作成者　眞野宏伸

1.ベクトルの概要

1.1. ベクトルとは

ベクトルとは、向きと大きさを持つ量のことである。有向線分で表され、平面や空間上における力や速度、加速度などはベクトルで表される。

また、ベクトルは向きと大きさを持つ量であるが、これに対して大きさだけを持つ量をスカラーという。スカラーの例として、個数や長さ、時間がある。

1.2. ノルムと単位ベクトル

ベクトルは、(x 成分，y 成分)の形で成分表示をすることができる。図 2. のように、xy 平面上で、x の正の方向（右）に 3 マス、y の正の方向（上）に 4 マス移動するベクトル $\vec{AB}$ を $\vec{AB}=(3,4)$ と表す。 $\vec{AB}=(3,4)$ ときの大きさは $|\vec{AB}|=\sqrt{3^2+4^2}=\sqrt{25}=5$ となる。ベクトルの大きさのことをノルムという。また、ノルムが 1 のベクルトを単位ベクトルという。 $\vec{AB}$ の単位ベクトルは $\vec{e}=\frac{\vec{AB}}{|AB|}=(\frac{3}{5},\frac{4}{5})$ となる。

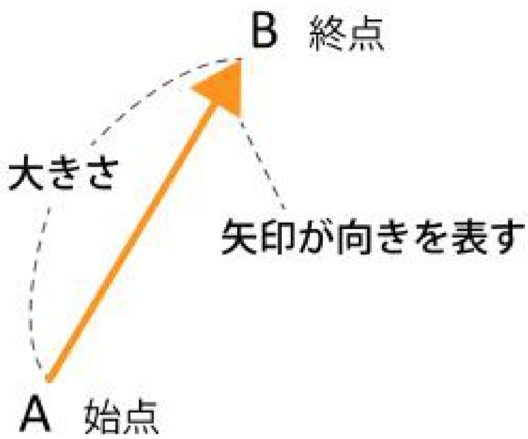

図 1.ベクトル

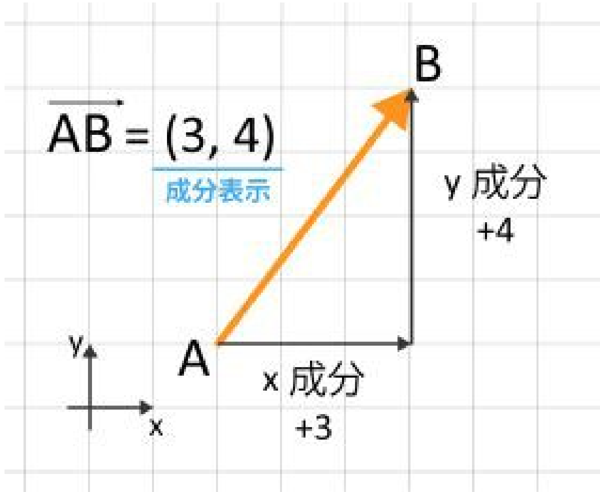

図 2.ベクトル成分表示

1.3 ベクトルの内積

ベクトルの内積は以下の数式で表すことができる。

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=|\vec{a}||\vec{b}|\cos(\theta)$$

これを図で表すと図 3.のように、ベクトル $\vec{a}$ の長さに、ベクトル $\vec{c}$ の長さをかけたもの、という意味を持たせることができる。また、2 つのベクトル $\vec{a},\vec{b}$ のなす角度 θ が 90°のとき、

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=|\vec{a}||\vec{b}|\cos(\frac{\pi}{2})=|\vec{a}||\vec{b}|\cdot 0=0$$

となり、内積が 0 になる。この内積が 0 になるとき、2 つのベクトルは互いに直交するという。

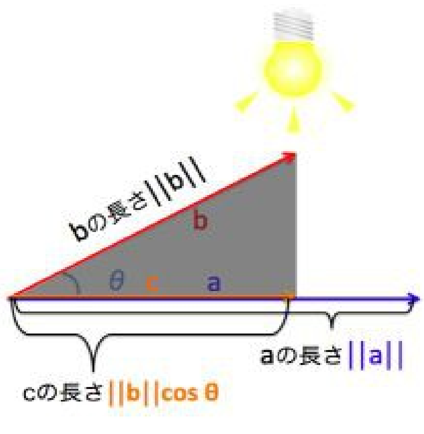

図 3.ベクトルの内積

2.行列の概要

2.1 行列とベクトル

行列とは数字等を縦、横に並べたもののことをいいう。以下のように表すことができる。

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

以下のように 1 列のみ行列を縦ベクトル、1 行のみ行列を横ベクトルといいう。

$$\text{縦ベクトル}:\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \qquad \text{横ベクトル}:\begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix}$$

2.2 行列の和と積

行列の和は各行列の行数と列数が等しい場合のみ行え、各成分同士の足し算を行う。例として、(2×2 型)の和を以下に示す。

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

行列の積は左側の行列の列数と右側の行列の行数が等しい場合のみ計算できる。そのため、左側の行列が(***m***×***n*** 型)だった場合、右側の行列は(***n***×***l*** 型)である必要がある。そして、行列の計算結果は(***m***×***l*** 型)になる。例として、(3×3 型)、(3×2 型)の積を以下に示す。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \\ b_{31} & b_{32} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11}\times b_{11}+a_{12}\times b_{21}+a_{13}\times b_{31} & a_{11}\times b_{12}+a_{12}\times b_{22}+a_{13}\times b_{32} \\ a_{21}\times b_{11}+a_{22}\times b_{21}+a_{23}\times b_{31} & a_{21}\times b_{12}+a_{22}\times b_{22}+a_{23}\times b_{32} \\ a_{31}\times b_{11}+a_{32}\times b_{21}+a_{33}\times b_{31} & a_{31}\times b_{12}+a_{32}\times b_{22}+a_{33}\times b_{32} \end{pmatrix}$$

2.3 正則行列と逆行列

正則行列とは $\boldsymbol{n}$ 次正方行列（行数と列数が等しい行列）$\boldsymbol{A}$ について、

$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{E}$

となる $\boldsymbol{n}$ 次正方行列 $\boldsymbol{B}$ が存在するとき、$\boldsymbol{A}$ は正方行列という。$\boldsymbol{E}$ は単位行列である。

例えば、

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 7 & -5 \\ -4 & 3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 7 & -5 \\ -4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

なので、

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}$$

は正則行列ということができる。

逆行列は $\boldsymbol{n}$ 次正方行列 $\boldsymbol{A}$ について、

$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{E}$

となる $\boldsymbol{n}$ 次正方行列 $\boldsymbol{B}$ を逆行列といい、 A^{-1} で表す。

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \text{ のとき、 } A^{-1} \text{ は } A^{-1}=\frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

という、2×2 型の逆行列となる。ただし、 A^{-1} は $ab-bc\neq 0$ のとき存在する。

以上の性質かた $\boldsymbol{A}$ が逆行列を持つとき、$\boldsymbol{A}$ は正規であるといえ、逆行列を持たないときは、A は正規ではないといえる。

2.4 転置行列と対称行列と直交行列

転置行列は行列の行と列を入れ替えてできる行列をいう。行列 A の転置行列を A^T で表す。

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\4 & 5 & 6\end{pmatrix} \quad A^T=\begin{pmatrix}1 & 4\\2 & 5\\3 & 6\end{pmatrix}$$

対称行列とは転置行列が元の行列と等しいものを対称行列という。

$$A^T=A$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 4 & 6\\4 & -2 & -3\\6 & -3 & 0\end{pmatrix} \quad A^T=\begin{pmatrix}1 & 4 & 6\\4 & -2 & -3\\6 & -3 & 0\end{pmatrix}$$

直交行列とは行列 $\boldsymbol{A}$ の転置と行列 I$\boldsymbol{A}$ の逆行が等しいものを直交行列という。

$$A^T=A^{-1}$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \quad A^T=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\-\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \quad A^{-1}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\-\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}$$

2.5　対角行列

対角成分以外の成分がすべて 0 である行列を対角行列という。

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 2 & 0 & 0\\0 & 0 & 3 & 0\\0 & 0 & 0 & 4\end{pmatrix}$$

対角行列の性質として、対角行列の累乗は各成分を累乗るれば求められる。

$$\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\0 & \lambda_2 & 0\\0 & 0 & \lambda_3\end{pmatrix}^n=\begin{pmatrix}\lambda_1^n & 0 & 0\\0 & \lambda_2^n & 0\\0 & 0 & \lambda_3^n\end{pmatrix}$$

また、対角成分が 0 でないとき、対角行れるの逆行列を求めるには対角成分を逆数にすればよい。

$$\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\0 & \lambda_2 & 0\\0 & 0 & \lambda_3\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}\lambda_1^{-1} & 0 & 0\\0 & \lambda_2^{-1} & 0\\0 & 0 & \lambda_3^{-1}\end{pmatrix}$$

2.6　固有値と固有ベクトル

行列 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4 & 1\\2 & 3\end{pmatrix}$ とし、 $\vec{0}$ でないベクトル $\vec{p}=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$ と実数 λ で、

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

を満たすとき、λ が固有値、 $\vec{p}$ が固有ベクトルである。ベクトルを正方行列と掛けたとき、定数倍となるようなベクトルを固有ベクトルという。 固有値、固有ベクトルを計算するには、固有方程式で求めることができる。

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

以下に行列 $\boldsymbol{A}$ の固有方程式を計算する。まずは、行列 $(A-\lambda E)$ の行列式（det）を計算する。

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

次に $det(A-\lambda E)=0$ を満たす固有値λを求める。

$$(4-\lambda)(3-\lambda)-2=0$$
$$\lambda^2-7\lambda+10=0$$
$$(\lambda-2)(\lambda-5)=0$$
$$\lambda=2,5$$

次に各々の固有値に対応する固有ベクトルを求める。

(1) $\lambda=2$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入すると

$$\begin{pmatrix}4-2 & 1\\ 2 & 3-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}2 & 1\\ 2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

これより、(1)の連立2次方程式は、

$$2x+y=0$$

となり、解は、

$$(x,y)=(t,-2\mathrm{t}) \quad (\mathrm{t}\text{は任意の定数かつ}\,t\neq 0)$$

(2) $\lambda=5$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入すると

$$\begin{pmatrix}4-5 & 1\\ 2 & 3-5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 2 & -2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

これより、(2)の連立2次方程式は、

$$2\mathrm{x}+y=0$$

となり、解は、

$$(x,y)=(t,t) \quad (\mathrm{t}\text{は任意の定数かつ}\,t\neq 0)$$

2.7 固有値分解

行列 ***A*** が*(2×2 型)* の正方行列のとき、固有ベクトルを $\vec{v}_1,\vec{v}_2$ 、固有値を λ_1,λ_2 とする。固有ベクトルを並べた行列を $\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}v_{1\mathrm{x}} & v_{2\mathrm{x}}\\ v_{1\mathrm{y}} & v_{2\mathrm{y}}\end{pmatrix}$ 、固有値を対角とする対角行列 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}$ とすると

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{P}$$

となる。ここで、式変形すると

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{P}\boldsymbol{V}^{-1}$$

これを ***A*** の固有値分解という。

3. 線形代数の機械学習、深層学習における使用について

機械学習、深層学習の文脈での線形代数とは、数の集合を同時に操作するための便利な手法を提供してくれる、数学的ツールボックスである。これらの数値を保持するためのベクトルや行列のような構造体と、それらを加算、減算、乗算、および除算するための新しい規則を提供する。

4. 固有値と固有ベクトルの計算

例題 1 次の固有値と固有ベクトルを求めよ

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

固有方程式 $det(A-\lambda E)=0$ から固有値を算出する。

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

$$=(3-\lambda)(-\lambda)(3-\lambda)+2\cdot2\cdot4+4\cdot2\cdot2-(3-\lambda)\cdot2\cdot2-2\cdot2\cdot(3-\lambda)-4\cdot(-\lambda)\cdot4$$

$$=-\lambda^3+6\lambda^2+15\lambda+8$$

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

$$\lambda=-1,8$$

次に各々の固有値に対応する固有ベクトルを求める。

(1) $\lambda=-1$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入する。

$$\begin{pmatrix} 3+1 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 3+1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

これより、(1)の連立 3 次方程式は、

$$2\mathrm{x}+y+2\mathrm{z}=0$$
$$y=-2\mathrm{x}-2\mathrm{z}$$

となる。ここで、 $x=t\,,z=0$ とすると解は

$$x=t\,,y=-2,z=0$$

となる。固有ベクトルは $t\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}$ （tは任意の定数、$t\neq0$）

次に、 $x=0,z=s$ とすると解は

$$x=0,y=-2,z=s$$

となる。固有ベクトルは $s\begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$ （tは任意の定数、$s\neq0$）

(2) $\lambda=8$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入する。

$$\begin{pmatrix} 3-8 & 2 & 4 \\ 2 & -8 & 2 \\ 4 & 2 & 3-8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

これより、(2)の連立 3 次方程式は、

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

となる。ここで、　$y=t$　とすると解は

$x=2t, y=t, z=2t$

となる。固有ベクトルは　$t\begin{pmatrix}2\\1\\2\end{pmatrix}$　（tは任意の定数、$t\neq 0$）

例題２行列 $\boldsymbol{A}$ を対角化せよ

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

行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値が対角成分となるので、固有値を算出する。

$$\begin{aligned}det(A-\lambda E)&=det\begin{pmatrix}1-\lambda & 0 & 0\\1 & 2-\lambda & -3\\1 & 1 & -2-\lambda\end{pmatrix}\\&=(1-\lambda)(2-\lambda)(-2-\lambda)+1\cdot1\cdot0+1\cdot0\cdot3-(1-\lambda)\cdot(-3)\cdot1-0\cdot1\cdot(-2-\lambda)-0\cdot(2-\lambda)\cdot1\\&=-\lambda^3+1\lambda^2+1\lambda-1\\&=(\lambda-1)^2(\lambda+1)\end{aligned}$$

$$\lambda=-1,1$$

よって、行列 $\boldsymbol{A}$ の対角行列は

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

となる。

5. 対角化行列

$\boldsymbol{A}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ。また、　$B^T AB$　が対角行列になるような、直交行列 $\boldsymbol{B}$ を求めよ。

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

固有方程式　$det(A-\lambda E)=0$　から固有値を算出する。

$$\begin{aligned}det(A-\lambda E)&=det\begin{pmatrix}3-\lambda & 1 & -1\\1 & 2-\lambda & 0\\-1 & 0 & 2-\lambda\end{pmatrix}\\&=(3-\lambda)(2-\lambda)^2+1\cdot0\cdot(-1)+(-1)\cdot1\cdot0-(3-\lambda)\cdot0\cdot0-1\cdot1\cdot(2-\lambda)-(-1)\cdot(2-\lambda)\cdot(-1)\\&=-\lambda^3+7\lambda^2-14\lambda+8\\&=(\lambda-1)(\lambda-2)(\lambda-4)\end{aligned}$$

$$\lambda=1,2,4$$

次に各々の固有値に対応する固有ベクトルを求める。

(1)　$\lambda=1$　を　$(A-\lambda E)=\vec{0}$　に代入する。

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

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

これより、(1)の連立3次方程式は、

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

となる。ここで、 $x=t$ とすると解は

$x=t\,, y=-t\,, z=t$

となる。固有ベクトルは $t\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ （tは任意の定数、$t\neq0$）

(2) $\lambda=2$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入する。

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

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

これより、(2)の連立3次方程式は、

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

となる。ここで、 $y=t$ とすると解は

$x=0, y=t\,, z=t$

となる。固有ベクトルは $t\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ （tは任意の定数、$t\neq0$）

(3) $\lambda=4$ を $(A-\lambda E)=\vec{0}$ に代入する。

$$\begin{pmatrix} 3-4 & 1 & -1 \\ 1 & 2-4 & 0 \\ -1 & 0 & 2-4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

これより、(3)の連立3次方程式は、

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

となる。ここで、 $y=t$ とすると解は

$x=2\mathrm{t}\,, y=t\,, z=-t$

となる。固有ベクトルは $t\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ （tは任意の定数、$t\neq0$）

上記で求めた各固有ベクトルを $\vec{v}_1=\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$、$\vec{v}_2=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$、$\vec{v}_3=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ とグラムシュミット直交化法より、2 次元の直交ベクトルを求める。2 次元の直行ベクトル $\vec{u}_2$ は

$$\begin{aligned}\vec{u}_2&=\vec{v}_2-(\vec{v}_2\cdot\vec{v}_1)\vec{v}_1\\&=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}-(1\cdot 0+(-1)\cdot 1+1\cdot 1)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる。3 次元の直行ベクトル $\vec{u}_3$ は

$$\begin{aligned}\vec{u}_3&=\vec{v}_3-(\vec{v}_2\cdot\vec{v}_1)\vec{v}_1\\&=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}-(2\cdot 1+1\cdot(-1)+(-1)\cdot 1)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}-(2\cdot 0+1\cdot 1+1\cdot 1)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

以上の計算より、直行行列 $\boldsymbol{B}$ は

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

となる。