行列輪講: 第 1 回 行列の基本処理, 逆行列

杉浦 圭祐

慶應義塾大学理工学部情報工学科 松谷研究室

July 28, 2023

目次

目次

このスライドの概要

- 行列とベクトルに関する，重要な公式を確認する
- 「パターン認識と機械学習」などの教科書を読むために必要
- The Matrix Cookbook (公式集) はよく使うので，そちらも参照
  - `math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf`
- 行列の基本処理，逆行列について確認する
  - 行列の基本処理 (行列積，アダマール積，転置，逆)
  - 行列の種類 (対角，対称，エルミート，正定値，直交，ユニタリ)
  - 逆行列 (Woodbury の公式，シューア補行列)

目次

行列の表記

- $\mathbf{A}$ を, m 行 n 列の行列とする ($m \times n$ 行列とよぶ).
- $\mathbf{A}$ の i 行 j 列の要素を, a_{ij} と表記する ((i, j) 要素とよぶ).

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mj} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

- 行列 $\mathbf{A}$ の (i, j) 要素が a_{ij} であるとき, $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ とかく.
- $m = n$ であるとき, $\mathbf{A}$ を正方行列とよぶ (n 次正方行列).
- 各要素が実数であるとき, $\mathbf{A}$ を実行列とよぶ.

行列の転置

- $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ を $m \times n$ 行列とする.
- $\mathbf{A}^\top = \left(a_{ji}\right)$ を, $\mathbf{A}$ の**転置行列**とよぶ.

$$\mathbf{A}^\top = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{i1} & \cdots & a_{m1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1j} & a_{2j} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{mj} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{in} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$\left(\mathbf{A}^\top\right)_{ji} = (\mathbf{A})_{ij} = a_{ij}$$

- $\mathbf{A}^\top$ は $m \times n \to n \times m$ 行列となる.
- $\mathbf{A}$ の行 (列) が, $\mathbf{A}^\top$ の列 (行) に対応する.
- $\mathbf{A}$ の (i, j) 要素は, $\mathbf{A}^\top$ の (j, i) 要素に対応する.

行ベクトルと列ベクトル

- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{ij} \end{pmatrix}$ を $m \times n$ 行列とする.
- n 次の行ベクトルを, 縦に m 個並べたものとして表記できる.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^\top \\ \boldsymbol{\alpha}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m^\top \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_i^\top = \begin{pmatrix} a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \end{pmatrix}$$

- m 次の列ベクトルを, 横に n 個並べたものとして表記できる.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix}$$

行列の和, スカラー倍

- $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right), \mathbf{B} = \left(b_{ij}\right)$ を $m \times n$ 行列とする.
- 2 つの行列の和を, $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ とかく.
- $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ の (i, j) 要素は, 行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ の (i, j) 要素の和である.

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

- $\lambda \in \mathbb{R}$ をスカラー (実数) とする.
- 行列 $\mathbf{A}$ のスカラー倍を, $\lambda\mathbf{A}$ とかく.
- $\lambda\mathbf{A}$ の (i, j) 要素は, 行列 $\mathbf{A}$ の (i, j) 要素の λ 倍である.

$$(\lambda\mathbf{A})_{ij} = \lambda a_{ij}$$

- $(-1)\,\mathbf{A}$ は, $\mathbf{A}$ の各要素の符号を反転させたもので, $-\mathbf{A}$ とかく.

行列の和, スカラー倍

交換法則, 結合法則, 分配法則

$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ を $m \times n$ 行列とする. $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ をスカラー (実数) とする.

$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$	交換法則
$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} = \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C})$	結合法則
$(\lambda + \mu)\,\mathbf{A} = \lambda\mathbf{A} + \mu\mathbf{A}$	分配法則
$\lambda\,(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \lambda\mathbf{A} + \lambda\mathbf{B}$	分配法則
$(\lambda\mu)\,\mathbf{A} = \lambda\,(\mu\mathbf{A})$	結合法則

行列のアダマール積 (Hadamard Product)

- $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right), \mathbf{B} = \left(b_{ij}\right)$ を $m \times n$ 行列とする.
- 2 つの行列のアダマール積を, $\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$ とかく.
- $\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$ の (i, j) 要素は, 行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ の (i, j) 要素の積である.

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B})_{ij} = a_{ij} b_{ij}$$

交換法則, 結合法則, 分配法則

$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ を $m \times n$ 行列とする.

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = \mathbf{B} \odot \mathbf{A} \qquad \text{交換法則}$$

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B}) \odot \mathbf{C} = \mathbf{A} \odot (\mathbf{B} \odot \mathbf{C}) \qquad \text{結合法則}$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \odot \mathbf{C} = \mathbf{A} \odot \mathbf{C} + \mathbf{B} \odot \mathbf{C} \qquad \text{分配法則}$$

行列積

- $\mathbf{A}$ を $l \times m$ 行列, $\mathbf{B}$ を $m \times n$ 行列とする.
- 2 つの行列の積を, $\mathbf{AB}$ とかく.
- $\mathbf{AB}$ は, $(l \times m) \times (m \times n) \to (l \times n)$ 行列となる.
- $\mathbf{AB}$ の (i, j) 要素 $(\mathbf{AB})_{ij}$ は, 次のようになる.

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

- 総和の部分を簡略化して, 次のようにかく ($\mathbf{A}$ の列方向, $\mathbf{B}$ の行方向についての総和).

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

行列積

- $\mathbf{A}$ を $l \times m$ 行列, $\mathbf{B}$ を $m \times n$ 行列とする.
- 行ベクトルと列ベクトルを使って, $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ を次のようにかく.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^\top \\ \boldsymbol{\alpha}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m^\top \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 & \cdots & \mathbf{b}_n \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{AB}$ の (i, j) 要素 $(\mathbf{AB})_{ij}$ は, 次のようにかける.

$$(\mathbf{AB})_{ij} = \boldsymbol{\alpha}_i^\top \mathbf{b}_j = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$

- $(\mathbf{AB})_{ij}$ は, $\mathbf{A}$ の第 i 行ベクトルと, $\mathbf{B}$ の第 j 列ベクトルの内積である.

行列積

- 行列積の各成分を, 積和で表記することは, よくある.
- いまのうちに慣れておきましょう.
- 行列 $\mathbf{AB}$, $\mathbf{ABC}$, $\mathbf{ABCD}$ の (i,j) 要素は,

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{AB})_{ij} &= \sum_k a_{ik} b_{kj} \\
(\mathbf{ABC})_{ij} &= \sum_k a_{ik} (\mathbf{BC})_{kj} = \sum_k a_{ik} \sum_l b_{kl} c_{lj} = \sum_k \sum_l a_{ik} b_{kl} c_{lj} \\
(\mathbf{ABCD})_{ij} &= \sum_k a_{ik} (\mathbf{BCD})_{kj} = \sum_k a_{ik} \sum_l b_{kl} (\mathbf{CD})_{lj} \\
&= \sum_k a_{ik} \sum_l b_{kl} \sum_m c_{lm} d_{mj} = \sum_k \sum_l \sum_m a_{ik} b_{kl} c_{lm} d_{mj}
\end{aligned}
$$

のようにかける.

行列積

- 先ほどの例を一般化する.
- 行列 $\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{A}^{(2)}\cdots\mathbf{A}^{(K)}$ の (i,j) 要素は, $K-1$ 個のインデックス $u_1,\dots,u_{K-1}$ を用いて,

$$\left(\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{A}^{(2)}\cdots\mathbf{A}^{(K)}\right)_{ij} = \underbrace{\sum_{u_1}\sum_{u_2}\cdots\sum_{u_{K-1}}}_{K-1\text{ 個}} a^{(1)}_{i,u_1}a^{(2)}_{u_1,u_2}a^{(3)}_{u_2,u_3}\cdots a^{(K-1)}_{u_{K-2},u_{K-1}}a^{(K)}_{u_{K-1},j}$$

のようにかける.

行列積

結合法則

$$\mathbf{A}\left(\mathbf{BC}\right)=\left(\mathbf{AB}\right)\mathbf{C}=\mathbf{ABC}$$

$\mathbf{A}\left(\mathbf{BC}\right)$ と, $\left(\mathbf{AB}\right)\mathbf{C}$ の (i,j) 要素を比べると,

$$\left(\mathbf{A}\left(\mathbf{BC}\right)\right)_{ij}=\sum_k a_{ik}\left(\mathbf{BC}\right)_{kj}=\sum_k a_{ik}\left(\sum_l b_{kl}c_{lj}\right)=\sum_{k,l}a_{ik}b_{kl}c_{lj}$$

$$\left(\mathbf{AB}\right)\mathbf{C}_{ij}=\sum_l\left(\mathbf{AB}\right)_{il}c_{lj}=\sum_l\left(\sum_k a_{ik}b_{kl}\right)c_{lj}=\sum_{k,l}a_{ik}b_{kl}c_{lj}$$

□

行列積

分配法則

$$\mathbf{A}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}\right)=\mathbf{AB}+\mathbf{AC}$$

$\mathbf{A}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}\right)$ と，$\mathbf{AB}+\mathbf{AC}$ の (i,j) 要素を比べると，

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{A}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}\right)\right)_{ij}&=\sum_k a_{ik}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}\right)_{kj}=\sum_k a_{ik}\left(b_{kj}+c_{kj}\right)\\&=\sum_k a_{ik}b_{kj}+\sum_k a_{ik}c_{kj}\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{AB}+\mathbf{AC}\right)_{ij}=\left(\mathbf{AB}\right)_{ij}+\left(\mathbf{AC}\right)_{ij}=\sum_k a_{ik}b_{kj}+\sum_k a_{ik}c_{kj}$$

$\square$

行列積

非可換

一般に，$\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$ である．

$\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ であるとき，$\mathbf{A}$ と $\mathbf{B}$ は可換であるという．

分配法則

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\,\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC}$$

結合法則

$$(\lambda\mathbf{A})\,\mathbf{B} = \lambda\,(\mathbf{AB}) = \mathbf{A}\,(\lambda\mathbf{B})$$

行列の転置

行列の転置の転置

$$\left(\mathbf{A}^\top\right)^\top = \mathbf{A}$$

行列の転置と和

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^\top = \mathbf{A}^\top + \mathbf{B}^\top$$

行列の転置と積

$$(\mathbf{A}\mathbf{B})^\top = \mathbf{B}^\top \mathbf{A}^\top$$
$$(\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C})^\top = \mathbf{C}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{A}^\top$$
$$(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \cdots \mathbf{A}_{n-1} \mathbf{A}_n)^\top = \mathbf{A}_n^\top \mathbf{A}_{n-1}^\top \cdots \mathbf{A}_2^\top \mathbf{A}_1^\top$$

行列の転置

行列の転置と積

$$(\mathbf{AB})^\top = \mathbf{B}^\top\mathbf{A}^\top$$

$(\mathbf{AB})^\top$ と, $\mathbf{B}^\top\mathbf{A}^\top$ の (i,j) 要素を比べると,

$$\left((\mathbf{AB})^\top\right)_{ij} = (\mathbf{AB})_{ji} = \sum_k a_{jk}b_{ki}$$

$$\left(\mathbf{B}^\top\mathbf{A}^\top\right)_{ij} = \sum_k \left(\mathbf{B}^\top\right)_{ik}\left(\mathbf{A}^\top\right)_{kj} = \sum_k b_{ki}a_{jk}$$

□

零行列

- 行列 $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ の全ての要素が 0 であるとき，$\mathbf{A}$ を零行列とよぶ.
- 零行列を，$\mathbf{0}$ とかく.

零行列

$$\mathbf{A} + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{A} = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A} + (-\mathbf{A}) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{0} = \mathbf{0} \odot \mathbf{A} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{A}\mathbf{0} = \mathbf{0}\mathbf{A} = \mathbf{0}$$

対角行列 (Diagonal Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, n 次正方行列とする.
- $\mathbf{A}$ の対角線上の成分 $a_{11}, \ldots, a_{ii}, \ldots, a_{nn}$ を, 対角成分とよぶ.
- 対角成分以外が 0 であるとき, $\mathbf{A}$ を対角行列とよぶ.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & a_{ii} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn} \end{pmatrix}$$

- 空白部分は 0 で埋まっているものとする.
- 対角成分のみを抜き出して, 対角行列を, 次のようにもかく.

$$\mathbf{A} = \mathrm{diag}(a_{11}, \ldots, a_{ii}, \ldots, a_{nn})$$

単位行列 (Identity Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, $n \times n$ の対角行列とする.
- 対角成分が全て 1 であるとき, $\mathbf{A}$ を単位行列とよぶ.
- $n \times n$ の単位行列を, $\mathbf{I}_n$ とかく (単に $\mathbf{I}$ とすることもある).

単位行列

$\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列とする.

$$\mathbf{A}\mathbf{I}_n = \mathbf{I}_m\mathbf{A} = \mathbf{A}$$

行と列のスカラー倍

- $\mathbf{A}$ を, $m \times n$ 行列とする.
- $\mathbf{A}$ に, 左側から対角行列 $\mathbf{D}$ を掛けると, 行ごとにスケールできる.

$$\mathbf{DA} = \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \boldsymbol{\alpha}_1^\top \\ \vdots \\ d_m \boldsymbol{\alpha}_m^\top \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{A}$ に, 右側から対角行列 $\mathbf{D}$ を掛けると, 列ごとにスケールできる.

$$\mathbf{AD} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \mathbf{a}_1 & \cdots & d_n \mathbf{a}_n \end{pmatrix}$$

対称行列 (Symmetric), 歪対称行列 (Skew-symmetric)

- $\mathbf{A}$ を, n 次正方行列とする.
- $\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}$ が成り立つとき, $\mathbf{A}$ を対称行列とよぶ.
- 対称行列 $\mathbf{A}$ について, $a_{ij} = a_{ji}$ が成り立つ.
- $\mathbf{A}^\top = -\mathbf{A}$ が成り立つとき, $\mathbf{A}$ を歪対称行列とよぶ.
- 歪対称行列 $\mathbf{A}$ について, $a_{ij} = -a_{ji}$ が成り立つ.
- また, 対角成分 a_{ii} は, 常に 0 である $(a_{ii} = -a_{ii})$.
- 任意の正方行列 $\mathbf{A}$ から, 対称行列と, 歪対称行列を作れる.

$$\frac{1}{2}\left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top\right) \qquad \text{対称行列}$$
$$\frac{1}{2}\left(\mathbf{A} - \mathbf{A}^\top\right) \qquad \text{歪対称行列}$$

- 任意の正方行列は, 対称行列と, 歪対称行列の和である.

エルミート行列 (Hermitian, Self-adjoint Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, $n \times n$ の複素行列とする (特に明記しないときは, 実行列とする).
- $\mathbf{A}$ の各要素を複素共役で置き換え, さらに転置したものを, $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}$ とかく.
- $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}$ を, 随伴行列, 共役転置とよぶ.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1+3i & 2-2i \\ 4+5i & 6-7i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} 1-3i & 4-5i \\ 2+2i & 6+7i \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{A}^{\mathrm{H}} = \mathbf{A}$ をみたすとき, $\mathbf{A}$ をエルミート行列, 自己随伴行列とよぶ.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2-2i \\ 2+2i & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} 1 & 2-2i \\ 2+2i & 3 \end{pmatrix}$$

- エルミート行列の対角成分は, 常に実数である.
- 対称行列は, エルミート行列でもある.

正定値行列 (Positive Definite)

- $\mathbf{A}$ を, $n \times n$ の実対称行列とする. 任意のベクトル $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ について,
- $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} > 0 \to \mathbf{A}$ は正定値行列
- $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0 \to \mathbf{A}$ は半正定値行列
- $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} < 0 \to \mathbf{A}$ は負定値行列
- $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} \leq 0 \to \mathbf{A}$ は半負定値行列
- $\mathbf{A}$ が (半) 正定値 $\Longleftrightarrow$ $\mathbf{A}$ の全ての固有値が正 (非負)
- $\mathbf{A}$ が (半) 負定値 $\Longleftrightarrow$ $\mathbf{A}$ の全ての固有値が負 (非正)
- 例えば, ガウス分布の共分散行列 $\mathbf{\Sigma}$ は, 正定値対称行列となる.

$$p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \mathbf{\Sigma}) = \frac{1}{\det(2\pi\mathbf{\Sigma})^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^\top \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}$$

直交行列 (Orthogonal Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, n 次正方行列とする.
- $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}^\top\mathbf{A} = \mathbf{I}$ となるとき, $\mathbf{A}$ を直交行列という.
- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix}$ としたとき,

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^\top \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^\top\mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_1^\top\mathbf{a}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}_n^\top\mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n^\top\mathbf{a}_n \end{pmatrix} = \mathbf{I}$$

であるから,

$$\mathbf{a}_i^\top\mathbf{a}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases}$$

- δ_{ij} はクロネッカーのデルタである.

直交行列 (Orthogonal Matrix)

- 直交行列 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix}$ について, $\mathbf{a}_i^\top \mathbf{a}_j = \delta_{ij}$
- $\mathbf{a}_i$ は, 自分自身との内積が 1, それ以外との内積が 0 になる.
- $\mathbf{a}_i$ のノルムは 1 であり, 他の $\mathbf{a}_j$ とは直交する.
- 言い換えると, $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ は正規直交基底である.
- 直交行列 $\mathbf{A}$ による変換の前後で, 内積は変わらない:

$$(\mathbf{A}\mathbf{x})^\top \mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{x}^\top \mathbf{y}$$

- 直交行列 $\mathbf{A}$ による変換の前後で, ノルムは変わらない:

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{A}\mathbf{x})^\top \mathbf{A}\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \|\mathbf{x}\|$$

- 例えば, 回転行列は, 行列式が 1 の直交行列として定義される.

ユニタリ行列 (Unitary Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, n 次の複素正方行列とする.
- $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{H}} = \mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A} = \mathbf{I}$ であるとき, $\mathbf{A}$ をユニタリ行列という.
- $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}$ は, $\mathbf{A}$ の共役転置である.
- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{pmatrix}$ としたとき, $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ は正規直交基底である.

$$\mathbf{a}_i^\top \mathbf{a}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases}$$

- 直交行列は, ユニタリ行列でもある.

目次

逆行列 (Inverse Matrix)

- $\mathbf{A}$ を, n 次正方行列とする.
- $\mathbf{A}$ に対して, $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$ となるような $\mathbf{B}$ が存在するとき, $\mathbf{B}$ を $\mathbf{A}$ の逆行列とよぶ.
- $\mathbf{A}$ の逆行列を, $\mathbf{A}^{-1}$ とかく.
- もし逆行列が存在するなら, それはただ 1 つだけである. $\mathbf{B}_1$, $\mathbf{B}_2$ を $\mathbf{A}$ の逆行列とすると,

$$\mathbf{B}_2 = \mathbf{IB}_2 = (\mathbf{B}_1\mathbf{A})\,\mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_1\,(\mathbf{AB}_2) = \mathbf{B}_1\mathbf{I} = \mathbf{B}_1$$

- $\mathbf{AB} = \mathbf{I}$ が成り立つなら, $\mathbf{BA} = \mathbf{I}$ である (逆も同様).
  - 証明は省略

対角行列の逆行列

対角行列の逆行列

$\mathbf{A}$ を，$n \times n$ の対角行列とする．$\mathbf{A}$ の逆行列は，$\mathbf{A}$ の対角成分の逆数を，対角成分としてもった対角行列である．対角行列なら，簡単に逆行列が得られる．

$$\mathbf{A}^{-1} = (\mathrm{diag}(a_1, a_2, \ldots, a_n))^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{a_1}, \frac{1}{a_2}, \ldots, \frac{1}{a_n}\right)$$

- 以下を簡単に確認できる．

$$\begin{pmatrix} a_1 & & \\ & \ddots & \\ & & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{a_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{a_n} \end{pmatrix} = \mathbf{I}$$

- $\mathbf{A}$ の全ての対角成分が 0 ではないなら，逆行列が存在する．

上三角行列の逆行列

上三角行列の逆行列

$\mathbf{A}$ を，$n \times n$ の上三角行列とする．$\mathbf{A}$ の逆行列は，対角成分が，$\mathbf{A}$ の対角成分の逆数となった，上三角行列である．

$$\begin{pmatrix} a_{11} & * & \cdots & * \\ & a_{22} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & * \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & * & \cdots & * \\ & a_{22}^{-1} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & * \\ & & & a_{nn}^{-1} \end{pmatrix}$$

- 証明は省略．

下三角行列の逆行列

下三角行列の逆行列

$\mathbf{A}$ を, $n \times n$ の下三角行列とする. $\mathbf{A}$ の逆行列は, 対角成分が, $\mathbf{A}$ の対角成分の逆数となった, 下三角行列である.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ * & a_{22} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ * & \cdots & * & a_{nn} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & & & \\ * & a_{22}^{-1} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ * & \cdots & * & a_{nn}^{-1} \end{pmatrix}$$

.

- 証明は省略.

逆行列

逆行列と転置

逆行列と転置は，順番を入れ替えられる．

$$\left(\mathbf{A}^\top\right)^{-1} = \left(\mathbf{A}^{-1}\right)^\top$$

$$\mathbf{A}^\top\left(\mathbf{A}^{-1}\right)^\top = \left(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right)^\top = \mathbf{I}^\top = \mathbf{I}$$

$$\left(\mathbf{A}^{-1}\right)^\top\mathbf{A}^\top = \left(\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\right)^\top = \mathbf{I}^\top = \mathbf{I}$$

以上より，$\mathbf{A}^\top$ には逆行列 $\left(\mathbf{A}^\top\right)^{-1}$ が存在する．
$\left(\mathbf{A}^\top\right)^{-1}$ を，最初の式に左側から掛ければよい． □

逆行列

逆行列と積

$$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$
$$(\mathbf{ABC})^{-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$
$$(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\cdots\mathbf{A}_{n-1}\mathbf{A}_n)^{-1} = \mathbf{A}_n^{-1}\mathbf{A}_{n-1}^{-1}\cdots\mathbf{A}_2^{-1}\mathbf{A}_1^{-1}$$

$$(\mathbf{AB})\left(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}\right) = \mathbf{A}\left(\mathbf{BB}^{-1}\right)\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}$$
$$\left(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}\right)(\mathbf{AB}) = \mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right)\mathbf{B} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{B} = \mathbf{I}$$

以上より，$\mathbf{AB}$ の逆行列 $(\mathbf{AB})^{-1}$ が存在し，それは $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ である． $\square$

ブロック行列の積

- 2 つのブロック行列の積は, 次のようになる.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{AP} + \mathbf{BR} & \mathbf{AQ} + \mathbf{BS} \\ \mathbf{CP} + \mathbf{DR} & \mathbf{CQ} + \mathbf{DS} \end{pmatrix}$$

- ブロック行列の転置は, 次のようになる.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^\top = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^\top & \mathbf{C}^\top \\ \mathbf{B}^\top & \mathbf{D}^\top \end{pmatrix}$$

- 通常の行列積, 転置と同様である.

ブロック行列の積

- $\mathbf{A}$ をブロック行列とする.
- $\mathbf{A}$ に, 左側からブロック対角行列 $\mathbf{D}$ を掛けると, 行ごとに積を計算できる.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{D}_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \cdots & \mathbf{A}_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{K1} & \cdots & \mathbf{A}_{KL} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1\mathbf{A}_{11} & \cdots & \mathbf{D}_1\mathbf{A}_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{D}_K\mathbf{A}_{K1} & \cdots & \mathbf{D}_K\mathbf{A}_{KL} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{A}$ に, 右側からブロック対角行列 $\mathbf{D}$ を掛けると, 列ごとに積を計算できる.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \cdots & \mathbf{A}_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{K1} & \cdots & \mathbf{A}_{KL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{D}_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}\mathbf{D}_1 & \cdots & \mathbf{A}_{1L}\mathbf{D}_L \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{K1}\mathbf{D}_1 & \cdots & \mathbf{A}_{KL}\mathbf{D}_L \end{pmatrix}$$

ブロック行列の逆行列

- $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ からなるブロック行列について，その逆行列を考える．

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{A}, \mathbf{D}, \mathbf{P}, \mathbf{S}$ は正方行列とする．
- $\mathbf{A}, \mathbf{D}$ には逆行列があるとする．
- $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{S}$ を $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ で表してみよう．

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{AP} + \mathbf{BR} & \mathbf{AQ} + \mathbf{BS} \\ \mathbf{CP} + \mathbf{DR} & \mathbf{CQ} + \mathbf{DS} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{PA} + \mathbf{QC} & \mathbf{PB} + \mathbf{QD} \\ \mathbf{RA} + \mathbf{SC} & \mathbf{RB} + \mathbf{SD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

ブロック行列の逆行列

- 以下が得られる:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{AP}+\mathbf{BR} & \mathbf{AQ}+\mathbf{BS} \\ \mathbf{CP}+\mathbf{DR} & \mathbf{CQ}+\mathbf{DS} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}-\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1} & \left(\mathbf{D}-\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{P} = \left(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$, $\mathbf{R} = -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$.
  - $\mathbf{CP}+\mathbf{DR} = \mathbf{0}$ ゆえ, $\mathbf{R} = -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{CP}$.
  - $\mathbf{AP}+\mathbf{BR} = \mathbf{I}$ に代入して, $\left(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)\mathbf{P} = \mathbf{I}$.
- $\mathbf{S} = \left(\mathbf{D}-\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}$, $\mathbf{Q} = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}-\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}$.
  - $\mathbf{AQ}+\mathbf{BS} = \mathbf{0}$ ゆえ, $\mathbf{Q} = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{BS}$.
  - $\mathbf{CQ}+\mathbf{DS} = \mathbf{I}$ に代入して, $\left(\mathbf{D}-\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)\mathbf{S} = \mathbf{I}$.

ブロック行列の逆行列

- 続いて, 以下が得られる:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{PA} + \mathbf{QC} & \mathbf{PB} + \mathbf{QD} \\ \mathbf{RA} + \mathbf{SC} & \mathbf{RB} + \mathbf{SD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1} & -\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{BD}^{-1} \\ -\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{CA}^{-1} & \left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{P} = \left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$, $\mathbf{Q} = -\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{BD}^{-1}$.
  - $\mathbf{PB} + \mathbf{QD} = \mathbf{0}$ より, $\mathbf{Q} = -\mathbf{PBD}^{-1}$.
  - $\mathbf{PA} + \mathbf{QC} = \mathbf{I}$ に代入して, $\mathbf{P}\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right) = \mathbf{I}$.
- $\mathbf{S} = \left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}$, $\mathbf{R} = -\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{CA}^{-1}$.
  - $\mathbf{RA} + \mathbf{SC} = \mathbf{0}$ より, $\mathbf{R} = -\mathbf{SCA}^{-1}$.
  - $\mathbf{RB} + \mathbf{SD} = \mathbf{I}$ に代入して, $\mathbf{S}\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right) = \mathbf{I}$.

ブロック行列の逆行列

- さらに，以下が得られる:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{PA} + \mathbf{QC} & \mathbf{PB} + \mathbf{QD} \\ \mathbf{RA} + \mathbf{SC} & \mathbf{RB} + \mathbf{SD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{Q} = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}$,
  $\mathbf{P} = \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{CA}^{-1}$.
  - $\mathbf{PA} + \mathbf{QC} = \mathbf{I}$ より，$\mathbf{P} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{QCA}^{-1}$.
  - $\mathbf{PB} + \mathbf{QD} = \mathbf{0}$ より，$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} + \mathbf{Q}\left(\mathbf{D} - \mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right) = \mathbf{0}$.
- $\mathbf{R} = -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$,
  $\mathbf{S} = \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{BD}^{-1}$.
  - $\mathbf{RB} + \mathbf{SD} = \mathbf{I}$ より，$\mathbf{S} = \mathbf{D}^{-1} - \mathbf{RBD}^{-1}$.
  - $\mathbf{RA} + \mathbf{SC} = \mathbf{0}$ より，$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} + \mathbf{R}\left(\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right) = \mathbf{0}$.

ブロック行列の逆行列

ブロック行列の逆行列

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{X} = \mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}$, $\mathbf{Y} = \mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ とすれば,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{Y}^{-1} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1} & \mathbf{Y}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{-1} & -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\ -\mathbf{Y}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{Y}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{Y}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{Y}^{-1} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1} & \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix}$$

ブロック対角行列の逆行列

ブロック対角行列の逆行列

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix}$$

上式を繰り返し適用すると,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & & & \\ & \mathbf{A}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{A}_K \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{-1} & & & \\ & \mathbf{A}_2^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{A}_K^{-1} \end{pmatrix}$$

先ほどの式において, $\mathbf{B} = \mathbf{0}, \mathbf{C} = \mathbf{0}$ とすればよい. □

ブロック行列の逆行列

- 次のようなブロック行列 $\mathbf{A}$ に対する逆行列は,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{X} & \mathbf{XY} \\ & \mathbf{I} & \mathbf{Y} \\ & & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{X} & \\ & \mathbf{I} & -\mathbf{Y} \\ & & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{X} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{X} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & & \\ \mathbf{X} & \mathbf{I} & \\ \mathbf{XY} & \mathbf{Y} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & & \\ -\mathbf{X} & \mathbf{I} & \\ & -\mathbf{Y} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

ブロック行列の逆行列

これを繰り返していくと,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & & & & & \\ \mathbf{A}_1 & \mathbf{I} & & & & \\ \mathbf{A}_2\mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{I} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \mathbf{A}_{K-1}\cdots\mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_{K-1}\cdots\mathbf{A}_2 & \mathbf{A}_{K-1}\cdots\mathbf{A}_3 & \cdots & \mathbf{I} & \\ \mathbf{A}_K\cdots\mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_K\cdots\mathbf{A}_2 & \mathbf{A}_{K-1}\cdots\mathbf{A}_3 & \cdots & \mathbf{A}_K & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & & & & & \\ -\mathbf{A}_1 & \mathbf{I} & & & & \\ & -\mathbf{A}_2 & \mathbf{I} & & & \\ & & -\mathbf{A}_3 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \mathbf{I} & \\ & & & & -\mathbf{A}_K & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

- ブロック行列の逆行列の式:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{X} = \mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}$, $\mathbf{Y} = \mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ とすれば,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{Y}^{-1} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1} & \mathbf{Y}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{Y}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\ -\mathbf{Y}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix}$$

- 各ブロックを比べることで, 有名な Sherman-Morrison-Woodbury の公式が得られる.

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1} &= \mathbf{A}-\mathbf{A}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A} \\
\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1} &= \mathbf{D}^{-1}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\
\mathbf{A}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1} &= \left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\
\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A} &= \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

- 最初の式で, $\mathbf{A}$ が大きな, $\mathbf{D}$ が小さな行列とする ($\mathbf{B}, \mathbf{C}$ は細長い行列).
- 左辺は, 大きな行列の逆行列 $\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$ が必要
- 右辺は, 小さな行列の逆行列 $(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1}$ で, 容易に計算できる

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

Sherman-Morrison-Woodbury の公式 (その 2)

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}^\top\right)^{-1}=\mathbf{A}-\mathbf{A}\mathbf{C}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}^\top\mathbf{A}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{C}^\top\mathbf{A}$$

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}^\top\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}=\mathbf{A}\mathbf{C}\left(\mathbf{B}+\mathbf{C}^\top\mathbf{A}\mathbf{C}\right)^{-1}$$

- 以下の式で，$\mathbf{A}^{-1},\mathbf{B},\mathbf{D}^{-1},\mathbf{C}\to\mathbf{A}^{-1},\mathbf{C},\mathbf{B}^{-1},\mathbf{C}^\top$ と置き換え

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}=\mathbf{A}-\mathbf{A}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}$$

- 以下の式で，$\mathbf{D},\mathbf{C},\mathbf{A},\mathbf{B}\to\mathbf{A}^{-1},\mathbf{C},\mathbf{B}^{-1},\mathbf{C}^\top$ と置き換え

$$\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}=\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$$

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

Sherman-Morrison-Woodbury の公式 (その 3)

$$(\mathbf{A}+\mathbf{BC})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{I}+\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{CA}^{-1}$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{A}+\mathbf{BC})^{-1} = \left(\mathbf{I}+\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{CA}^{-1}$$

- 以下の式で, $\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{D}^{-1} \to \mathbf{A}, \mathbf{I}$ と置き換え

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1} = \mathbf{A} - \mathbf{AB}(\mathbf{D}+\mathbf{CAB})^{-1}\mathbf{CA}$$

- 以下の式で, $\mathbf{D}, \mathbf{A} \to \mathbf{I}, \mathbf{A}^{-1}$ と置き換え

$$(\mathbf{D}+\mathbf{CAB})^{-1}\mathbf{CA} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$$

Sherman-Morrison-Woodbury の公式

Sherman-Morrison-Woodbury の公式 (その 4)

$$\left(\mathbf{A}+\mathbf{b}\mathbf{c}^\top\right)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\mathbf{c}^\top\mathbf{A}^{-1}}{1+\mathbf{c}^\top\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}}$$

$$\mathbf{c}^\top\left(\mathbf{A}+\mathbf{b}\mathbf{c}^\top\right)^{-1} = \frac{\mathbf{c}^\top\mathbf{A}^{-1}}{1+\mathbf{c}^\top\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}}$$

- 以下の式で, $\mathbf{B}, \mathbf{C} \to \mathbf{b}, \mathbf{c}^\top$ と置き換え

$$(\mathbf{A}+\mathbf{B}\mathbf{C})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{I}+\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{A}+\mathbf{B}\mathbf{C})^{-1} = \left(\mathbf{I}+\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}$$

Sherman-Morrison-Woodbury の公式 (その 5)

$$\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}=\mathbf{I}-\mathbf{A}\left(\mathbf{I}+\mathbf{B}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{B}$$

$$\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{A}\left(\mathbf{I}+\mathbf{B}\mathbf{A}\right)^{-1}$$

- 以下の式で, $\mathbf{A}^{-1},\mathbf{B},\mathbf{D}^{-1},\mathbf{C}\to\mathbf{I},\mathbf{A},\mathbf{I},\mathbf{B}$ と置き換え

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}=\mathbf{A}-\mathbf{A}\mathbf{B}\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}$$

- 以下の式で, $\mathbf{D},\mathbf{C},\mathbf{A},\mathbf{B}\to\mathbf{I},\mathbf{A},\mathbf{I},\mathbf{B}$ と置き換え

$$\left(\mathbf{D}+\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}=\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$$

逆行列の公式

逆行列の公式

$$\left(\mathbf{A} + \mathbf{B}\mathbf{B}^\top\right)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{I} + \mathbf{B}^\top\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{B}^\top\mathbf{A}^{-1}$$

$$\left(\mathbf{A} + \mathbf{B}\mathbf{B}^\top\right)^{-1}\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{I} + \mathbf{B}^\top\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}$$

- 以下の式で，$\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{C}, \mathbf{B}^{-1}, \mathbf{C}^\top \to \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{I}, \mathbf{B}^\top$ と置き換え

$$\left(\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}^\top\right)^{-1} = \mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{C}\left(\mathbf{B} + \mathbf{C}^\top\mathbf{A}\mathbf{C}\right)^{-1}\mathbf{C}^\top\mathbf{A}$$

$$\left(\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}^\top\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{A}\mathbf{C}\left(\mathbf{B} + \mathbf{C}^\top\mathbf{A}\mathbf{C}\right)^{-1}$$

逆行列の公式

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}-\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{B}-\mathbf{B}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{B}$$

- 以下の式で，$\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C}\to\mathbf{A}^{-1},\mathbf{B}^{-1},\mathbf{I}$ と置き換え

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\mathbf{C}\right)^{-1}&=\mathbf{A}^{-1}-\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\left(\mathbf{I}+\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\\\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}&=\mathbf{A}-\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}\mathbf{A}\\\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}&=\mathbf{A}-\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{A}\end{aligned}$$

- さらに，$\mathbf{A},\mathbf{B}$ を入れ替え

$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{B}-\mathbf{B}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{B}$$

逆行列の公式

逆行列の公式

$$\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{I}\right)^{-1}$$
$$\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{B}=\mathbf{B}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{A}$$
$$\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}=\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)\mathbf{B}^{-1}$$

- $\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{I}\right)^{-1}$
- $\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}=\mathbf{A}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{B}$
- $\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}=\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{A}^{-1}+\mathbf{B}^{-1}\right)^{-1}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{B}\left(\mathbf{A}+\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{A}$

  - $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}=\left(\mathbf{A}\mathbf{B}\right)^{-1}$.
  - $\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}=\left(\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C}\right)^{-1}$.

シューア補行列 (Schur Complement)

- ブロック行列 $\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$ を考える.
- $\mathbf{D}$ に対するシューア補行列は, $\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$
- $\mathbf{A}$ に対するシューア補行列は, $\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}$

シューア補行列による, ブロック行列の表現

下三角, 対角, 上三角パターンと, 上三角, 対角, 下三角パターン

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

シューア補行列 (Schur Complement)

シューア補行列による，ブロック行列の逆行列の表現

上三角，対角，下三角パターンと，下三角，対角，上三角パターン

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

- $\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{X} & \mathbf{I} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{X} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$ を用いた．
- この 2 式から，Sherman-Morrison-Woodbury の公式を導出できる．