行列

行列の基本的な性質を示していきます。
大文字のローマ文字は行列、小文字のローマ文字やギリシャ文字はスカラー、太字はベクトルとします。行列 A の成分は a_{ij} や $(A)_{ij}$ のように表記しています。また、$1\times n$ や $n\times 1$ 行列はベクトルの表記を使っている場合もあります。

表記から始めます。ベクトルは太字で書くことにします。n 次元ベクトル $\boldsymbol{v}$ があり、これを基底 $\boldsymbol{e}_i$ $(i=1,2,\ldots,n)$ で展開すると

$$\boldsymbol{v}=v_1\boldsymbol{e}_1+v_2\boldsymbol{e}_2+\cdots v_n\boldsymbol{e}_n$$

となる係数 v_i が出てきます。これを基底 $\boldsymbol{e}_i$ でのベクトル成分の意味で

$$\boldsymbol{v}=(v_1\ v_2\ \ \ldots\ \ v_n) \tag{1a}$$

もしくは

$$\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \tag{1b}$$

と表記します。(1a) と書けば行ベクトル (row vector)、(1b) では列ベクトル (column vector) と呼ばれます。ベクトルに対して行、列ベクトルどちらの表記を使うかは区別が必要なければ基本的に任意です。
これらを拡張して

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

と表記したものを $m\times n$ 行列 ($m\times n$ matrix) と言います。行列には大文字のローマ文字が使われることが多いです。横方向を行、縦方向を列と呼ぶので、$a_{11},a_{12},\ldots,a_{1n}$ は 1 行目、$a_{11},a_{21},\ldots,a_{m1}$ は 1 列目、$a_{21},a_{22},\ldots,a_{2n}$ は 2 行目、$a_{12},a_{22},\ldots,a_{m2}$ は 2 列目、というように続いていきます。なので、a_{ij} の添え字の i が行、j が列に対応します。行ベクトルは $1\times n$ 行列、列ベクトルは $n\times 1$ 行列です。
a_{ij} $(1\le i\le m,\ 1\le j\le n)$ は行列 A の i 行 j 列の成分や要素と呼ばれます (例えば a_{21} は 2 行 1 列の成分)。行列 A の i 行 j 列の成分 a_{ij} を指すことを $(A)_{ij}$ や行列 A の (i,j) 成分と書いたりもします。
行列の成分に行列を使うこともあります。行列を縦線、横線で区切って小さい行列に区分けしたとき、その行列をブロック行列 (block matrix)、小分けされた行列部分をブロックと呼びます。例えば、T を 4×4 行列、A,B,C を 2×2 行列として

$$T=\begin{pmatrix} A & C \\ 0 & B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & c_{11} & c_{12} \\ a_{21} & a_{22} & c_{21} & c_{22} \\ 0 & 0 & b_{11} & b_{12} \\ 0 & 0 & b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

のように表記され、$A,B,C,0$ がブロックです。
ここでは行列は大文字を使い、その成分には対応する小文字を使いますが、区別せずにそのまま A_{ij} と書かれる場合も多いです。

また、英語だと行列の成分には element や entry、ベクトルの成分には component と分けて使っています（どちらも element とする場合もある)。
基本的な単語をいくつか並べると

- 行と列の数が同じ $n \times n$ 行列は正方行列 (square matrix)
- 正方行列 A の成分 a_{ii} $(i = 1, 2, \ldots, n)$ のことを対角成分 (diagonal)
- 対角成分以外を非対角成分 (off-diagonal)
- 非対角成分が 0 のとき対角行列 (diagonal matrix)
- 正方行列で対角成分が 1 で他が 0 のとき単位行列 (identity matrix)
- 正方行列の対角成分の和はトレース (対角和、trace)
- 積 $AB = BA$ が単位行列になる行列 B は行列 A の逆行列 (inverse matrix)
- 逆行列を持つなら正則行列 (regular matrix, non-singular matrix)
- 行と列を入れ替えることを転置（transpose）

和と積は

- $m \times n$ 行列 A, B の和 $A + B$ の成分は $a_{ij} + b_{ij}$
- 行列 A のスカラー倍 αA の成分は αa_{ij}
- $l \times m$ 行列 A と $m \times n$ 行列 B の積 AB の成分は $\displaystyle\sum_{k=1}^{m} a_{ik} b_{kj} \quad (i = 1, 2, \ldots, l\ ,\ j = 1, 2, \ldots, n)$

対角行列は

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

という形です。対角行列は $A = \mathrm{diag}(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn})$ と表記されたりします。
単位行列は $A = \mathrm{diag}(1, 1, \ldots, 1)$ のことです。単位行列はクロネッカーデルタ δ_{ij} ($i = j$ のとき 1、$i \neq j$ のとき 0) に対応します。単位行列には I や E が使われることが多いです。ここでは I を使うことにことにし、$(I)_{ij} = \delta_{ij}$ となります。
転置は t や T によって A^t, A^T のように表記され、A^t は成分 a_{ij} を a_{ji} とした行列です ($B = A^t,\ b_{ij} = a_{ji}$)。成分で書くときは $(a_{ij})^t, a^t_{ij}$ といった表記が使われ、$(a_{ij})^t = a_{ji}$ です。また、$(A^t)_{ij}$ のような表記もありますが、これは行列 A を転置した行列 $B = A^t$ の i 行 j 列という意味になります ($(B)_{ij} = (A^t)_{ij} = (a_{ij})^t = a_{ji}$)。
正則行列 A の逆行列には A^{-1} の表記が使われます。なので、逆行列 A^{-1} の定義は $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ と書かれます。また、A^{-1} の逆行列は同じように $(A^{-1})^{-1} = A$ で、A^{-1} も正則行列です。
よく出てくる行列をまとめると

$$\begin{aligned} A^t = A:&\quad \text{対称行列 (symmetry matrix)} \\ A^t = -A:&\quad \text{反対称行列 (anti-symmetry matrix)} \\ A^tA = AA^t = I:&\quad \text{直交行列 (orthogonal matrix)} \\ A^\dagger = A:&\quad \text{エルミート行列 (hermitian matrix)} \\ A^\dagger = -A:&\quad \text{反エルミート行列 (anti-hermitian matrix)} \\ A^\dagger A = AA^\dagger = I:&\quad \text{ユニタリー行列 (unitary matrix)} \end{aligned}$$

反は anti でなく skew を使うこともあります。「†」はエルミート共役の記号で、複素共役、エルミート共役の項で説明しています。対称、反対称行列は、正方行列を転置したとき同じ行列になるなら対称行列、符号が反転するなら反対称行列です。直交行列は転置が逆行列になる正方行列です。

- 行列の和と積

$m\times n$ 行列 A,B の和 $A+B$ は同じ成分同士を足します。なので、行列 A,B の成分を a_{ij},b_{ij} とすれば $C=A+B$ の成分は $c_{ij}=a_{ij}+b_{ij}$ となります。2×3 行列と 5×5 行列の和といったものは定義されていません。

和の転置は $(c_{ij})^t=(a_{ij}+b_{ij})^t$ から、左辺は c_{ji} なので右辺は $a_{ji}+b_{ji}$ です。よって、$(A+B)^t=A^t+B^t$ となります。

行列同士の積は $l\times m$ 行列 A と $m\times n$ 行列 B に対して定義されます。A の列と B の行の数が一致している必要があります。積 AB によって作られる行列は $l\times n$ 行列となり、$C=AB$ の成分は

$$c_{ij}=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}b_{kj}\quad (i=1,2,\dots,l\ ,\ j=1,2,\dots,n)$$

添え字 k の位置は $l\times m$ と $m\times n$ の m の部分になります。n 次元ベクトルの内積は $1\times n$ 行列と $n\times 1$ 行列の積と同じです。積の計算で注意すべきなのは一般的に $AB\neq BA$ となることです。これ以外は通常の積の結合法則と分配法則

$$A(BC)=(AB)C\ ,\ A(B+C)=AB+AC$$

に従います。示すのは簡単で、A を $l\times m$、B を $m\times n$、C を $n\times l$ とすれば

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{m}(A)_{ik}(BC)_{kj}=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}(\sum_{a=1}^{n}b_{ka}c_{aj})=\sum_{k=1}^{m}\sum_{a=1}^{n}a_{ik}b_{ka}c_{aj}&=\sum_{a=1}^{n}(\sum_{k=1}^{m}a_{ik}b_{ka})c_{aj}\\&=\sum_{a=1}^{n}(AB)_{ia}(C)_{aj}\end{aligned}$$

となるからです。分配法則も同様です。

単位行列 I との積は $AI=IA=A$ で、クロネッカーデルタを使えば $l\times m$ 行列 A と $m\times m$ 単位行列 I との積は

$$\begin{aligned}(AI)_{ij}&=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}\delta_{kj}\quad (i=1,2,\dots,l\ ,\ j=1,2,\dots,m)\\&=a_{i1}\delta_{1j}+a_{i2}\delta_{2j}+\cdots+a_{ij}\delta_{jj}+\cdots+a_{im}\delta_{mj}\end{aligned}$$

と書けます。そして、クロネッカーデルタ δ_{kj} は $k=j$ のときが 1、$k\neq j$ では 0 なので

$$(AI)_{ij}=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}\delta_{kj}=a_{ij}\delta_{jj}=a_{ij}=(A)_{ij}\ \Rightarrow\ AI=A$$

となることが確認できます。

A,B が正則行列のとき、その積 AB は正則行列です。A,B の逆行列 A^{-1},B^{-1} との積を見ると

$$B^{-1}A^{-1}AB=B^{-1}B=I$$

となり、AB の逆行列 $(AB)^{-1}$ は $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ として与えられるからです。ただし、正則行列同士の和は一般的に正則行列にならないことに注意してください。

- 転置

　転置の性質として

(i) $(A^t)^t = A$。

(ii) $(AB)^t = B^tA^t$。

(iii) A とその転置 A^t の積 AA^t は対称行列。

(iv) 反対称行列の対角成分は 0。

(v) $A + A^t$ は対称行列、$A - A^t$ は反対称行列。

(vi) 任意の正方行列は対称行列と反対称行列の和で書ける。

(vii) A が正則なら A^t は正則。

(i) は A の転置は a_{ji} で、その転置は a_{ij} なので $(A^t)^t = A$。(ii) での積 AB の転置 $(AB)^t$ は成分 $(AB)_{ij}$ を $(AB)_{ji}$ にすることです。$(AB)_{ji}$ を変形していくと

$$(AB)_{ji} = \sum_{k=1}^{m} a_{jk}b_{ki} = \sum_{k=1}^{m}(a_{kj})^t(b_{ik})^t = \sum_{k=1}^{m}(b_{ik})^t(a_{kj})^t = \sum_{k=1}^{m}(B^t)_{ik}(A^t)_{kj} = (B^tA^t)_{ij}$$

これから、積に対する転置は

$$(AB)^t = B^tA^t \quad (((AB)^t)_{ij} = (AB)_{ji} = (B^tA^t)_{ij})$$

となり、(ii) が示されます。(iii) は $(AA^t)^t = (A^t)^tA^t = AA^t$ のためです。(iv) は A の成分を a_{ij} と書けば、$a_{ij} = -a_{ji}$ から $i = j$ となる対角成分は 0 です。(v) は $A + A^t$ は $(A + A^t)^t = A^t + A$ から対称、$(A - A^t)^t = A^t - A$ から反対称と分かります。(vi) は

$$A = \frac{1}{2}A + \frac{1}{2}A + \frac{1}{2}A^t - \frac{1}{2}A^t = \frac{1}{2}(A + A^t) + \frac{1}{2}(A - A^t)$$

と変形すれば (iv) から第一項は対称、第二項は反対称です。(vii) は $(A^{-1})^tA^t = (AA^{-1})^t = I$ から、A^t の逆行列は $(A^t)^{-1} = (A^{-1})^t$ と与えられるためです。

- 複素共役、エルミート共役

　行列の複素共役「$*$」は行列の各成分の複素共役を取ることです。例えば

$$A = \begin{pmatrix} 5+i & 3 \\ i & 1+2i \end{pmatrix}\ ,\ A^* = \begin{pmatrix} 5-i & 3 \\ -i & 1-2i \end{pmatrix}$$

AB の複素共役は、複素数の積 ab の複素共役は $(ab)^* = a^*b^*$ なので

$$(AB)^* = \sum_{k=1}^{m}(a_{jk}b_{ki})^* = \sum_{k=1}^{m} a^*_{jk}b^*_{ki} = A^*B^*$$

同様に、複素数が $(a^*)^* = a$ なので $(A^*)^* = A$ です。

　複素共役にさらに転置を加えたものをエルミート共役 (hermite conjugate) と呼び、「$\dagger$」で表します。ただし、複素共役を $\overline{A}$、エルミート共役を A^* と表記する場合もあるので注意が必要です。エルミート共役は転置を加えるので、上の A では

$$A^\dagger = (A^*)^t = (A^t)^* = \begin{pmatrix} 5-i & -i \\ 3 & 1-2i \end{pmatrix}$$

$A^\dagger = A$ となる行列をエルミート行列（hermitian matrix)、$A^\dagger = -A$ では反エルミート行列（anti-hermitian matrix)、エルミート共役が逆行列になる行列 $A^{-1} = A^\dagger$ はユニタリー行列 (unitary matrix) と言います。また、反エルミート行列は歪エルミート行列 (skew-hermitian matrix) とも呼ばれます。

エルミート共役の性質として

(i) $(A^\dagger)^\dagger = A$。

(ii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$。

(iii) $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$。

(iv) $A + A^\dagger$ はエルミート行列、$A - A^\dagger$ は反エルミート行列。

(v) A が正則なら $A^\dagger$ は正則。

(vi) $A^\dagger A,\ AA^\dagger$ はエルミート行列。

(i),(ii),(iii) は複素共役が $(A^*)^* = A, (AB)^* = A^*B^*$ なので転置の性質によって示されます。(iv) は $(A + A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + A$ からエルミート行列、$(A - A^\dagger)^\dagger = A^\dagger - A$ から反エルミート行列です。(v) は $(A^{-1})^\dagger A^\dagger = (AA^{-1})^\dagger = I$ から、逆行列が $(A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$ と与えられるためです。(vi) は $(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger A,\ (AA^\dagger)^\dagger = (A^\dagger)^\dagger A^\dagger = AA^\dagger$ からエルミート行列です。

また、H をエルミート行列とすると $(iH)^\dagger = -iH^\dagger = -iH$ から、iH は反エルミート行列になります。

- トレース

トレース (対角和) は正方行列の対角成分を全て足す計算で、$\mathrm{tr}A$ や $\mathrm{Tr}A$ と表記され

$$\mathrm{tr}A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = a_{11} + a_{22} + \cdots a_{nn}$$

と定義されます。トレースの性質は、A, B, C を正方行列として

(i) $\mathrm{tr}(A+B) = \mathrm{tr}A + \mathrm{tr}B$

(ii) $\mathrm{tr}(\alpha A) = \alpha \mathrm{tr}A$

(iii) $\mathrm{tr}A^t = \mathrm{tr}A$

(iv) $\mathrm{tr}(AA^t) = \mathrm{tr}(A^tA)$

(v) $\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$

(vi) $\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(CAB) = \mathrm{tr}(BCA)$

トレースは対角成分の和なので (i),(ii) は和の規則から分かります。(iii) は対角成分は転置で変わらないので $\mathrm{tr}A^t = \mathrm{tr}A$ です。(iv) は

$$\mathrm{tr}(AA^t) = \sum_{i=1}^{n}(AA^t)_{ii} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} a_{ij}a_{ji} = \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n} a_{ji}a_{ij} = \sum_{j=1}^{m}(A^tA)_{jj} = \mathrm{tr}(A^tA)$$

から分かります。(v) は AB のトレースを変形すれば

$$\mathrm{tr}(AB) = \sum_{i=1}^{n}(AB)_{ii} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{ki} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} b_{ki}a_{ik} = \sum_{k=1}^{n}(BA)_{kk} = \mathrm{tr}(BA)$$

となり、(vi) は $\mathrm{tr}(ABC)$ は AB を 1 つの行列とすれば $\mathrm{tr}((AB)C) = \mathrm{tr}(C(AB)) = \mathrm{tr}(CAB)$ となります。また、A, B が $m \times n$ 行列でも転置との積 A^tB, BA^t は正方行列なので

$$\mathrm{tr}(A^tB)=\sum_{i=1}^{n}(A^tB)_{ii}=\sum_{i=1}^{n}(\sum_{j=1}^{m}(A^t)_{ij}(B)_{ji})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}(B)_{ji}(A^t)_{ij}=\sum_{j=1}^{m}(BA^t)_{jj}=\mathrm{tr}(BA^t)$$

- 行列式

　詳しくは「行列式」で触れます。行列式 (determinant) は $\det A$ や $|A|$ と表記され、例えば 2×2 行列 A では

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

と定義します。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。$n\times n$ 行列の行列式は、レヴィ・チビタ記号 $\epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}$ によって

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

もしくは

$$\det A=\sum_{k_1=1}^{n}\sum_{k_1=2}^{n}\cdots\sum_{k_n=1}^{n}\epsilon_{k_1k_2\ldots k_n}a_{k_11}a_{k_22}\cdots a_{k_nn}$$

と定義されます。レヴィ・チビタ記号は $\epsilon_{123\ldots}=+1$ で、$1,2,3,\ldots$ の並びの偶置換は $+1$、奇置換は -1、同じ数字が 2 個以上あれば 0 となる記号です。例えば、ϵ_{123} では

$$\epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312}=+1$$

$$\epsilon_{132}=\epsilon_{213}=\epsilon_{321}=-1$$

$$\epsilon_{111}=\epsilon_{112}=\epsilon_{113}=\epsilon_{221}=\cdots=0$$

となります。定義から、対角行列の行列式は対角成分の積になります。

　$AB, A+B$ のように複数あるとき $\det[AB], \det[A+B]$ と [ ] を使って表記しますが、個人的な趣味なので一般的な表記というわけではないです。

　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) $\det[AB]=\det A\det B$。

これらは「行列式」で示しています。

- 基本変形

　行列の成分 (i,j) だけが 1 で他が 0 の正方行列を E_{ij} とします。添え字を付けてますが行列です。例えば 3×3 行列では

$$E_{12}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

この行列によって

$$\begin{aligned} &E(i,j)=I-E_{ii}-E_{jj}+E_{ij}+E_{ji} \quad (i\neq j) \\ &E(\alpha;i)=I-E_{ii}+\alpha E_{ii} \\ &E(\alpha;i,j)=I+\alpha E_{ij} \quad (i\neq j) \end{aligned}$$

とした 3 個の行列を基本行列 (elementary matrix) と呼びます。$E(i,j)$ は単位行列の $(i,i),(j,j)$ 成分を 0 にして $(i,j),(j,i)$ 成分を 1 にした行列、$E(\alpha;i)$ は単位行列の (i,i) 成分を α にした行列、$E(\alpha;i,j)$ は単位行列の (i,j) 成分を α にした行列です。これらとの積を見ます。

　$m\times m$ 行列 E_{ij} と $m\times n$ 行列 A の積は

$$(E_{ij}A)_{st}=\sum_{k=1}^{m}(E_{ij})_{sk}(A)_{kt}=(E_{ij})_{sj}(A)_{jt}$$

E_{ij} は (i,j) 成分だけが 1 なので、和は $k=j$ のとき 0 でないです。そして、$s=i$ のときだけが 1 なので $E_{ij}A$ の (i,t) 成分は A の (j,t) 成分になり、残りは 0 です。つまり、$E_{ij}A$ は i 行目が A の j 行目の値を持ち他は 0 の行列です。3×3 行列での E_{12} で具体的に見ると

$$E_{12}A=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となり、$E_{12}A$ は A の 2 行目の成分を持ちます。

　そうすると、$E(i,j)A$ は

$$\begin{aligned} IA &\Rightarrow \quad A\text{ のまま} \\ E_{ii}A &\Rightarrow \quad i\text{ 行目が }A\text{ の }i\text{ 行目} \\ E_{jj}A &\Rightarrow \quad j\text{ 行目が }A\text{ の }j\text{ 行目} \\ E_{ij}A &\Rightarrow \quad i\text{ 行目が }A\text{ の }j\text{ 行目} \\ E_{ji}A &\Rightarrow \quad j\text{ 行目が }A\text{ の }i\text{ 行目} \end{aligned}$$

から、$E_{ii}A$ と $E_{jj}A$ が A の i 行目と j 行目を 0 にし、$E_{ij}A$ で A の j 行目が i 行目に入り、$E_{ji}A$ で A の i 行目が j 行目に入ります。よって、$E(i,j)A$ は A の i 行目と j 行目が入れ替わった行列になります。

　$E(\alpha;i)A$ は

$$\begin{aligned} IA &\Rightarrow \quad A\text{ のまま} \\ E_{ii}A &\Rightarrow \quad i\text{ 行目が }A\text{ の }i\text{ 行目} \\ \alpha E_{ii}A &\Rightarrow \quad i\text{ 行目が }A\text{ の }i\text{ 行目の }\alpha\text{ 倍} \end{aligned}$$

から、$E_{ii}A$ で A の i 行目が 0 になり、$\alpha E_{ii}A$ で i 行目に A の i 行目の α 倍が入ります。よって、$E(\alpha;i)A$ は i 行目を α 倍します。

$E(\alpha;i,j)A$ は

$$
\begin{aligned}
IA &\Rightarrow \quad A\text{のまま}\\
\alpha E_{ij}A &\Rightarrow \quad i\text{ 行目が }A\text{ の }j\text{ 行目の }\alpha\text{ 倍}
\end{aligned}
$$

これは A に A の j 行目の α 倍を A の i 行目に足します。

というわけで、まとめると

- ◦ $E(i,j)A$ は A の i 行と j 行を入れ替える。
- ◦ $E(\alpha;i)A$ は A の i 行を α 倍する。
- ◦ $E(\alpha;i,j)A$ は A の i 行に j 行の α 倍を足す。

このように行を操作することを行基本変形 (elementary row transformation) と言います。

右から A との積を取ると

$$
AE_{12} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & a_{11} & 0 \\ 0 & a_{21} & 0 \\ 0 & a_{31} & 0 \end{pmatrix}
$$

となるので、右からでは列を入れ替えます。よって、同様に

- ◦ $AE(i,j)$ は A の i 列と j 列を入れ替える。
- ◦ $AE(\alpha;i)$ は A の i 列を α 倍する。
- ◦ $AE(\alpha;i,j)$ は A の i 列に j 列の α 倍を足す。

これらは列基本変形 (elementary column transoformation) と呼ばれます。

基本変形を含む行列式は

- ◦ $\det[E(i,j)A] = -\det A$
- ◦ $\det[E(\alpha;i)A] = \alpha\det A$
- ◦ $\det[E(\alpha;i,j)A] = \det A$

これらを示します。$n\times n$ 行列にしますが、3×3 行列とすると分かりやすいです。

$\det E(i,j)$ は、単位行列の $(i,i),(j,j)$ 成分が 0 で $(i,j),(j,i)$ 成分が 1 なので、$i<j$ とすれば

$$
\det E(i,j) = \epsilon_{12\ldots j\ldots i\ldots n}a_{11}a_{22}\cdots a_{ij}\cdots a_{ji}\cdots a_{nn}
$$

$E(i,j)$ は、1 行目では $a_{11}=1$、2 行目では $a_{22}=1$、として続いていき、i 行目で a_{ii} は 0 で $a_{ij}=1$、$i+1$ 行目から $a_{i+1,i+1}=1$ と続き、j 行目で $a_{jj}=0$ で $a_{ji}=1$ となり、後は対角成分が $a_{nn}=1$ まで続くので、このようになります。このとき、$i<j$ です。そして、i と j の間の数を m 個として、$\epsilon_{12\ldots i\ldots j\ldots n}$ の並びにするには、j を $m+1$ 回右に動かして、i を m 回左に動かせばいいです。なので、$2m+1$ 回の奇数回動かすためにレヴィ・チビタ記号は -1 です。よって、$\det E(i,j)=-1$ となり、

$$
\det[E(i,j)A] = \det[E(i,j)]\det A = -\det A
$$

$E(\alpha;i)$ は単位行列の対角成分の 1 つが α になっているだけなので

$$\det[E(\alpha;i)A] = \det[E(\alpha;i)]\det A = \alpha\det A$$

$E(\alpha;i,j)$ は対角成分と (i,j) 成分だけが 0 でないために、$i<j$ として

$$\det E(\alpha;i,j) = \epsilon_{12\ldots n}a_{11}a_{22}\cdots a_{nn} + \epsilon_{12\ldots j\ldots j\ldots n}a_{11}a_{22}\cdots a_{ij}\cdots a_{jj}\cdots a_{nn}$$

レヴィ・チビタ記号に同じ j が 2 ついるので第二項は 0 です。よって、$\det E(\alpha;i,j)=1$ から

$$\det[E(\alpha;i,j)A] = \det A$$

となります。

- 固有値、固有ベクトル

固有値、固有ベクトルは「行列式」でも触れています。

$n\times n$ 行列 A、n 次元ベクトル $\boldsymbol{v}\neq 0$、実数もしくは複素数 λ があり、それらが

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

となっているとき、λ を A の固有値 (eigenvalue)、$\boldsymbol{v}$ を A の固有ベクトル (eigenvector) と言います。この式は eigenvalue equation と呼ばれます。行列 A の固有値と固有ベクトルを求めることを固有値問題と言います (eigenvalue equation を満たす λ と $\boldsymbol{v}\neq 0$ を求める問題)。

A が正則行列のとき、$\lambda=0$ だと

$$\begin{aligned} A\boldsymbol{v} &= 0 \\ A^{-1}A\boldsymbol{v} &= 0 \\ \boldsymbol{v} &= 0 \end{aligned}$$

となってしまうので、正則行列は 0 の固有値を持ちません。

$\lambda\boldsymbol{v}$ を左辺に持っていくと

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

と書けますが、これだと括弧内で行列 A とスカラー λ の差になってしまい、この計算は定義されていません。なので、λ を成分に持つ行列によって

$$\lambda\boldsymbol{v} \ \Rightarrow\ \sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}v_j = \lambda v_i$$

となるようにします。これは $\lambda_{ij}=\lambda\delta_{ij}=(\lambda I)_{ij}$ とすればいいだけです。例えば、2×2 行列なら

$$\lambda\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda v_1 \\ \lambda v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda I\boldsymbol{v}$$

ということです。なので

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

となります。ただし、行列同士の計算とはっきりと分かるときは単位行列 I を省いて書くことが多いので注意が必要です。

$A^2 = AA$ の固有値は A の固有値が λ なら、λ^2 になります。これはすぐに分かって

$$\begin{aligned} A\boldsymbol{v} &= \lambda\boldsymbol{v} \\ AA\boldsymbol{v} &= \lambda A\boldsymbol{v} \\ A^2\boldsymbol{v} &= \lambda^2\boldsymbol{v} \end{aligned}$$

となるからです。

異なる固有値に対応する固有ベクトルは線形独立であることを示します。まず、異なる固有値 $s_1, s_2, \ldots, s_m$ に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_m$ は線形独立と仮定します。次に、異なる固有値 s_{m+1} に対応する $\boldsymbol{v}_{m+1}$ を加えます。このときもまだ線形独立であるなら、帰納法から線形独立と示せたことになります。

$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_m \neq 0$ は線形独立とするので

$$\alpha_1\boldsymbol{v}_1 + \alpha_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + \alpha_m\boldsymbol{v}_m = 0 \tag{2}$$

となるのは、$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m$ が 0 のときです。これが $\boldsymbol{v}_{m+1}$ を加えても成立するかを見ます。

$\boldsymbol{v}_{m+1}$ を加えて

$$c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_m\boldsymbol{v}_m + c_{m+1}\boldsymbol{v}_{m+1} = 0 \tag{3}$$

とします。これに $s_i, \boldsymbol{v}_i$ $(i = 1, 2, \ldots, m+1)$ を固有値、固有ベクトルに持つ行列 A $(A\boldsymbol{v}_i = s_i\boldsymbol{v}_i)$ をかけて

$$\begin{aligned} 0 &= c_1A\boldsymbol{v}_1 + c_2A\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_mA\boldsymbol{v}_m + c_{m+1}A\boldsymbol{v}_{m+1} \\ &= c_1s_1\boldsymbol{v}_1 + c_2s_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_ms_m\boldsymbol{v}_m + c_{m+1}s_{m+1}\boldsymbol{v}_{m+1} \end{aligned}$$

(3) を入れると

$$\begin{aligned} 0 &= c_1s_1\boldsymbol{v}_1 + c_2s_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_ms_m\boldsymbol{v}_m - s_{m+1}(c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_m\boldsymbol{v}_m) \\ &= c_1(s_1 - s_{m+1})\boldsymbol{v}_1 + c_2(s_2 - s_{m+1})\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_m(s_m - s_{m+1})\boldsymbol{v}_m \end{aligned}$$

となり、$\boldsymbol{v}_1$ から $\boldsymbol{v}_m$ までの式になります。$\boldsymbol{v}_1$ から $\boldsymbol{v}_m$ までは線形独立としているので、(2) から

$$c_1(s_1 - s_{m+1}) = 0\ ,\ c_2(s_2 - s_{m+1}) = 0\ ,\ c_m(s_m - s_{m+1}) = 0$$

として成立します。そして、固有値は全て異なるとしているので、$c_1, c_2, \ldots, c_m$ が 0 です。なので、(3) は $c_{m+1}\boldsymbol{v}_{m+1} = 0$ になり、固有ベクトルは $\boldsymbol{v}_{m+1} \neq 0$ なので $c_{m+1} = 0$ です。よって、(3) は $c_i = 0$ のときに成立するので、$\boldsymbol{v}_{m+1}$ を加えても線形独立のままとなり、異なる固有値に対応する固有ベクトルは線形独立となります。

- 行列の指数関数

　正方行列 A の指数関数はべき級数によって

$$e^A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} \tag{4}$$

と定義されます。A^0 は単位行列です。これは指数関数のテイラー展開を行列にしたものです。

　収束性を示します。まず、行列のノルム $|| \ ||$ を

$$||A||^2 = |a_{11}|^2 + |a_{12}|^2 + \cdots + |a_{nn}|^2 = \sum_{i,j=1}^{n} |A_{ij}|^2$$

と定義します。$| \ |$ は絶対値です。これはノルムの定義

$$||A|| \geq 0 \ , \ ||\alpha A|| = |\alpha| \ ||A|| \ , \ ||A + B|| \leq ||A|| + ||B||$$

を満たします。積に対しては

$$||AB||^2 = \sum_{i,j=1}^{n} |(AB)_{ij}|^2$$

A の i 列目の成分によるベクトルを $\boldsymbol{a}^{(i)}$、B の j 行目の成分によるベクトルを $\boldsymbol{b}^{(j)}$ とすれば

$$|(AB)_{ij}|^2 = |\sum_{k=1}^{n} (A)_{ik}(B)_{kj}|^2 = |\boldsymbol{a}^{(i)} \cdot \boldsymbol{b}^{(j)}|^2$$

シュワルツの不等式から

$$||AB||^2 = \sum_{i,j=1}^{n} |(AB)_{ij}|^2 = \sum_{i,j=1}^{n} |\boldsymbol{a}^{(i)} \cdot \boldsymbol{b}^{(j)}|^2 \leq \sum_{i,j=1}^{n} |\boldsymbol{a}^{(i)}|^2 |\boldsymbol{b}^{(j)}|^2$$

最右辺は、ベクトルは $1 \times n$ 行列なので

$$\sum_{i,j=1}^{n} |\boldsymbol{a}^{(i)}|^2 |\boldsymbol{b}^{(j)}|^2 = \sum_{i=1}^{n} |\boldsymbol{a}^{(i)}|^2 \sum_{j=1}^{n} |\boldsymbol{b}^{(j)}|^2 = ||A||^2 ||B||^2$$

よって、積のノルムは

$$||AB||^2 \le ||A||^2||B||^2$$

という関係を持ちます。

ここで、ある行列 M が

$$M = c_0I + c_1A + c_2A^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} c_kA^k \tag{5}$$

と展開できるとします。A^k のノルムは

$$||A^k|| = ||AA^{k-1}|| \le ||A||\ ||A^{k-1}||$$

$k=1$ では

$$||A^1|| \le ||A||^1$$

$k=2$ では

$$||A^2|| = ||AA|| \le ||A||\ ||A|| = ||A||^2$$

と続くので

$$||A^k|| = ||AA^{k-1}|| \le ||A||\ ||A^{k-1}|| \le ||A||\ ||A||^{k-1} = ||A||^k$$

そうすると、(5) の各項で

$$||c_kA^k|| \le |c_k|\ ||A||^k \tag{6}$$

なので

$$\begin{aligned}||M|| = ||c_0I + c_1A + c_2A^2 + \cdots|| &\le ||c_0I|| + ||c_1A|| + ||c_2A^2|| + \cdots \\ &\le |c_0|\ ||I|| + |c_1|\ ||A|| + |c_2|\ ||A||^2 + \cdots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} |c_k|\ ||A||^k\end{aligned}$$

これから、(5) は

$$\frac{|c_{k+1}|\ ||A||^{k+1}}{|c_k|\ ||A||^k} = \frac{|c_{k+1}|}{|c_k|}||A||$$

から

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|c_{k+1}|}{|c_k|}=L\ ,\ ||A||<L^{-1}$$

として収束半径 L^{-1} を与えれば、ダランベールの判定法から絶対収束します。

M を e^A とすれば、$||e^A||\leq e^{||A||}$ となり、

$$\frac{|c_{k+1}|}{|c_k|}=\frac{k!}{(k+1)!}=\frac{1}{k+1}\ \Rightarrow\ 0$$

から、L^{-1} は無限大と分かるので (4) は絶対収束です。そして、各項において (6) なので、ワイエルシュトラスの M 判定法から一様収束です。そして、e^{tA} は一様収束するので各項で微分ができて、e^{tA} の微分は

$$\frac{d}{dt}e^{tA}=\frac{d}{dt}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^kA^k}{k!}=\frac{d}{dt}(I+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{t^kA^k}{k!})=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{t^{k-1}A^k}{(k-1)!}=A\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^kA^k}{k!}=Ae^{tA}$$

となります。

また、ハウスドルフの公式（量子力学の「ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式」参照）から $AB=BA$ なら $e^{A+B}=e^Ae^B$ なので、$e^{-A}e^A=1$ となり、e^A の逆行列は e^{-A} です。

- クロネッカー積

クロネッカー積 (Kronecker product) は、$m\times n$ 行列 A と $p\times q$ 行列 B から $(mp)\times(nq)$ 行列を作る積で

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

と定義されています。行列の中に行列 B が入っているので、実際の成分はもっと多くなります。「$\otimes$」がクロネッカー積を表します。クロネッカー積は行列のテンソル積 (tensor product) とも呼ばれます。

単純な例として、2×2 単位行列 I_2 と 2×3 行列 A のクロネッカー積は

$$I_2\otimes A=\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & 0 & a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix}$$

$$A\otimes I_2=\begin{pmatrix} a_{11}I_2 & a_{12}I_2 & a_{13}I_2 \\ a_{21}I_2 & a_{22}I_2 & a_{23}I_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{12} & 0 & a_{13} & 0 \\ 0 & a_{11} & 0 & a_{12} & 0 & a_{13} \\ a_{21} & 0 & a_{22} & 0 & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{21} & 0 & a_{22} & 0 & a_{23} \end{pmatrix}$$

クロネッカー積の規則は

(i) $(A+B)\otimes C=A\otimes C+B\otimes C$

(ii) $A\otimes(B+C)=A\otimes B+A\otimes C$

(iii) $(\alpha A)\otimes B = A\otimes(\alpha B) = \alpha(A\otimes B)$

(iv) $(A\otimes B)\otimes C = A\otimes(B\otimes C)$

(i),(ii) は、クロネッカー積の各成分は $a_{ij}B$ なので、$(A+B)\otimes C$ の各成分で

$$(A+B)_{ij}C = (a_{ij}+b_{ij})C = a_{ij}C + b_{ij}C$$

として成立するからです。(iii) は $(\alpha a_{ij})B = \alpha(a_{ij}B)$ からです。(iv) は

$$\begin{aligned}
(A\otimes B)\otimes C &= \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \otimes C \\
&= \begin{pmatrix} (a_{11}B)\otimes C & (a_{12}B)\otimes C & \cdots & (a_{1n}B)\otimes C \\ (a_{21}B)\otimes C & (a_{22}B)\otimes C & \cdots & (a_{2n}B)\otimes C \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (a_{m1}B)\otimes C & (a_{m2}B)\otimes C & \cdots & (a_{mn}B)\otimes C \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{11}(B\otimes C) & a_{12}(B\otimes C) & \cdots & a_{1n}(B\otimes C) \\ a_{21}(B\otimes C) & a_{22}(B\otimes C) & \cdots & a_{2n}(B\otimes C) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}(B\otimes C) & a_{m2}(B\otimes C) & \cdots & a_{mn}(B\otimes C) \end{pmatrix} \\
&= A\otimes(B\otimes C)
\end{aligned}$$

また、$m\times n$ 行列 A、$p\times q$ 行列 B による $(mp)\times(nq)$ 行列 $A\otimes B$ と、$n\times r$ 行列 C、$q\times s$ 行列 D による $(nq)\times(rs)$ 行列 $C\otimes D$ の積は

$$(A\otimes B)(C\otimes D) = \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11}D & \cdots & c_{1r}D \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n1}D & \cdots & c_{nr}D \end{pmatrix}$$

B, D は行列としたままでの $(1,1)$ 成分は (BD は $p\times s$ 行列)

$$a_{11}c_{11}BD + a_{12}c_{21}BD + \cdots + a_{1n}c_{n1}BD = \sum_{i=1}^{n} a_{1i}c_{i1}BD = (AC)_{11}BD$$

他の成分も同じなので

$$(A\otimes B)(C\otimes D) = \begin{pmatrix} (AC)_{11}BD & \cdots & (AC)_{1r}BD \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (AC)_{m1}BD & \cdots & (AC)_{mr}BD \end{pmatrix} = (AC)\otimes(BD)$$

となります。

- 直和

 正方行列 A, B の直和 (direct sum) は

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

と定義されます。「$\oplus$」は直和の記号です。直和は対角成分に行列 A, B が入っているために、そのまま通常の和の規則を満たします。

A は $m \times 1$ 行列 $\boldsymbol{v}$、B は $n \times 1$ 行列 $\boldsymbol{w}$ に作用する行列としたとき、$A \oplus B$ と $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}$ による 2×1 行列 $(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w})$ の積が $(A\boldsymbol{v}, B\boldsymbol{w})$ となるように作られています。つまり、行列の直和は m, n 次元ベクトル空間 V^m, V^n の直和 $V^m \oplus V^n$ に対する線形演算子に対応します。