

ベクトルの根拠についてまとめる

データを複数個収めることができるように、要素を1列に並べたものをベクトルという。ベクトルの表記方法には、1文字で表す方法と、具体的に成分(要素)を示す方法とがある。成分を具体的に示す表記方法には、次の式のように、横に成分を並べるものと、縦に並べるものがある。前者を行ベクトル(横ベクトル)、後者を列ベクトル(縦ベクトル)という。

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n), \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

ベクトルの足し算、引き算は、対応する成分同士で足し算、引き算を行う。ベクトルの成分の数は次元といい、次元の異なるベクトルの足し算、引き算は計算できない。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+4 \\ 2+5 \\ 3+6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \end{pmatrix}$$

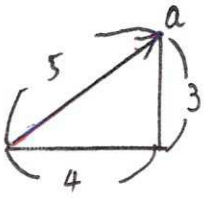
ベクトルには、足し算、引き算以外にスカラー倍という計算がある。スカラーとは、ベクトルに対して、定数、変数などの1次元の値 α を指す。スカラー倍とは、全ての成分に対し同じ値を掛ける操作のことをいう。

$$2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \times 1 \\ 2 \times 2 \\ 2 \times 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

ベクトルとベクトルの内積の計算では、ベクトルの対応する成分同士を掛け算し、それらすべての和をとる。ベクトルとベクトルの内積は数(スカラー)になり、異なる次元のベクトル同士では計算できない。

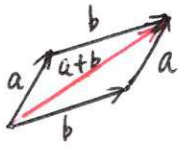
$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \text{ のとき、 } \langle a, b \rangle = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n \\ = \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

ベクトルを図示すると、分かりやすくなる。ここで、ベクトル $a = (4, 3)$ と「右に4, 上に3動くこと」を対応させる。

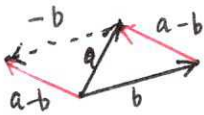


左の図を見て分かるように、右斜め上に「5」動くという、向きと距離の2つの要素を表していることが分かる。

図中の矢印のように、向きと距離を表す矢印を有向線分という。



次に足し算について考える。左の図の左上の矢印2つが表すように、 $a = (1, 2)$ 動いた後、さらに $b = (3, 1)$ だけ動くと、合計 $a + b = (4, 3)$ 動いたことになる。あるいは、図中の a, b が作る平行四辺形の対角線が $a + b$ であるという見方もできる。



次に引き算について考えてみる。左側の三角形が表すように、 $a = (1, 2)$ 動いた後、さらに $-b = (-3, -1)$ だけ動くと、合計 $a - b = (-2, 1)$ 動いたことになる。あるいは a, b の始点を一致させて、 b の矢端から a の矢端に引いた矢印が $a - b$ であるという見方もできる。

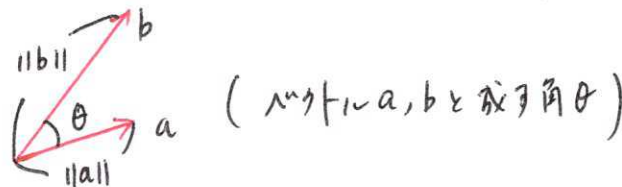
・2つのベクトル a, b が直交する、つまり、成す角が 90° であることの定義は内積 $\langle a, b \rangle$ が0になることである。内積の定義と $\cos 90^\circ = 0$ であることから、 $\langle a, b \rangle = \|a\| \|b\| \cos 90^\circ = 0$ と確認することができる。

そこで、内積の定義としては、ベクトル a, b の成す角が θ のとき、

$$\langle a, b \rangle = \|a\| \|b\| \cos \theta$$

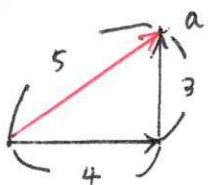
角 θ とは、2つのベクトル a, b の始点を一致させてとる角度のことである。

$\|a\|$ はベクトル a の長さ (ユークリッド距離) を表している。



定義としては、ベクトル a, b が直交する $\iff \langle a, b \rangle = 0$

・ベクトルは矢印で示して向きと距離を考えると、このようにベクトルはその向きと移動距離 (ノルム) が重要である。このノルムを、成分の値からどのように



求められるか考える。左図のように、ベクトル $a = (4, 3)$ と「右に4、上に3」動くこととを対応づけたい。右に4、上に3動くこと合計7動くことになる。これは、3次元以上でも同様に求められることができる。

このノルムの求め方を $L1$ ノルムという。

《定義》 a の $L1$ ノルム $= \|a\|_1 = |a_1| + |a_2| + \dots + |a_n| = \sum_{i=1}^n |a_i|$

一方で、スタートからゴールまで動く方法もある。

ベクトル $a = (4, 3)$ のとき、通線距離は、三平方の定理より

$$\sqrt{4^2 + 3^2} = \sqrt{16 + 9} = \sqrt{25} = 5 \text{ で求められる。3次元以上でも同様に求められる。}$$

このノルムを求める $L2$ ノルムといい、ユークリッド距離と同じである。

$$\langle \text{定義} \rangle \quad a \text{ の } L2 \text{ ノルム} = \|a\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2} = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2}$$

a の $L2$ ノルムは内積を用いて、 $\|a\|_2 = \sqrt{\langle a, a \rangle}$ と表される。

また、単位ベクトルとは長さ(ノルム)が1のベクトルのことである。2つのベクトル a, e があって、 e が単位ベクトル ($|e|=1$) であるならば、2つのベクトルの成す角を θ とおけば、 $a \cdot e = |a| \cos \theta$ となり、 a が e の方向の成分を取り出すことができる。ベクトルを分解してある特定方向の成分だけを調べるのに、単位ベクトルを用い、内積の代数的計算に結びつけることができる。

次に、与えられた正定値行列 A に対し、次の式を満たすような列ベクトル $x (\neq 0)$ が存在するとき、 λ は行列 A の 固有値、 x は 固有ベクトル という。また E は 単位行列 を指す。

(右下かりの対角線上成分のみ1で、その他が0であるような正定値行列を単位行列 $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ といい、どんな行列・ベクトルに掛けても元の行列・ベクトルから変えられないという性質がある。)

$$Ax = \lambda Ex \quad \dots (1)$$

この式を変形すると

$$(A - \lambda E)x = 0$$

仮に $(A - \lambda E)$ が逆行列 $(A - \lambda E)^{-1}$ を持つとすると

$x = (A - \lambda E)^{-1} 0 = 0$ となり、この連立方程式は自明な解 $x=0$ しか持たない。つまり、固有ベクトル $x (\neq 0)$ が存在しない。したがって固有ベクトルを持つ条件は、 $(A - \lambda E)$ が逆行列 $(A - \lambda E)^{-1}$ を持たないことである。

(割り算の計算をするには、割る数の逆数を用いて掛け算の問題に変えることができる。この逆数を考え、行列になげかわる「逆行列」である。
 $\langle \text{定義} \rangle \quad AA^{-1} = A^{-1}A = E$
 (単位行列))

縦横に要素を表す形に並べたものを行列という。これは同じ次元のベクトルが並べられて、とみることになる。

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccc}
 1 & 2 & 3 & 4 \\
 \text{列} & \text{列} & \text{列} & \text{列} \\
 \text{目} & \text{目} & \text{目} & \text{目}
 \end{array} \\
 \begin{array}{l}
 1 \text{ 行目} \\
 2 \text{ 行目} \\
 3 \text{ 行目}
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 3 & 4 & 0 & 10 \\
 0 & 1 & 0 & -3 \\
 -1 & 1 & 9 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{array}{l}
 (2 \times 4 \text{ 行列}) \\
 \text{行列の表し方}
 \end{array}
 \end{array}$$

↑
2行2列目の成分

ベクトルの足し算、引き算で対応する成分ごとく足し引きを「行」のと同様に、行列も対応する成分ごとく足し算、引き算をする。2つの行列の和、行列の差は同じ成分同士で足し引きする。

また、 $1 \times n$ 型の行列 (n 次元行ベクトル) と $n \times 1$ 型 (n 次元列ベクトル) の行列の積 a 表される。

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n), \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \text{ に対して、}$$

$$ab = \langle a, b \rangle = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

一般に、 $m \times n$ 型の行列と $n \times l$ 型の行列の積は、 n 次元行ベクトルと n 次元列ベクトルの内積を $m \times l$ 個用いて、 $m \times l$ 型の行列で表される。

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix},$$

$$B = (b_1, b_2, \dots, b_l) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1l} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nl} \end{pmatrix} \text{ に対して、}$$

$$AB = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} (b_1, b_2, \dots, b_l)$$

$$= \begin{pmatrix} \langle a_1, b_1 \rangle & \langle a_1, b_2 \rangle & \dots & \langle a_1, b_l \rangle \\ \langle a_2, b_1 \rangle & \langle a_2, b_2 \rangle & \dots & \langle a_2, b_l \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_m, b_1 \rangle & \langle a_m, b_2 \rangle & \dots & \langle a_m, b_l \rangle \end{pmatrix}$$

$$AB \text{ の第 } p \text{ 行 } q \text{ 列 成分は、} \langle a_p, b_q \rangle = \sum_{i=1}^n a_{pi} b_{iq}$$

$$= a_{p1} b_{1q} + a_{p2} b_{2q} + \dots + a_{pn} b_{nq}$$

・割り算に似て、概念として 逆行列 がある。

行列 A とその逆行列 A^{-1} の積は単位行列 E になるように、逆行列 A^{-1} を定義すると、

$$\underline{AA^{-1} = A^{-1}A = E}$$

ここで、 E は単位行列を指す。単位行列とは、右下りの対角線上成分のみ 1 で、その他は 0 であるような正方行列をいう。
 2×2 型正方行列の場合、 $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ で表せる。
 どのような行列、ベクトルに掛けても、元の行列、ベクトルから変化しないという性質がある。

行列 A, A^{-1} の積が定義できるとは、まず、こゝろが正方行列 (行数と列数が等しいような行列) である必要がある。また、正方行列であつても、行列 A の行列式が 0 であつた場合、逆行列は存在しない。

行列式は $\det A$ または $|A|$ と表される。 2×2 行列、 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の行列式は次の式で計算される。

$$|A| = \det A = ad - bc$$

また、 n 次正方行列 A について、

$$\underline{AB = BA = E} \text{ (単位行列)}$$

となる n 次正方行列 B が存在するとき、 A は 正則行列 という。

したがって、 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ で、 $|A| = \underline{ad - bc \neq 0}$ のとき、 A は 正則行列 である。

$|A| = \underline{ad - bc = 0}$ のとき、 A は 正則行列ではない。

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 4 & -2 \\ 4 & 3 & -1 \\ -2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

のように、右下に向かう斜め45°の対角線に関して対称となっている成分が等しい行列のことを対称行列という。

一般に、行列 A に対して、斜め45°の対角線に関して対称な成分を入れ替えて得た行列のことを転置行列といい、 tA と表す。

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 6 \end{pmatrix} \text{ であれば、 } {}^tA = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$$

A が対称行列である条件は $A = {}^tA$ となる。

・線形変換とは、数学的にはベクトル空間に行列を掛けてベクトルを作る関数のことを指す。ベクトル空間からベクトル空間へ、ベクトルの特徴を保ちながら変換する変換手法といえる。

数式的には、多価 f で、 n 次元ベクトル空間 R^n の1つの要素を決めれば、ベクトル空間 R^m のどれだけの要素が決まるかとする。これを

$$f: R^n \rightarrow R^m \text{ と表す。この多価 } f \text{ が } m \text{ 次の条件を満たすとき、}$$

f を 線形多価 または 1次多価 という。

R^n に含まれる任意のベクトル \vec{x} 、 \vec{y} と任意の実数 k に対して、

$$f(\vec{x} + \vec{y}) = f(\vec{x}) + f(\vec{y})$$

$$f(k\vec{x}) = kf(\vec{x})$$

とく、 $n=m$ のとき、移す前も後も同じ R^n で、 R^n の中のベクトルの状態が変換されるわけだから、線形変換 または 1次変換 という。

すなわち、移す先の成分が、移す前の成分の1次式で表されているとき、線形多価 になる。その係数を値に取り出して並べたものを 表現行列 いう。

ここで、線形空間を構成するものの基底として、標準基底 e をみる。

標準基底とは、 x 軸、 y 軸、 z 軸のように、「座標系」を定めようとする

ベクトルの組 (集合) のことをいう。例えば

$$e_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

線形変換 f は、標準基底 \vec{e}_1, \vec{e}_2 の行先 $f(\vec{e}_1), f(\vec{e}_2)$ によって決定される。

$f(\vec{e}_1) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, f(\vec{e}_2) = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ とあれば、その表現行列 A は、

$$A = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$$

x が表現行列 A を持つ f への移り先を、 y とすると、

$$f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$$

$$x \rightarrow y = Ax$$

次に \mathbb{R}^2 から \mathbb{R}^2 への線形変換 f はこのように表されることがある。

$$\vec{OP} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \text{ とすると、 } P \text{ の座標は } (x, y)$$

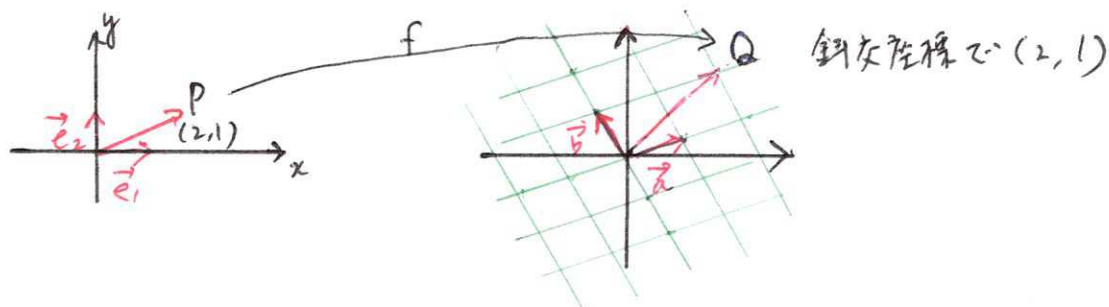
この線形変換 f で、 P から移り先を Q とすると、

このとき、 Q は基底 \vec{a}, \vec{b} が張る斜交座標上の (x, y) が表す点-1272.

つまり、この線形変換 f は、標準基底で $\vec{OP} = x\vec{e}_1 + y\vec{e}_2$ と表し、点 P と基底 \vec{a}, \vec{b} で $\vec{OQ} = x\vec{a} + y\vec{b}$ と表し、点 Q へ移す変換。

あるいは、標準基底に子直交座標で (x, y) と表し、点 P と

\vec{a}, \vec{b} が張る斜交座標で (x, y) と表し、点 Q へ移す変換といえる。



標準基底での \mathbb{R}^n 上の線形変換 f の表現行列を A とする。

標準基底 $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$ と基底 $\{\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n\}$ を取替えることができる。

取替え行列を $P = (\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n)$ とすると、基底 $\{\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n\}$ を座標系として新座標での線形変換 f の表現行列は、

$$\underline{P^{-1}AP}$$

線形変換 f を基底 B に関して表現したような基底 B に関する行列 P を取ることにしてよいことを示す。そのためには P をうまく使って、 $P^{-1}AP$ が対角行列になるようにする。

対角行列 は、正定値行列の右下に何らかの対角線にだけ成分が並ぶ行列。対角成分以外は 0 になる。

$$\text{対角行列} \begin{pmatrix} * & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & * & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & * \end{pmatrix}$$

行列 A に対して $P^{-1}AP$ が対角行列になるような基底の基底変換行列 P を求める基底を探していくことにする。

\mathbb{R}^2 上の線形変換 f の表現行列 $A = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ を例にする。

\mathbb{R}^2 の 0 でないベクトル $\vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ と実数 λ で、

$$A\vec{p} = \lambda\vec{p}$$

を満たすものを求めることにする。ここで、 λ は 固有値、 \vec{p} は 固有ベクトル といふ。固有ベクトルと線形変換 f に対して、定数倍と見做すようなベクトルを固有ベクトルと呼ぶ。

固有値、固有ベクトルは、行列を特徴づける量、指標である。

上の問題を解くと、

$$\begin{cases} \text{固有値 } 2 \text{ のときの固有ベクトルは } \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \\ \text{固有値 } 5 \text{ のときの固有ベクトルは } \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ となる。} \end{cases}$$

線形変換 f の表現行列 A を固有ベクトルを基底に表すと、その表現行列は対角行列になる。このとき対角成分には固有値が並ぶ。

行列の対角化の手順としては、

① 固有値、固有ベクトルを求める。

$$A\vec{p} = \lambda\vec{p}, \vec{p} \neq \vec{0} \text{ を満たす } \lambda, \vec{p} \text{ を求める。}$$

$\rightarrow \lambda$ と \vec{p} , μ と \vec{q} の 2 組が求まり、 n となる

② 取替え行列 P を用いて、 A を対角化できる。

$$P = (\vec{p} \ \vec{q}) \text{ とおくと}$$

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

・次に、対称行列の異なる固有値に対する固有ベクトルは直交するという性質を持つ。この性質があるから、対称行列では、固有ベクトルをもとにして、正規直交基底を作ることができる。

ここで 正規直交基底 は、 \mathbb{R}^2 の基底ベクトルに互いに直交している基底のこと。正規直交基底では、内積や \mathbb{R}^2 の計算が標準基底と同じような成分計算でできるというメリットがある。

対称行列 A で表される f が、新しい正規直交基底をとることにあて、表現行列を対角化できるということは、データを取り扱う上での大きなメリットがある。固有ベクトルを単位化すること、正規直交基底を作るというメリットがある、という 1 つのメリットと計算の簡易性がある。

例えば、 Q という基底の取替え行列の場合、表現行列は $Q^{-1}AQ$ となる。このとき、 Q^{-1} を計算するときは、 Q の転置行列をいれればよい。

つまり、 Q が正規直交基底を並べて作った行列のとき、

$$Q^{-1} = {}^t Q \text{ が成り立つ。}$$

正規直交基底を並べて作った行列を 直交行列 という。

・正定値行列 A に対して、次の式を満たすような列ベクトル $x (\neq 0)$ が存在する。

$$Ax = \lambda Ex \quad \left(\begin{array}{l} \lambda: \text{行列 } A \text{ の固有値} \\ x: \quad \quad \text{固有ベクトル} \\ E: \text{単位行列} \end{array} \right) \quad \left(\begin{array}{l} \text{つまり、} \lambda \text{ は固有値、} \\ x \text{ は固有ベクトル} \\ \text{という。} \end{array} \right)$$

$$\text{変形すると、} (A - \lambda E)x = 0$$

仮に $(A - \lambda E)$ の逆行列 $(A - \lambda E)^{-1}$ が存在すると、

$$x = (A - \lambda E)^{-1} 0 = 0$$

となり、固有ベクトル $x (\neq 0)$ が存在しなくなる。

したがって、固有ベクトルを持つ条件は、 $(A - \lambda E)$ が逆行列を持たないと、
行列式を満たすことである。

次 $\det(A - \lambda E) = 0$ (\det は 行列式) ※ 通常 固有値は 複数個ある

この λ の方程式を行列 A の固有方程式という。

A の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 、対応する固有ベクトルを x_1, \dots, x_n とする。
行列にまとめて表記すると

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}; X = (x_1 \dots x_n)$$

固有値、固有ベクトルの定義より

$$A = (x_1 \dots x_n) = (x_1 \dots x_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

すなわち、

$$AX = X\Lambda$$

X が逆行列を持つと仮定し、両辺に X^{-1} を掛けると、

$$X^{-1}AX = \Lambda \quad \dots \textcircled{1}$$

つまり、通常 対角化という。右辺は固有値を対角成分に並べたもの。

つまり、行列 A はその固有ベクトルを求めさえすれば、単に固有値を対角成分に並べただけの行列に変形することが出来る。

対称行列の固有ベクトルは互に直交する。したがって、それを並べた行列 X は直交行列である。従って対称行列 A に関しては

$$X^T A X = \Lambda$$

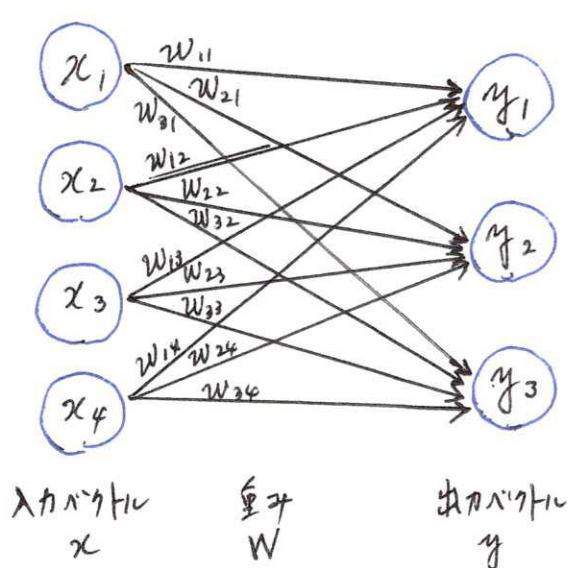
で対角化を達成できる。

① を変形すると、 $A = X\Lambda X^{-1}$ と表せ、行列 A の

固有値分解 いう。固有値分解は、連立微分方程式の解に利用される。

- ・コンピュータが言語を取り扱うために、単語をベクトル化する Word2Vec という概念がある。Word2Vecでは、単語一つを1列に並べたベクトルに変換する。ベクトルに変換すると、例えば「王様」-「男性」+「女性」=「女王」という変換を行うことが可能になる。Word2Vecは、様々な機械学習アルゴリズムと組み合わせて使われる。Web上には、Wikipediaのデータを用いて学習したWord2Vecやfasttextの学習済みモデルなどが無料で公開されており、こうしたモデルを使うことで気軽に言葉のベクトル化やベクトル表現を用いた計算ができる。
- ・L1ノルム(マンハッタン距離)とL2ノルム(ユークリッド距離)は、線形回帰モデルで 正則化項 として使われる。人工知能では、データセットを 訓練データ と テストデータ に分けて学習を行う。訓練データを用いてモデルを作り、テストデータを使ってそのモデルの正しさを決める。このとき、モデルの係数の絶対値を小さくすることで、訓練データのモデルに適合しすぎて、テストデータのモデルの当てはまりが悪くなる、過学習 と呼ばれる現象が発生する。過学習を避けるために、線形回帰モデルで正則化項を付けることで、係数の絶対値を小さくするようになる罰則となる。正則化項についての式を定義し、その式の誤差を最小化するように係数を求めることで、過学習を避けたモデル式を導出することができる。
- ・人工知能で注目されているアルゴリズムの一つ「ニューラルネットワーク」の計算の基本は、パラメータと重みの掛け算を足し合わせることに依って行う。このパラメータと重みによる掛け算は、線形変換と見なすことができる。

実際のニューラルネットワークの例と線形変換の関係を下の図に示した。
この図では単純化するためバイアスも考慮していないが、バイアスがある場合も同様である。



$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \end{pmatrix}$$

$$y = Wx$$

線形変換

・人工知能アルゴリズムの中で、教師なし学習といわれる分野の一つである主成分分析という手法があり、これは複数次元あるデータをまとめて扱いやすくするため、2次元や3次元などに圧縮する手法である。データが最もバラツキを持つような軸を考えると、変換を行うと固有値、固有ベクトル問題と解くことに帰着される。また、このとき固有値は説明度合いを示す値になる。各固有ベクトル(主成分)に対応する固有値とその固有値の総和で割ったものを寄与率という。

例題1

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

固有ベクトルを持つ条件は次の式は、 $\det(A - \lambda E) = 0$ で表される。

$$\begin{aligned} A - \lambda E &= \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 3-\lambda & 2 & 4 \\ 2 & -\lambda & 2 \\ 4 & 2 & 3-\lambda \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\det(A - \lambda E) = \det \begin{pmatrix} 3-\lambda & 2 & 4 \\ 2 & -\lambda & 2 \\ 4 & 2 & 3-\lambda \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &= (3-\lambda)(-\lambda)(3-\lambda) + 2 \times 2 \times 4 + 4 \times 2 \times 2 \\ &\quad - (3-\lambda) \times 2 \times 2 - 2 \times 2 \times (3-\lambda) - 4 \times (-\lambda) \times 4 \\ &= -\lambda(3-\lambda)^2 + 16 + 16 - 4(3-\lambda) - 4(3-\lambda) + 16\lambda \\ &= -\lambda(3-\lambda)^2 - 8(3-\lambda) + 16\lambda + 32 \\ &= -\lambda^3 + 6\lambda^2 + 15\lambda + 8 \\ &= (\lambda+1)^2(-\lambda+8) \end{aligned}$$

∴ $\det(A - \lambda E) = 0$ を満たす $\lambda = -1, 8$

となり、固有値は $-1, 8$ となる

よってこの固有値に対応する固有ベクトルを求めよ

$\lambda = -1$ とき、

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

∴ $\vec{0}$ と異なるベクトル $\vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ を求めよ。

$A\vec{p} = \lambda\vec{p}$ を満たす式は、

$$A\vec{p} = \lambda E\vec{p}$$

$$(A - \lambda E)\vec{p} = \vec{0} \quad \text{と表せるため。}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4x + 2y + 4z \\ 2x + y + 2z \\ 4x + 2y + 4z \end{pmatrix}$$

よって $\vec{0}$ と等しいための x, y, z を求める。

$$2x + y + 2z = 0$$

$x = s, z = t$ とおくと、

$$y = -2s - 2t$$

∴ 固有ベクトルは、 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$ (s, t は任意の実数)

$$\lambda = 8 \text{ である},$$

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} -5 & 2 & 4 \\ 2 & -8 & 2 \\ 4 & 2 & -5 \end{pmatrix}$$

$$\text{よって、} \begin{pmatrix} -5 & 2 & 4 \\ 2 & -8 & 2 \\ 4 & 2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5x + 2y + 4z \\ 2x - 8y + 2z \\ 4x + 2y - 5z \end{pmatrix}$$

これが 0 に等しいときの x, y, z を求めるので、

$$\begin{cases} -5x + 2y + 4z = 0 \\ 2x - 8y + 2z = 0 \\ 4x + 2y - 5z = 0 \end{cases}$$

$$y = k \text{ とおくと、} x = z = 2k$$

$$\text{よって } (x, y, z) = (2k, k, 2k) \quad (k \text{ は任意の定数})$$

$$\text{よって、固有ベクトルは、} \underline{\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}}$$

例題2

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad ; \text{固有値と固有ベクトルを求めよ}$$

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & -3 \\ 1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda E) &= \det \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & -3 \\ 1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} \\ &= (1-\lambda)(2-\lambda)(-2-\lambda) - (1-\lambda)(-3) \\ &= (1-\lambda)(4-\lambda^2) - 3(1-\lambda) \\ &= (1-\lambda)^2(1+\lambda) \end{aligned}$$

$$\text{よって固有値 } \underline{\lambda = -1, 1}$$

$$\underline{\lambda = -1 \text{ である.}}$$

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

よ、 z 、

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x \\ x + 3y - 3z \\ x + y - z \end{pmatrix}$$

$$2x = 0$$

$$x + 3y - 3z = 0$$

$$x + y - z = 0$$

$$y = z = k \text{ とおくと、 } (x, y, z) = (0, k, k)$$

$$\text{よ、固有ベクトルは、 } \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\lambda = 1, 9 \text{ と } 3$ 、

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -3 \\ 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}$$

$$\text{よ、 } \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -3 \\ 1 & 1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ x + y - 3z \\ x + y - 3z \end{pmatrix}$$

$$x + y - 3z = 0$$

$$x = -y + 3z$$

$$y = s, z = t \text{ とおくと、}$$

$$x = -s + 3t$$

$$\text{よ、固有ベクトルは、 } \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

よ、 $\lambda = 1$ は 2 重解
であるが、一次独立な
固有ベクトルを
2 個選ぶことができない。
すなわち A は対角
可能でない。

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ とおくと、1, 2 列が } \lambda = 1, \text{ 3 列目が } \lambda = -1 \text{ の}$$

固有ベクトルであり、なおかつ P は正則。したがって A は

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と対角化される。

対角行列の例題

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3-\lambda & 1 & -1 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$

$$\det(A - \lambda E) = \det \begin{pmatrix} 3-\lambda & 1 & -1 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$

$$= (3-\lambda)(2-\lambda)(2-\lambda) - (2-\lambda) - (2-\lambda)$$

$$= (2-\lambda)\{(3-\lambda)(2-\lambda) - 2\}$$

$$= (2-\lambda)(4-\lambda)(1-\lambda)$$

したがって、固有値 $\lambda = 1, 2, 4$

$\lambda = 1$ のとき、

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ したがって } \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x + y - z \\ x + y \\ -x + z \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} 2x + y - z = 0 \\ x + y = 0 \\ -x + z = 0 \end{cases}$$

$$x = -y = z, \text{ したがって } (x, y, z) = (k, -k, k)$$

∴ 固有ベクトルは、 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda = 2$ かつ、

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{∴, } \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + y - z \\ x \\ -x \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} x + y - z = 0 & \rightarrow y = z \\ x = 0 \end{cases}$$

∴ $(x, y, z) = (0, k, k)$

固有ベクトルは、 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda = 4$ かつ、

$$A - \lambda E = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 0 \\ -1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad \text{∴, } \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 0 \\ -1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x + y - z \\ x - 2y \\ -x - 2z \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} -x + y - z = 0 \\ x - 2y = 0 \\ -x - 2z = 0 \end{cases}$$

$$x = 2y, \quad y = -z$$

$$y = k \text{ かつ } z = -k$$

$$(x, y, z) = (2k, k, -k)$$

固有ベクトルは、 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

固有ベクトルを単位化すると

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{単位化}} \frac{1}{\sqrt{1^2 + (-1)^2 + 1^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{単位化}} \frac{1}{\sqrt{0^2 + 1^2 + 1^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{単位化}} \frac{1}{\sqrt{2^2 + 1^2 + (-1)^2}} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

よって $B^T A B$ は対角行列とは対角に a と $-a$ がある。

$B^T = B^{-1}$ となる B は求める正交行列である。

よって 取捨を行列 B は $\frac{1}{\sqrt{6}}$ 正交行列となり、 $\frac{1}{\sqrt{6}}$ 正交行列。

$$B = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 2 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} & 1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$