■ベクトルの概要

ベクトルとは、一例として、

$\vec{a} = (1,2)$ や　$\overrightarrow{AB} = (4,6)$

のような書き方で表される数学の概念の1つである。

詳細な説明をしておくと、

ある集合Aの任意の元x,y,zと体Bの任意の元a,bに対して、（元：要素、体：四則演算が可能な集合）

１、結合法則：$(x+y)+z = x+(y+z)$

２、交換法則：$x+y = y+x$

３、零元の存在：$x+0 = x$ となる元0がAに存在する

４、逆元の存在：$x+(-x) = 0$ となる元$-x$がAに存在する

５、分配法則1：$a(x+y) = ax+ay$

６、分配法則２：$(a+b)x = ax+bx$

７、結合法則：$a(bx) = (ab)x$

８、単位元の存在：$1x = x$ (1はBの元)

以上の条件が満たされていれば、集合Aの任意の元はベクトルである。

スカラーとの違いをあげると、その数字がスカラーである場合は単なる大きさを表しており、

それらの記載順序で違いは生じないが、その数字がベクトルの成分である場合は、

順序が違うと、ベクトルが別物になってしまう。

例えば、$\vec{a} = (1,2), \vec{b} = (2,1)$ の場合、$\vec{a}$と$\vec{b}$は異なる存在である。

ベクトルには成分の並べ方が２通りあり、

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

のように縦に並べたものを縦ベクトル、あるいは列ベクトルと呼び、

$$\vec{a} = (1,\quad 2,\quad 3)$$

のように横に並べたものを横ベクトル、あるいは行ベクトルと呼ぶ。

$\vec{a} = (1,2)$ 、$\vec{b} = (3,4)$ とした時、

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = 1 \cdot 3 + 2 \cdot 4 = 11$$

というように同じ成分同士（上記の例では第1成分、第２成分）
の積をとり、さらに、それらの和をとる計算のことを
ベクトルの内積という。

あるベクトル$\vec{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$に対して、

$$\|\vec{x}\| = \sqrt{x_1{}^2 + x_2{}^2 + \cdots + x_n{}^2}$$

のことを$\vec{x}$のノルムという。
そして、ノルムが１となるベクトルのことを単位ベクトルという。

$\vec{a} = (1,0)$ 、$\vec{b} = (0,1)$の場合、

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0$$

となるが、このように、内積が０となる場合、
それらのベクトルは互いに直交しているという。

ベクトル$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$に対して左から行列$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$を掛けると、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となり、行列を左から掛けるとそのベクトルをスカラー倍したことになる。
このようになるベクトルをその行列の固有ベクトルという。

■行列の概要

行列とは、

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

のように数字（記号や式でもよい）を縦・横に並べたものである。

行列の積は、

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ とすると、

$$AB = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$= a_{11} \cdot b_{11} + a_{12} \cdot b_{21} + a_{11} \cdot b_{12} + a_{12} \cdot b_{22} + a_{21} \cdot b_{11} + a_{22} \cdot b_{21} + a_{21} \cdot b_{12} + a_{22} \cdot b_{22}$$

となる。

また、行列の和は、

$$A+B=\begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} \end{pmatrix}$$

である。

ある行列Aに対して、

$$AB=BA=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となる行列Bが存在する場合、
Aを正則行列という。
そして、BをAの逆行列と呼び、
A^{-1}と表す。

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

の各成分の添字（a_{11}なら11）をそれぞれｉ, j
とした時、各成分のｉ, j を入れ替えた行列、
つまり、

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}$$

をAの転置行列といい、A^Tと表す。

添字(i , j)が　i = j となる成分、
例えば、

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

ならば、a_{11}, a_{22}を対角成分というが、
対角成分以外の成分が全て０である行列
のことを対角行列という。

元の行列とその転置行列が等しい場合、
つまり、$A = A^T$ となる行列を対称行列という。

転置行列と逆行列が等しくなる行列のことを
直交行列という。
つまり、$A^T = A^{-1}$ であるので、
$A^T A = A A^T = E$ (Eは対角成分が全て1の対角行列)
となる。

ある行列Aに対して、
$A\vec{s} = \lambda\vec{s}$
となる0でないスカラーλとベクトル$\vec{s}$
をそれぞれ固有値と固有ベクトルというが、
それらを求めた後、固有ベクトルを並べた行列（Pとする）
を使い、$P^{-1}AP$を計算すると固有値が並んだ対角行列（Bとする）
が求まる。すると、$P^{-1}AP = B$ なので、左からP、右からP^{-1}を掛けると
$A = PBP^{-1}$ ということになり、Aを3つの行列の積に分解することができる。
これを、固有値分解という。

■線形代数の機械学習・深層学習での利用

機械学習では、関数の構造や説明変数は同じでその係数が異なる関数の計算を大量に行うことがよくある。その際に、for文で処理を行うよりも行列形式で処理をする方が数倍早くなるので、よく利用されている。

例、

$$y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n$$

$$y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n$$

$$\vdots$$

$$y_n = a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n$$

これらを1つ1つ計算せず

⬇

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

行列形式にして計算する

■ $A=\begin{pmatrix}3&2&4\\2&0&2\\4&2&3\end{pmatrix}$ の固有値と固有ベクトルを求める。

固有値を λ、固有ベクトルを $\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$ とおくと、

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

$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=0$

$\overrightarrow{p}$ は零ベクトルではないので、

$(A-\lambda E)$ が逆行列を持たない、つまり、$\left|A-\lambda E\right|=0$

である必要がる。

$$\left|A-\lambda E\right|=\begin{vmatrix}3-\lambda&2&4\\2&-\lambda&2\\4&2&3-\lambda\end{vmatrix}$$

$$=(3-\lambda)\begin{vmatrix}-\lambda&2\\2&3-\lambda\end{vmatrix}-2\begin{vmatrix}2&4\\2&3-\lambda\end{vmatrix}+4\begin{vmatrix}2&4\\-\lambda&2\end{vmatrix}$$

$$=(3-\lambda)((-\lambda)(3-\lambda)-2*2)-2(2(3-\lambda)-4*2)+4(2*2-4(-\lambda))$$

$$=(3-\lambda)(\lambda-4)(\lambda+1)+4(\lambda+1)+16(\lambda+1)$$

$$=(\lambda+1)((3-\lambda)(\lambda-4)+20)$$

$$=(\lambda+1)((\lambda+1)(8-\lambda))$$

$$=(\lambda+1)^2(8-\lambda)$$

よって、固有値　$\lambda=8,-1$ となる。

そして、$\lambda=8$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}-5&2&4\\2&-8&2\\4&2&-5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases} -5a+2b+4c=0 \\ 2a-8b+2c=0 \\ 4a+2b-5c=0 \end{cases}$$

これを解くと、$c=2b, c=a$ が得られるので、$b=t$ (tは0ではない任意の数)とすると、

固有値ベクトル は、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2t \\ t \\ 2t \end{pmatrix}=t\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

となる。

また、$\lambda=-1$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases} 4a+2b+4c=0 \\ 2a+b+2c=0 \\ 4a+2b+4c=0 \end{cases}$$

これを解くと、$a=t_1, b=t_2, c=-(t_1+\frac{t_2}{2})$ が得られる。

（ただし、t_1, t_2は同時には０にならない任意の数）

よって、固有値ベクトルは、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ -(t_1+\frac{t_2}{2}) \end{pmatrix}$$

となる。

■ $A=\begin{pmatrix}1&0&0\\1&2&-3\\1&1&-2\end{pmatrix}$を対角化する。

対角化を行うためには、固有ベクトルを並べた行列が必要になる。
そこで、まず、固有ベクトルを求める。

固有値をλ、固有ベクトルを$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$とおいて、行列式$\left|A-\lambda E\right|$を計算する。

$$\left|A-\lambda E\right|=\begin{vmatrix}1-\lambda&0&0\\1&2-\lambda&-3\\1&1&-2-\lambda\end{vmatrix}$$

$$=(1-\lambda)\begin{vmatrix}2-\lambda&-3\\1&-2-\lambda\end{vmatrix}-\begin{vmatrix}0&0\\1&-2-\lambda\end{vmatrix}+\begin{vmatrix}0&0\\2-\lambda&-3\end{vmatrix}$$

$$=(1-\lambda)((2-\lambda)(-2-\lambda)-(-3)*1)$$

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

$$=-(\lambda+1)^2(\lambda-1)$$

よって、固有値　$\lambda=1,-1$

そして、$\lambda=-1$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}2&0&0\\1&3&-3\\1&1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases}2a=0\\a+3b-3c=0\\a+b-c=0\end{cases}$$

これを解くと、$a=0,b=c$ が得られるので、$b=t$ (tは0ではない任意の数)とすると、

固有ベクトル は、

$$\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ t \\ t \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる。
ただし、今回は対角化に利用するので、t に具体的な値を入れる。例えば、$t = 1$とすると、

$$\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を得る。
また、$\lambda = 1$ の時、

$$(A - \lambda E)\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -3 \\ 1 & 1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0$$

となるので、
$a + b - 3c = 0$

これを解くと、$a = t_1, b = t_2, c = \dfrac{t_1 + t_2}{3}$ が得られる。

ただし、t_1, t_2は同時には０にならない任意の数である。

今回は、a, b, c は具体的な値を持つ必要がある。

また、固有ベクトルは3つ並べないと計算できないため、
ここで独立したベクトルを2つ作っておく必要がある。
よって、

$$\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

および、

$$\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とする。
上記の3つの固有ベクトルを並べて、

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

とする。
また、Pの逆行列を求めておく。
そのためには、$det(P)$ と Pの余因子行列が必要となる。

$det(P)$は、

$$det(P) = 0 * \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} - 1 * \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} + 1 * \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$= 1 - 3$$

$$= -2$$

Pの余因子行列は、Pの各成分の余因子を求めると、

p_{11}の余因子：$\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 1$

p_{12}の余因子：$-\begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 1$

p_{13}の余因子：$\begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} = -3$

p_{21}の余因子：$-\begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1$

p_{22}の余因子：$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1$

p_{23}の余因子：$-\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} = 1$

p_{31}の余因子：$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1$

p_{32}の余因子：$-\begin{vmatrix} 0 & 3 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 3$

p_{33}の余因子：$\begin{vmatrix} 0 & 3 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -3$

となるので、これらを並べると、

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 1 & -3 \end{pmatrix}$$

という行列になり、さらに、これを転置させると、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & -3 \end{pmatrix}$$

という余因子行列を得る。

そして、これを$det(P)$の値で割ると逆行列が求まる。

$$P^{-1} = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & -3 \end{pmatrix}$$

最後に、$P^{-1}AP$ を計算すれば A を対角化することができる。

$$\begin{aligned} P^{-1}AP &= -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -1 & 3 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

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

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

■ $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$の固有値と固有ベクトルを求める。

固有値をλ、固有ベクトルを$\overrightarrow{p} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$とおいて、行列式$\left|A - \lambda E\right|$を計算する。

$$\left|A - \lambda E\right| = \begin{vmatrix} 3-\lambda & 1 & -1 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 2-\lambda \end{vmatrix}$$

$$= (3-\lambda)\begin{vmatrix} 2-\lambda & 0 \\ 0 & 2-\lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2-\lambda \end{vmatrix} + (-1)\begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 2-\lambda & 0 \end{vmatrix}$$

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

$$= (2-\lambda)(\lambda^2 - 5\lambda + 6 - 2)$$

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

よって、固有値　$\lambda = 1,2,4$

そして、$\lambda = 1$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}2 & 1 & -1\\ 1 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases}2a+b-c=0\\ a+b=0\\ -a+c=0\end{cases}$$

これを解くと、$a=-b, a=c$ が得られるので、$a=t$ (tは0ではない任意の数)とすると、

固有ベクトル は、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}t\\ -t\\ t\end{pmatrix}=t\begin{pmatrix}1\\ -1\\ 1\end{pmatrix}$$

となる。

対角化に利用する場合は、t に具体的な値を入れる。例えば、$t=1$とすると、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}1\\ -1\\ 1\end{pmatrix}$$

を得る。

また、$\lambda=2$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}1 & 1 & -1\\ 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases}a+b-c=0\\ a=0\\ -a=0\end{cases}$$

これを解くと、$a=0, b=c$ が得られるので、$b=t$ (tは0ではない任意の数)とすると、

固有ベクトル は、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\t\\t\end{pmatrix}=t\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$$

となる。

対角化に利用する場合は、$t=1$として、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$$

を得る。

最後に、$\lambda=4$ の時、

$$(A-\lambda E)\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}-1&1&-1\\1&-2&0\\-1&0&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=0$$

となるので、

$$\begin{cases}-a+b-c=0\\a-2b=0\\-a-2c=0\end{cases}$$

これを解くと、$a=2b, b=-c$ が得られるので、$b=t$ (tは0ではない任意の数)とすると、

固有ベクトル は、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2t\\t\\-t\end{pmatrix}=t\begin{pmatrix}2\\1\\-1\end{pmatrix}$$

となる。

対角化に利用する場合は、$t=1$として、

$$\overrightarrow{p}=\begin{pmatrix}2\\1\\-1\end{pmatrix}$$

を得る。

固有ベクトルを並べて行列を作ると、

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

となる。

これを直交行列にする。

ここで、列ベクトルの内積を計算すると全て０である。(0でない場合は、グラム・シュミットの直交化法を使う)

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

そのため、あとは各列ベクトルの大きさが１であれば直交行列になる。

よって、各列ベクトルの大きさは

$$\sqrt{1^2 + (-1)^2 + 1^2} = \sqrt{3}$$

$$\sqrt{0^2 + 1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$$

$$\sqrt{2^2 + 1^2 + (-1)^2} = \sqrt{6}$$

なので、これらで割れば、直交行列Bは

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