

第 1 章

ベクトルと行列の演算

線型計算 (Linear computation) とは、有限次元 (n 次元) ベクトルと行列を使用して表現される式を計算することである。線型計算は様々な分野に共通して現れ、しかも汎用性が高い。また、コンピュータ向きの計算であり、現在の CPU がサポートしている SIMD (Single Instruction Multiple Data) 命令はこの線型計算のための機能と言って良く、そのためコンピュータの性能を測るベンチマークテストにも利用される。本章では今まで学んできたベクトル / 行列の定義、演算とその性質について復習しておこう。

1.1 実数と複素数

本書で我々が扱う数は、自然数 $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$ 、整数 $\mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ 、有理数 (既約分数) $\mathbb{Q} = \{m/n \mid m, n \in \mathbb{Z}, n \neq 0\}$ 、実数 \mathbb{R} 、複素数 $\mathbb{C} = \{a + b\sqrt{-1} \mid a, b \in \mathbb{R}\}$ の 4 つであり、それらは

$$\mathbb{C} \supset \mathbb{R} \supset \mathbb{Q} \supset \mathbb{Z} \supset \mathbb{N}$$

という包含関係にある。本書ではもっぱら実数 \mathbb{R} と複素数 \mathbb{C} を要素として持つ行列 (matrix) とベクトル (vector) を扱う。

1.1.1 実数の性質

まず、基礎となる実数 \mathbb{R} はどんな数であったか、おさらいしておこう。 $a, b, c \in \mathbb{R}$ は次のような性質を持つ。

1. $a \in \mathbb{R}$ は無限小数として表現される。例えば下記のようになる。

$$\begin{aligned} 2 &= 2.000\dots \text{ (0 が無限に続く)} \\ 1/3 &= 0.333\dots = 0.\dot{3} \text{ (循環小数)} \\ \pi &= 3.141592\dots \text{ (循環しない無限小数=無理数)} \end{aligned}$$

2. 四則演算、即ち加法 (和)、減法 (差)、乗法 (積)、除法 (商) が定義されており、この加減乗除に関して

は、0 で割る除法を除いて代数的に閉じている。即ち、任意の $a, b \in \mathbb{R}$ に対して

$$\left. \begin{array}{l} a + b \\ a - b \\ ab \\ a/b \end{array} \right\} \in \mathbb{R}$$

が常に保証されている。また、2乗と平方根に関しては

$$a^2 \geq 0, \sqrt{a^2} = |a|$$

が常に成り立つ。

3. 加法、乗法に関して、結合律 (結合法則) が成立する。即ち、任意の $a, b, c \in \mathbb{R}$ に対して

$$(a + b) + c = a + (b + c) \quad (1.1)$$

$$(ab)c = a(bc) \quad (1.2)$$

が常に保証される。

4. 加法、乗法に関して、交換律 (交換法則) が成立する。即ち、任意の $a, b \in \mathbb{R}$ に対して

$$a + b = b + a \quad (1.3)$$

$$ab = ba \quad (1.4)$$

が常に保証される。

5. 加法と乗法に関して、分配律 (分配法則) が成立する。即ち、任意の $a, b, c \in \mathbb{R}$ に対して

$$a(b + c) = ab + ac \quad (1.5)$$

が常に保証される。

6. 絶対値 $|a|$ に関して、次の3つの性質 (ノルムの性質) が成立する。即ち、任意の $a, b, c \in \mathbb{R}$ に対して

(a) $|a| \geq 0$ 。かつ、 $|a| = 0 \Leftrightarrow a = 0$ 。

(b) $|ca| = |c||a|$ 。

(c) [三角不等式]^{*1} $|a + b| \leq |a| + |b|$ 。

が常に保証される。

問題 1.1

三角不等式において、等号が成立するような $a, b \in \mathbb{R}$ の具体例を一つ以上挙げよ。

1.1.2 複素数の性質

$a, b \in \mathbb{R}$ を組み合わせ、虚数単位 (imaginary unit) として $i = \sqrt{-1}, i^2 = -1$ を用いて

$$c = a + bi$$

^{*1} 三角形の一辺の長さは他の二辺の長さの和より短い、という平面幾何の定理に由来する。

と表現する数を複素数 (complex number) と呼び、既に述べたように、複素数の集合を \mathbb{C} と書くことにする。

ここで、複素数 $c \in \mathbb{C}$ の a を実数部 (実部, real part) と呼び、 b を虚数部 (虚部, imaginary part) と呼び、

$$\operatorname{Re}(c) = a, \operatorname{Im}(c) = b$$

とも表記する。

複素数が必要になる場面としては、例えば実数を係数とする 2 次方程式 (実係数 2 次方程式) の解を表現する時が挙げられる。例えば

$$3x^2 - 2x + 2 = 0$$

の解は

$$x = \frac{1 \pm \sqrt{2}i}{3} = \frac{1}{3} \pm \frac{\sqrt{2}}{3}i$$

となる。このように虚数部の符号が異なる複素数を共役 (複素数) と呼び、次のように表現する。

定義 1.1 (共役複素数)

$c = a + bi \in \mathbb{C}$ の共役複素数を \bar{c} と書く。この時

$$\bar{c} = a - bi$$

である。

実係数 2 次方程式がもし複素数解を持つのであれば、解は必ず共役複素数になることはすぐ理解できるだろう。

同様に、実係数 n 次代数方程式

$$\sum_{i=0}^n p_i x^i = 0 \quad (p_n \neq 0, p_i \in \mathbb{R}, i = n, n-1, \dots, 0)$$

の解 x は高々 n 個 (重複も含めて n 個ある、という意味) 存在し、実数もしくは複素数になることが知られている。行列の固有値は固有方程式と呼ばれる n 次代数方程式の解であるから、固有値も必ず実数、もしくは複素数で表現できる。

以後、複素数の計算も必要になるので、四則演算、逆数、絶対値の求め方を復習しておく。

定義 1.2 (複素数の四則演算、逆数、絶対値)

実数 a, b, e, f で表現される複素数 $c = a + bi, d = e + fi$ に対して、四則演算と絶対値は次のように計算する。

$$\begin{aligned} c \pm d &= (a + e) \pm (b + f)i \\ cd &= (ae - bf) + (be + af)i \\ \frac{1}{d} &= \frac{\bar{d}}{d\bar{d}} \\ \frac{c}{d} &= c \times \frac{1}{d} \\ |c| &= \sqrt{c\bar{c}} \end{aligned}$$

これらの演算に関しては、実数の諸性質の全てが複素数に於いても満足されることは簡単に証明できる。

問題 1.2

$c = 1 + 2i, d = 2 - 3i$ の時、次の値を求めよ。

1. $3c - 4d$
2. cd
3. c/d
4. $|c|/|d|$

問題 1.3

$a, b \in \mathbb{C}$ の時

$$|a|^2 + |b|^2 - (a - b)\overline{(a - b)} = 2(\operatorname{Re}(ab) + \operatorname{Im}(ab))$$

であることを示せ。

1.2 ベクトルと演算

ベクトル (vector) は原点から点 P 方向へ伸びた「矢印 (\rightarrow)」をイメージすると良い。方向と長さを持った量、それがベクトルである。

ベクトルは点 P の座標値を示せば表現できるが、単なる座標値と区別するために、通常は要素を縦に並べて書き、ベクトルそのものは太字で表現する。例えば 2 次元平面上に於いて、 P の座標値が $(1, 2)$ である時、原点 O から点 P 方向へのベクトル \mathbf{c} は

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

となる。文章中に埋め込む時に、やむを得ず横書きにする時には転置記号 (T) を用いて、 $\mathbf{c} = [1 \ 2]^T$ と書く。

以下、機械的に n 個の要素 $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ または \mathbb{C} を並べて書いたベクトル \mathbf{a} を

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{1.6}$$

と縦に記述し、各要素 a_i が全て実数であれば

$$\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$$

と表現し、複素数になり得る場合は

$$\mathbf{a} \in \mathbb{C}^n$$

と書く。文中に埋め込む時には転置記号を用いて前述のように

$$\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]^T \in \mathbb{R}^n$$

または

$$\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]^T \in \mathbb{C}^n$$

と書く。

このような n 個の要素からなるベクトルを n 次元ベクトルと呼び、全ての要素が実数の時は実 n 次元ベクトル、複素数になり得る場合は複素 n 次元ベクトルと呼ぶ。本書では特に両者を区別する必要が無い場合は単に n 次元ベクトルと呼ぶことにする。

同じ次元数 (=要素数) のベクトル同士では以下の演算が可能である。

定義 1.3 (ベクトルの演算)

n 次元ベクトル $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]^T$, $\mathbf{b} = [b_1 \ b_2 \ \dots \ b_n]^T$ に対して次の演算が定義できる。

加減算

$$\mathbf{a} \pm \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \pm b_1 \\ a_2 \pm b_2 \\ \vdots \\ a_n \pm b_n \end{bmatrix}$$

スカラー倍 任意の $\alpha \in \mathbb{R}$ または \mathbb{C} に対して次のように計算する。

$$c\mathbf{a} = \begin{bmatrix} \alpha a_1 \\ \alpha a_2 \\ \vdots \\ \alpha a_n \end{bmatrix}$$

内積

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^n \overline{a_i} b_i = \overline{\mathbf{a}^T \mathbf{b}} = \overline{(\mathbf{b}, \mathbf{a})}$$

\mathbf{a}, \mathbf{b} が実ベクトルであれば

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

となる。

ベクトルの加算, 及びスカラー倍においては次の性質が成り立つことは前述の実数, 複素数演算の法則から明らかである。。

定理 1.1 (ベクトル演算における結合律, 交換律, 分配律)

任意の n 次元ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, および任意の $\alpha \in \mathbb{C}$ に対して, 次の法則 (律) が成り立つ。

加算の結合律

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c})$$

加算の交換律

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}$$

スカラー倍の分配律

$$\alpha(\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \alpha\mathbf{b} + \alpha\mathbf{c}$$

内積に対しては次の性質が成り立つ。

定理 1.2 (ベクトルの内積演算の性質)

任意の n 次元ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, および任意の $\alpha \in \mathbb{C}$ に対して, 次の法則 (律) が成り立つ。

1. $(\mathbf{a}, \mathbf{b} + \mathbf{c}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) + (\mathbf{a}, \mathbf{c})$
2. $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) \geq 0$
3. $(\alpha\mathbf{b}, \mathbf{c}) = \alpha(\mathbf{b}, \mathbf{c})$
4. $(\mathbf{b}, \alpha\mathbf{c}) = \bar{\alpha}(\mathbf{b}, \mathbf{c})$

問題 1.4

1. $\mathbf{a} = [1 \ 2]^T, \mathbf{b} = [-2 \ -3]^T$ の時, 上記の定理 1.1 及び定理 1.2 が成立することを確認せよ。
2. $\mathbf{a} = [1 + 3i \ 2 - i]^T, \mathbf{b} = [-2 \ -3 + i]^T$ の時, 上記の定理 1.1 及び定理 1.2 が成立することを確認せよ。

1.3 行列の演算

m 次元ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ を左から右に n 本束ね, 一つのかたまりとしたものを行列 (matrix) と呼び,

$$A = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \dots \ \mathbf{a}_n] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

と書く。行列は大文字で表現することが多い。横方向の束を行 (row), 縦方向の束を列 (column) と呼ぶ。このような行列を $m \times n$ 行列, あるいは m 行 n 列の行列と呼び, 要素が全て実数の時は

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

と書き, 複素数になり得る時は

$$A \in \mathbb{C}^{m \times n}$$

と書くことにする。

要素が全て 0 となる行列を零行列 (zero matrix) と呼び, 大文字の O で表現する。下記は全て零行列である。

$$O = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

同じサイズの行列同士は, ベクトル同様, 次のような演算が可能である。

定義 1.4 (行列の加減算, スカラー倍)

$A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, もしくは $A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$ の時, 次のような演算が可能となる。

加減算

$$\begin{aligned}
 A \pm B &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} a_{11} \pm b_{11} & a_{12} \pm b_{12} & \cdots & a_{1n} \pm b_{1n} \\ a_{21} \pm b_{21} & a_{22} \pm b_{22} & \cdots & a_{2n} \pm b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} \pm b_{m1} & a_{m2} \pm b_{m2} & \cdots & a_{mn} \pm b_{mn} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

スカラー倍 任意の $\alpha \in \mathbb{C}$ に対して要素ごとに定数倍する。

$$\alpha B = \begin{bmatrix} \alpha b_{11} & \alpha b_{12} & \cdots & \alpha b_{1n} \\ \alpha b_{21} & \alpha b_{22} & \cdots & \alpha b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha b_{m1} & \alpha b_{m2} & \cdots & \alpha b_{mn} \end{bmatrix}$$

二つの行列 A, B において, A の列数と B の行数が等しい時, 以下のように行列同士の乗算が定義できる。

定義 1.5 (行列の乗算)

A が $m \times l$ 行列, B が $l \times n$ 行列の時, 次のようにして $C := AB$ が計算できる。

$$\begin{aligned}
 C := AB &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1l} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2l} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{ml} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{l1} & b_{l2} & \cdots & b_{ln} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^l a_{1j}b_{j1} & \sum_{j=1}^l a_{1j}b_{j2} & \cdots & \sum_{j=1}^l a_{1j}b_{jn} \\ \sum_{j=1}^l a_{2j}b_{j1} & \sum_{j=1}^l a_{2j}b_{j2} & \cdots & \sum_{j=1}^l a_{2j}b_{jn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{j=1}^l a_{mj}b_{j1} & \sum_{j=1}^l a_{mj}b_{j2} & \cdots & \sum_{j=1}^l a_{mj}b_{jn} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

これらの計算を具体例で確認することにしよう。

例題 1.1

$A, B \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ が

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 3 \\ 1 & 5 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

と与えられている時, $A \pm B, AB, BA$ は以下ようになる。

$$\begin{aligned} A+B &= \begin{bmatrix} -2+0 & 3+(-3) \\ 1+2 & 5+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} \\ A-B &= \begin{bmatrix} -2-0 & 3-(-3) \\ 1-2 & 5-1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 6 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} \\ AB &= \begin{bmatrix} -2 \cdot 0 + 3 \cdot 2 & -2 \cdot (-3) + 3 \cdot 1 \\ 1 \cdot 0 + 5 \cdot 2 & 1 \cdot (-3) + 5 \cdot 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 9 \\ 10 & 2 \end{bmatrix} \\ BA &= \begin{bmatrix} 0 \cdot (-2) + (-3) \cdot 1 & 0 \cdot 3 + (-3) \cdot 5 \\ 2 \cdot (-2) + 1 \cdot 1 & 2 \cdot 3 + 1 \cdot 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & -15 \\ -3 & 11 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

以上の結果から分かる通り, 行列の加算においては交換法則が成立するが, 乗算に関しては成立しない。但し, 結合法則は加算, 乗算において成立する。

問題 1.5

$A, B, C \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ が

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -2 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

と与えられている時, 加法, 乗法に関して結合法則

1. $(A+B)+C = A+(B+C)$
2. $(AB)C = A(BC)$

が成立することを実際に左辺, 右辺の計算を行って確認せよ。

演習問題

1. $\mathbf{u} = [3 \ 2 \ -1]^T, \mathbf{v} = [-2 \ -1 \ 0]^T \in \mathbb{R}^3$ がであるとき, 次の計算を行え。
 - (a) $3\mathbf{u} + 2\mathbf{v}$
 - (b) $(\mathbf{u} - \mathbf{v}, \mathbf{u} + \mathbf{v})$