となる記号です。つまり、$\epsilon_{12\ldots n}=+1$ の添え字に対して偶置換なら $+1$、奇置換なら -1、同じ数字の添え字が複数あるときは 0 になる記号です。なので、(1) は普通に和を取っていけばいいだけです。例えば、3×3 行列では

$$\begin{aligned}\det A &= \sum_{k_1,k_2,k_3=1}^{3} \epsilon_{k_1k_2k_3} a_{1k_1}a_{2k_2}a_{3k_3} \\ &= \epsilon_{123}a_{11}a_{22}a_{33} + \epsilon_{231}a_{12}a_{23}a_{31} + \epsilon_{312}a_{13}a_{21}a_{32} \\ &\quad + \epsilon_{132}a_{11}a_{23}a_{32} + \epsilon_{213}a_{12}a_{21}a_{33} + \epsilon_{321}a_{13}a_{22}a_{31} \\ &= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}\end{aligned}$$

となります。

列で和を取るようにしましたが、行で和を取っても同じことなので、行列式は

$$\det A = \sum_{\mathrm{perm}} (-1)^{\sigma} a_{k_1 1}a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n}$$

$$\det A = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n=1}^{n} \epsilon_{k_1k_2\ldots k_n} a_{k_1 1}a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n}$$

と定義できます。雑に言えば、$(-1)^{\sigma}a_{1k_1}a_{2k_2}\cdots a_{nk_n}$ と $(-1)^{\sigma}a_{k_1 1}a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n}$ の入れ替えによる組み合わせは同じというだけです。

$n\times n$ 行列の行列式を $(n-1)\times(n-1)$ 行列から求める方法を導出します。$n\times n$ 行列 A があり、それの i 行と j 列を抜いた行列の行列式を $M^{(ij)}$ とします。$M^{(ij)}$ は小行列式 (minor)、i 行と j 列を抜いた $(n-1)\times(n-1)$ 行列は小行列 (submatrix) と言います。小行列を A とすれば小行列式は $M^{(ij)} = \det A$ です。例えば、3×3 行列での $M^{(23)}$ は

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \ \Rightarrow\ M^{(23)} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}$$

となります。元の行列の 2 行目と 3 列目 $(a_{21}, a_{22}, a_{23}, a_{13}, a_{23}, a_{33})$ に注目して、そこの成分を行列 A から抜き取っています。

$n\times n$ 行列 A の小行列式 $M^{(ij)}$ を使って

$$\Delta_{ij} = (-1)^{i+j} M^{(ij)}$$

としたものを行列 A の余因子 (cofactor) と言います。余因子 Δ_{ij} を成分に持つ行列を余因子行列と言います。

ただし、余因子行列の定義のされ方が 2 通りあり、Δ_{ij} をそのまま i 行 j 列とする場合と、転置して j 行 i 列にする場合があります。英語だとこの 2 つは区別されていて、Δ_{ij} をそのまま i 行 j 列としたものを cofactor matrix (matrix of cofactor)、Δ_{ij} を j 行 i 列としたものを adjugate matrix (adjoint matrix) としています。行列 A の adjugate matrix は Adj$A$、その成分は $(\mathrm{Adj}A)_{ij}$ のように表記されます $((\mathrm{Adj}A)_{ij} = \Delta_{ji})$。

日本語では adjugate matrix を余因子行列と言うことが多いです。おそらく、cofactor matrix はほとんど出てこないので adjugate matrix を余因子行列と呼ぶことにしているのだと思います。ここでも adjugate matrix を余因子行列と言っていきます。

例として 3×3 行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

を使ってみます。このときの小行列式 $M^{(11)}$ は

$$M^{(11)} = \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}$$

なので、余因子 Δ_{11} は

$$\Delta_{11} = (-1)^{1+1}M^{(11)} = M^{(11)}$$

$M^{(12)}$ でも同様に

$$\Delta_{12} = (-1)^{1+2}M^{(12)} = -M^{(12)} = -\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}$$

同様のことを残った成分でも行い、成分を $\tilde{a}_{ij} = \Delta_{ji}$ とすることで余因子行列 $\tilde{A}(= \mathrm{Adj}A)$ は

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & \Delta_{31} \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & \Delta_{32} \\ \Delta_{13} & \Delta_{23} & \Delta_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \\ -\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \end{pmatrix}$$

$(-1)^{i+j}$ から当たり前ですが、成分の符号は交互に変わります。

余因子を使って行列式を求められます。$n \times n$ 行列でも分かりにくくなるだけで同じことをするので、3×3 行列を使います。3×3 行列 A の行列式が、何かしらの係数 C_{ik} によって

$$\det A = \sum_{k=1}^{3} a_{ik}C_{ik} \tag{2}$$

という形で書けるとします。i は 1 から 3 のどれでもいいです。$i = 1$ を使うことにして

$$\det A = \sum_{k=1}^{3} a_{1k}C_{1k} = a_{11}C_{11} + a_{12}C_{12} + a_{13}C_{13}$$

3×3 行列の行列式において a_{11} は

$$\begin{aligned} \det A &= \sum_{k_1,k_2,k_3=1}^{3} \epsilon_{k_1k_2k_3}a_{1k_1}a_{2k_2}a_{3k_3} \\ &= \sum_{k_2,k_3=1}^{3} \epsilon_{1k_2k_3}a_{11}a_{2k_2}a_{3k_3} + \sum_{k_1\neq 1,k_2,k_3=1}^{3} \epsilon_{k_1k_2k_3}a_{1k_1}a_{2k_2}a_{3k_3} \end{aligned}$$

として出てきます。二行目の第一項は k_1 は $k_1 = 1$ に固定しているので k_2, k_3 の和となり、第二項は $k_1 = 1$ でない残りの項による和になります。これと (2) の a_{11} の項を取り出せば

$$\begin{aligned} a_{11}C_{11} &= \sum_{k_2,k_3=1}^{3} \epsilon_{1k_2k_3}a_{11}a_{2k_2}a_{3k_3} \\ &= a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) \\ C_{11} &= a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} \end{aligned}$$

となることが分かり、係数 C_{11} は余因子 Δ_{11} になっています。
　これは他の成分でも同じ結果になり、$n \times n$ 行列でも同様に成立するので、行列 A の行列式は A の余因子によって

$$\det A = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\Delta_{ik}$$

と書けます。これを余因子展開 (cofactor expansion) と言います。今は $i = 1$ として行いましたが、他の場合でも同様に示せます。また、行でなく列で展開しても同じことが言えて

$$\det A = \sum_{k=1}^{n} a_{ki}\Delta_{ki}$$

となります。
　行列式と余因子行列から逆行列を求めることもできます。行列 A の余因子行列を $\tilde{A}$ とします。行列 A とその逆行列 B は定義から、単位行列 I によって

$$AB = I$$

左辺は成分で書けば

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj}$$

なので、$AB = I$ は成分で書くと

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj} = \delta_{ij}$$

となります。この b_{kj} が分かれば行列 A の逆行列が求められたことになります。
　ここで行列 A の余因子 Δ_{jk} による余因子展開

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik}\Delta_{jk} = \delta_{ij}\det A$$

を持ち出します。余因子展開は $i = j$ のときなので、右辺にクロネッカーデルタを入れて $i = j$ のときに $\det A$ になるようにしています。変形すれば

$$\frac{1}{\det A}\sum_{k=1}^{n} a_{ik}\Delta_{jk} = \delta_{ij}$$

これと $AB = I$ の形を比較すると

$$b_{kj} = \frac{\Delta_{jk}}{\det A} \quad \left((B)_{kj} = \frac{\Delta_{jk}}{\det A}\right)$$

のとき

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj} = \delta_{ij}$$

となるのが分かります。よって、余因子 Δ_{ij} の転置を成分とする行列は余因子行列 $\tilde{A}$ $((\tilde{A})_{ij} = \Delta_{ji})$ なので、行列 A の逆行列 $B = A^{-1}$ は

$$A^{-1} = \frac{\tilde{A}}{\det A}$$

となります。当然、$\det A \neq 0$ である必要があり、$\det A \neq 0$ は逆行列があるための条件になっています。

連立方程式の解と行列式の関係についてまとめておきます。連立方程式は、$n \times n$ 行列 A、n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}$ によって

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3}$$

と書けます。なので、逆行列 A^{-1} から

$$\begin{aligned} A^{-1}A\boldsymbol{x} &= A^{-1}\boldsymbol{b} \\ I\boldsymbol{x} &= A^{-1}\boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{x} &= A^{-1}\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

このため、連立方程式が解を持つためには逆行列 A^{-1} が存在している必要があります。そして、逆行列が存在するためには $\det A \neq 0$ である必要があり、$\det A \neq 0$ なら A の余因子行列 $\tilde{A}$ から

$$\boldsymbol{x} = \frac{\tilde{A}}{\det A}\boldsymbol{b} \quad \left(x_i = \frac{1}{\det A}\sum_{k=1}^{n} \tilde{a}_{ik} b_k \ , \ \tilde{a}_{ik} = \Delta_{ki}\right)$$

として求まります。一方で、$\boldsymbol{b} = 0$ ($\boldsymbol{b}$ の成分が全て 0) の場合

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} = 0$$

このため、$\boldsymbol{b} = 0$ では $\det A \neq 0$ のとき $\boldsymbol{x} = 0$ が解になり（自明な解,trivial solution)、$\det A = 0$ のときに $\boldsymbol{x} \neq 0$ の解を持つことになります。あまり意味のない単純な例として

$$\begin{pmatrix} \alpha & \alpha \\ \alpha & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0$$

という場合では、行列式は 0 になり、$x_1 + x_2 = 0$ を満たすものが解になります。

$n \times n$ 行列 A の固有値 λ とその固有ベクトル $\boldsymbol{v}$ は

$$A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$$

$\lambda\boldsymbol{v}$ を左辺に持っていき単位行列をつけて

$$(A - \lambda I)\boldsymbol{v} = 0$$

この式の形は連立方程式 (3) での $\boldsymbol{b} = 0$ の場合なので、$\boldsymbol{v} = 0$ 以外の解があるための条件

$$\det[A-\lambda I]=0$$

が出てきます。これを固有方程式 (characteristic equation)、$\det[A-\lambda I]$ を固有多項式 (characteristic polynomial) と言います。固有方程式を解けば λ を求められます。

多項式とついているのは、行列式の定義から、$n\times n$ 行列のとき

$$\det[A-\lambda I]=(-1)^n\lambda^n+c_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+c_0$$

という形になるからです。c_i はスカラーです。もしくは、$(\lambda I-A)\boldsymbol{v}=0$ とすれば $\det[\lambda I-A]$ になるので、-1 を省けて

$$\det[\lambda I-A]=\lambda^n+c'_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+c'_0$$

とすることもできます。

行列式の性質は

(i) $n\times n$ 行列のスカラー倍 αA では $\det[\alpha A]=\alpha^n\det A$.

(ii) $\det A=\det A^t$.

(iii) $\det A^*=(\det A)^*$.

(iv) $\det A^\dagger=\det A^*$.

(v) $\det[AB]=\det A\det B$.

(i) は行列式の各項は n 個の積で、それら全てが α 倍されるために α^n 倍になります。(ii) は行列式の定義そのままです。実際に、3×3 行列では、転置 A^t では成分を b_{ij} として

$$\begin{aligned}\det A^t&=\sum_{k_1,k_2,k_3=1}^{3}\epsilon_{k_1k_2k_3}b_{1k_1}b_{2k_2}b_{3k_3}\\&=b_{11}b_{22}b_{33}+b_{12}b_{23}b_{31}+b_{13}b_{21}b_{32}-b_{11}b_{23}b_{32}-b_{12}b_{21}b_{33}-b_{13}b_{22}b_{31}\end{aligned}$$

$a_{ij}=b_{ji}$ なので、$\det A$ と一致します。(iii) は、レヴィ・チビタ記号は実数であることと、複素数の $a^*b^*=(ab)^*,\ a^*+b^*=(a+b)^*$ からです。(iv) は (ii),(iii) から

$$\det A^\dagger=(\det A^t)^*=(\det A)^*=\det A^*$$

(v) を示すために別の行列式の性質を出します。1 列目に和を含むみ

$$T=\begin{pmatrix}a_{11}+b_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}+b_{21}&a_{22}&\cdots&a_{2n}\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\a_{n1}+b_{n1}&a_{n2}&\cdots&a_{nn}\end{pmatrix}$$

となっている行列の行列式は

$$
\begin{aligned}
\det T &= \sum_{k_1,\ldots,k_n} \epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}(a_{k_1 1}+b_{k_1 1})a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n} \\
&= \sum_{k_1,\ldots,k_n} \epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}a_{k_1 1}a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n} + \sum_{k_1,\ldots,k_n} \epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}b_{k_1 1}a_{k_2 2}\cdots a_{k_n n} \\
&= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ b_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}
\end{aligned}
$$

と分解できます。i 列目に足されていても同様です。これを利用します。また、$k_1,\ldots,k_n$ の和の範囲は省いていきます。

まず、2×2 行列とします。このときの $\det[AB]$ は

$$
\begin{aligned}
\det[AB] &= \begin{vmatrix} a_{11}b_{11}+a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11}+a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} \\
&= b_{11}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{21} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} + b_{21}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{22} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} \\
&= \sum_{k_1} b_{k_1 1}\begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ a_{2k_1} & a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \end{vmatrix} \\
&= \sum_{k_1} b_{k_1 1}\Bigg(\begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{11}b_{12} \\ a_{2k_1} & a_{21}b_{12} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{12}b_{22} \\ a_{2k_1} & a_{22}b_{22} \end{vmatrix}\Bigg) \\
&= \sum_{k_1} b_{k_1 1}\Bigg(b_{12}\begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{11} \\ a_{2k_1} & a_{21} \end{vmatrix} + b_{22}\begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{12} \\ a_{2k_1} & a_{22} \end{vmatrix}\Bigg) \\
&= \sum_{k_1}\sum_{k_2} b_{k_1 1}b_{k_2 2}\begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{1k_2} \\ a_{2k_1} & a_{2k_2} \end{vmatrix}
\end{aligned}
$$

行列式は $\Sigma\epsilon_{st}a_{1s}a_{2t}$ なので、$k_1=k_2$ なら 0、$k_1=1,k_2=2$ の並びなら $+\det A$ です。そして、$k_1=2,k_2=1$ と並びを 1 回変えると $-\det A$ です。よって

$$
\det A\sum_{k_1,k_2}\epsilon_{k_1k_2}b_{k_1 1}b_{k_2 2} = \det A\det B
$$

となり、$\det[AB]=\det A\det B$ です。

この手順を $n\times n$ 行列で行えば

$$\begin{vmatrix} a_{11}b_{11}+a_{12}b_{21}\cdots+a_{1n}b_{n1} & \cdots & a_{11}b_{1n}+a_{12}b_{2n}\cdots+a_{1n}b_{nn} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}b_{11}+a_{n2}b_{21}\cdots+a_{nn}b_{n1} & \cdots & a_{n1}b_{nn}+a_{n2}b_{2n}\cdots+a_{nn}b_{nn} \end{vmatrix}$$

$$= \sum_{k_1} b_{k_1 1} \begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22}\cdots+a_{1n}b_{n2} & \cdots & a_{11}b_{1n}+a_{12}b_{2n}\cdots+a_{1n}b_{nn} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nk_1} & a_{n1}b_{12}+a_{n2}b_{22}\cdots+a_{nn}b_{n2} & \cdots & a_{n1}b_{n2}+a_{n2}b_{22}\cdots+a_{nn}b_{nn} \end{vmatrix}$$

$$= \sum_{k_1} b_{k_1 1}b_{k_2 2} \begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{1k_2} & a_{11}b_{13}+a_{12}b_{23}\cdots+a_{1n}b_{n3} & \cdots & a_{11}b_{1n}+a_{12}b_{2n}\cdots+a_{1n}b_{nn} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nk_1} & a_{nk_2} & a_{n1}b_{13}+a_{n2}b_{23}\cdots+a_{nn}b_{n3} & \cdots & a_{n1}b_{n2}+a_{n2}b_{22}\cdots+a_{nn}b_{nn} \end{vmatrix}$$

$$= \sum_{k_1,\ldots,k_n} b_{k_1 1}b_{k_2 2}\cdots b_{k_n n} \begin{vmatrix} a_{1k_1} & a_{1k_2} & \cdots & a_{1k_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nk_1} & a_{nk_2} & \cdots & a_{nk_n} \end{vmatrix}$$

このときも行列式の定義から、複数の k_i が同じだと 0 になり、k_i が $i=1,2,\ldots,n$ と並んでいれば $+\det A$、1 回の並びの入れ替えで $-\det A$ です。よって、$n\times n$ 行列の積 AB の行列式は

$$\det[AB] = \det A \sum_{k_1,\ldots,k_n} \epsilon_{k_1k_2\cdots k_n} b_{k_1 1}b_{k_2 2}\cdots b_{k_n n} = \det A \det B$$

となります。

固有値の積は行列式、固有値の和はトレースと等しいことを示します。

まず、固有値の積は行列式になることを示します。固有多項式を $\rho(\lambda) = \det(\lambda I - A)$ とします。$n\times n$ 行列 A の固有値は $\rho(\lambda) = 0$ の解であり、$\rho(\lambda)$ は n 次の多項式です。このため、解は一般的に n 個あって、それを $\lambda = s_1, s_2, \ldots, s_n$ とします。そうすると $\rho(\lambda)=0$ は

$$\rho(\lambda) = (\lambda - s_1)(\lambda - s_2)\cdots(\lambda - s_n) = 0$$

と書けます ($(\lambda - s_i)^m$ の場合もありますが今は関係ないので無視します)。$\lambda = 0$ では

$$\rho(0) = (-1)^n s_1 s_2 \cdots s_n$$

となり、$\det[\lambda I - A]$ で $\lambda = 0$ とすれば $\rho(0) = \det[-A]$ なので

$$(-1)^n s_1 s_2\cdots s_n = (-1)^n \det A$$

$$s_1 s_2 \cdots s_n = \det A$$

よって、A の行列式は固有値の積と一致するのが分かります。

固有値の和とトレースが一致することを示すために、$\det[\lambda I - A]$ をさらに見ていきます。$n\times n$ 行列で行いますが、4×4 行列あたりを使うと分かりやすいです。$D = \lambda I - A$ は

$$D = \lambda I - A = \begin{pmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \lambda - a_{nn} & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & \lambda - a_{nn} \end{pmatrix}$$

$D=\lambda I-A$ の成分を d_{ij} と書くことにします。これの行列式での λ^{n-1} の項がどうなるのかを求めます。そのために、$d_{nn}=\lambda-a_{nn}$ を含む項を取り出します。行列 D とその行列式

$$\det D=\sum_{k_1,k_2,\dots,k_n=1}^{n}\epsilon_{k_1k_2\dots k_{n-1}n}d_{1k_1}d_{2k_2}\cdots d_{nk_n}$$

を見ると、d_{nn} のときに λ^{n-1} が出てくるのが分かります。これは n 行と n 列では d_{nn} のみが λ を含んでいるためです。例えば、$k_n=1$ とした

$$\sum_{k_1,k_2,\dots,k_{n-1}=1}^{n}\epsilon_{k_1k_2\dots k_{n-1}1}d_{1k_1}d_{2k_2}\cdots d_{(n-1)k_{n-1}}d_{n1}$$

では、$k_1=1$ のとき 0 なので d_{11} が使えないために λ が 1 つ減り、d_{n1} にも λ はいないので λ^{n-2} までしか作れないからです (d_{nn} 以外を使うと 2 つ λ が使えなくなる)。

d_{nn} の項は

$$\sum_{k_1,k_2,\dots,k_{n-1}=1}^{n}\epsilon_{k_1k_2\dots k_{n-1}n}d_{1k_1}d_{2k_2}\cdots d_{(n-1)k_{n-1}}d_{nn}$$

となっていて、$k_1,k_2,\dots,k_{n-1}$ が n の項は 0 になります。そうすると

$$d_{nn}\sum_{k_1,k_2,\dots,k_{n-1}=1}^{n-1}\epsilon_{k_1k_2\dots k_{n-1}}d_{1k_1}d_{2k_2}\cdots d_{(n-1)k_{n-1}}$$

と書けます。和の部分は、$n\times n$ 行列 D から n 行と n 列を抜いた $(n-1)\times(n-1)$ 行列 $D_{(n-1)}$ の行列式になっていることが分かります。$D_{(n-1)}$ は A から n 行と n 列をを抜いた $A_{(n-1)}$ と $(n-1)\times(n-1)$ 単位行列 $I_{(n-1)}$ によって

$$D_{(n-1)}=\lambda I_{(n-1)}-A_{(n-1)}$$

なので、これの行列式を使うことで

$$\det[\lambda I-A]=d_{nn}\det[D_{(n-1)}]+\cdots=(\lambda-a_{nn})\det[\lambda I_{(n-1)}-A_{(n-1)}]+\cdots$$

「$\cdots$」部分は λ^{n-2} までしか出てこない項です。

今の話を繰り返すことで

$$\begin{aligned}\det[\lambda I_{(n-1)}-A_{(n-1)}]&=(\lambda-a_{(n-1)(n-1)})\det[\lambda I_{(n-2)}-A_{(n-2)}]\\&=(\lambda-a_{(n-1)(n-1)})(\lambda-a_{(n-2)(n-2)})\cdots(\lambda-a_{11})\end{aligned}$$

となります。よって、λ^{n-1} までを書くと

$$\begin{aligned}\det[\lambda I-A]&=(\lambda-a_{nn})(\lambda-a_{(n-1)(n-1)})(\lambda-a_{(n-2)(n-2)})\cdots(\lambda-a_{11})+\cdots\\&=\lambda^n-(a_{11}+a_{22}+\cdots+a_{nn})\lambda^{n-1}+\cdots\end{aligned}$$

そして、A の固有値 $s_1,\dots,s_n$ から

$$\det[\lambda I - A] = (\lambda - s_1)(\lambda - s_2)\cdots(\lambda - s_n) = \lambda^n - (s_1 + s_2 + \cdots + s_n)\lambda^{n-1} + \cdots$$

なので、λ^{n-1} の係数の比較から

$$s_1 + s_2 + \cdots + s_n = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn} = \mathrm{tr}A$$

となり、行列 A の固有値の和は行列 A のトレースに等しいことが分かります。例えば、$A^2 = AA$ の固有値は λ^2 なので

$$\mathrm{tr}A^2 = s_1^2 + s_2^2 + \cdots + s_n^2$$

これは k 乗の場合で成立します ($\mathrm{tr}A^k = s_1^k + s_2^k + \cdots + s_n^k$)。

ブロック行列で書かれる行列の行列式の関係もあります。$m\times m$ 行列 A、$n\times n$ 行列 B、$m\times n$ 行列 C によって

$$N = \begin{pmatrix} A & C \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

となっている正方行列 N の行列式は

$$\det N = \det A \det B$$

正方行列 M がブロック行列 A,B,C,D によって

$$M = \begin{pmatrix} A & C \\ D & B \end{pmatrix}$$

となっており、A が $m\times m$ 正則行列、B が $n\times n$ 行列なら

$$\det M = \det A \det[B - DA^{-1}C]$$

$A = B = X,\ C = D = Y$ のときは

$$\det M = \det[X+Y]\det[X-Y]$$

これらは「Schur 分解」で示しています。

最後にヤコビアンと関数の逆変換に触れておきます。微分可能な $x_i = f_i(y_1, y_2, \dots, y_n)$ $(i = 1, 2, \dots, n)$ があり、行列式

$$\det J_{(n)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_1}{\partial y_2} & \cdots & \cdots & \dfrac{\partial x_1}{\partial y_n} \\ \dfrac{\partial x_2}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_2}{\partial y_2} & \cdots & \cdots & \dfrac{\partial x_2}{\partial y_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dfrac{\partial x_{n-1}}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_{n-1}}{\partial y_2} & \cdots & \cdots & \dfrac{\partial x_{n-1}}{\partial y_n} \\ \dfrac{\partial x_n}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_n}{\partial y_2} & \cdots & \cdots & \dfrac{\partial x_n}{\partial y_n} \end{vmatrix}$$

が0でなければ、逆変換となる $y_i = g_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ が一意的に存在します。$J_{(n)}$ はヤコビ行列 (Jacobian matrix)、$\det J_{(n)}$ はヤコビアン (Jacobian) やヤコビ行列式と呼ばれます。簡単に帰納法による証明を示しておきます。

$F_i(x_i, y_1, y_2, \dots, y_n) = f_i(y_1, y_2, \dots, y_n) - x_i = 0$ とします。$n = 1$ のときは偏微分が存在すればいいので成立します。n の場合

$$
\begin{aligned}
F_1(x_1, y_1, y_2, \dots, y_n) &= 0 \\
F_2(x_2, y_1, y_2, \dots, y_n) &= 0 \\
&\vdots \\
F_n(x_n, y_1, y_2, \dots, y_n) &= 0
\end{aligned}
$$

という n 個の方程式があります。y_{n-1} までは $\det J_{(n-1)} \neq 0$ なら逆変換が存在すると仮定しています。このため、y_k $(k = 1, 2, \dots, n-1)$ は $x_1, \dots, x_n$ の関数として書けるので、F_1 から F_{n-1} では y_k に関して解くことができて、それらを

$$
y_1 = \phi_1(x_1, \dots, x_n, y_n),\ \dots, y_{n-1} = \phi_{n-1}(x_1, \dots, x_n, y_n)
$$

とします。そうすると、残っている F_n は

$$
F_n(x_n, \phi_1(x, y_n), \dots, \phi_{n-1}(x, y_n), y_n) = G(x, y_n) = 0
$$

$x_1, \dots, x_n$ は略して x と書いています (y でも同様に書きます)。$y_n = \phi_n(x)$ になるには $G(x, y_n)$ を y_n で微分したとき 0 でなければいいです ($G(x, y_n)$ が y_n を含んでいる必要がある)。

なので、y_n の微分を見ると多変数での連鎖則から

$$
\frac{\partial G(x, y_n)}{\partial y_n} = \frac{\partial F_n}{\partial \phi_1}\frac{\partial \phi_1}{\partial y_n} + \cdots + \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{n-1}}\frac{\partial \phi_{n-1}}{\partial y_n} + \frac{\partial F_n}{\partial y_n}
$$

$n = 3$ としてみます。$n = 3$ では

$$
\frac{\partial G(x, y_3)}{\partial y_3} = \frac{\partial F_3}{\partial y_1}\frac{\partial \phi_1}{\partial y_3} + \frac{\partial F_3}{\partial y_2}\frac{\partial \phi_2}{\partial y_3} + \frac{\partial F_3}{\partial y_3}
$$

F_1, F_2 を y_3 で偏微分したものは

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F_1}{\partial y_3} &= \frac{\partial F_1}{\partial y_1}\frac{\partial \phi_1}{\partial y_3} + \frac{\partial F_1}{\partial y_2}\frac{\partial \phi_2}{\partial y_3} + \frac{\partial F_1}{\partial y_3} = 0 \\
\frac{\partial F_2}{\partial y_3} &= \frac{\partial F_2}{\partial y_1}\frac{\partial \phi_1}{y_3} + \frac{\partial F_2}{\partial y_2}\frac{\partial \phi_2}{y_3} + \frac{\partial F_2}{\partial y_3} = 0
\end{aligned}
$$

これは

$$
A_{(2)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial y_1} & \dfrac{\partial F_1}{\partial y_2} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial y_1} & \dfrac{\partial F_2}{\partial y_2} \end{pmatrix}
$$

とすれば

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

の連立方程式なので

$$x_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial y_3} = \frac{1}{\det A_{(2)}}(\frac{\partial F_1}{\partial y_2}\frac{\partial F_2}{\partial y_3} - \frac{\partial F_2}{\partial y_2}\frac{\partial F_1}{\partial y_3})$$

$$x_2 = \frac{\partial \phi_2}{y_3} = \frac{-1}{\det A_{(2)}}(\frac{\partial F_1}{\partial y_1}\frac{\partial F_2}{\partial y_3} - \frac{\partial F_2}{\partial y_1}\frac{\partial F_1}{\partial y_3})$$

$F_i = g_i(y) - x_i = 0$ から、$A_{(2)}$ での F_i は全て $x_i = g_i(y)$ に置き換わるので、$A_{(2)}$ は $J_{(2)}$ と同じです。これらを入れて

$$\begin{aligned}\frac{\partial G(x, y_3)}{\partial y_3} &= \frac{1}{\det A_{(2)}}\Big(\frac{\partial F_3}{\partial y_1}(\frac{\partial F_1}{\partial y_2}\frac{\partial F_2}{\partial y_3} - \frac{\partial F_2}{\partial y_2}\frac{\partial F_1}{\partial y_3}) - \frac{\partial F_3}{\partial y_2}(\frac{\partial F_1}{\partial y_1}\frac{\partial F_2}{\partial y_3} - \frac{\partial F_2}{\partial y_1}\frac{\partial F_1}{\partial y_3}) + \det A_{(2)}\frac{\partial F_3}{\partial y_3}\Big) \\ &= \frac{1}{\det A_{(2)}}(\frac{\partial F_1}{\partial y_2}\frac{\partial F_2}{\partial y_3}\frac{\partial F_3}{\partial y_1} - \frac{\partial F_1}{\partial y_3}\frac{\partial F_2}{\partial y_2}\frac{\partial F_3}{\partial y_1} - \frac{\partial F_1}{\partial y_1}\frac{\partial F_2}{\partial y_3}\frac{\partial F_3}{\partial y_2} + \frac{\partial F_1}{\partial y_3}\frac{\partial F_2}{\partial y_1}\frac{\partial F_3}{\partial y_2} + \det A_{(2)}\frac{\partial F_3}{\partial y_3})\end{aligned}$$

行列 $A_{(2)}$ を 3×3 行列に拡張した行列 $A_{(3)}$ を

$$A_{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial y_1} & \frac{\partial F_1}{\partial y_2} & \frac{\partial F_1}{\partial y_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial y_1} & \frac{\partial F_2}{\partial y_2} & \frac{\partial F_2}{\partial y_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial y_1} & \frac{\partial F_3}{\partial y_2} & \frac{\partial F_3}{\partial y_3} \end{pmatrix}$$

とすれば

$$\begin{aligned}\frac{\partial G(x, y_3)}{\partial y_3} &= \frac{1}{\det A_{(2)}}(a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} + a_{13}a_{21}a_{32} + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})a_{33}) \\ &= \frac{1}{\det A_{(2)}}(a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33}) \\ &= \frac{\det A_{(3)}}{\det A_{(2)}}\end{aligned}$$

$\det A_{(2)} \neq 0$ なので、$\det A_{(3)} \neq 0$ なら微分は 0 になりません。これは n の場合でも同じことが言えます (一般的にしたいならクラメルの定理なんかを使えばいい)。

　これから、$\det J_{(n)} \neq 0$ $(J_{(n)} = A_{(n)})$ なら $y_n = \phi_n(x)$ になります。なので、$k = 1, 2, \ldots, n-1$ において $y_k = \phi_k(x, \phi_n(x)) = f_k(x)$ となり、n では $y_n = f_n(x)$ となります。

　よって、$n-1$ のとき $\det J_{(n-1)} \neq 0$ なら $x_i = g_i(y)$ $(i = 1, \ldots, n-1)$ の逆変換 $y_i = f_i(x)$ が存在するとしたとき、$y_n = f_n(x)$ となるためには $\det J \neq 0$ が要求されるので帰納法から証明されたことになります。