補足資料　線形代数

松尾・岩澤研究室
MATSUO-IWASAWA LAB UTOKYO

今回の目的と目標

- **目的**
  - ニューラルネットワークで重要となる行列やテンソルの基本を理解する.

- **目標**
  - 行列の基本的な性質を説明できるようになる.
  - 行列の加減算・行列積・アダマール積の計算を行えるようになる.
  - 対角化を行えるようになる.
  - 行列のランク計算を行えるようになる.

スカラー・ベクトル・行列

• スカラー

- 単一の数.

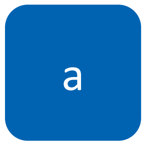
• ベクトル

- スカラーの配列.
- 太字で表記することが多い.
- i 番目の要素を a_i と表す.
- $\mathbf{0}$：全要素が0であるベクトル.

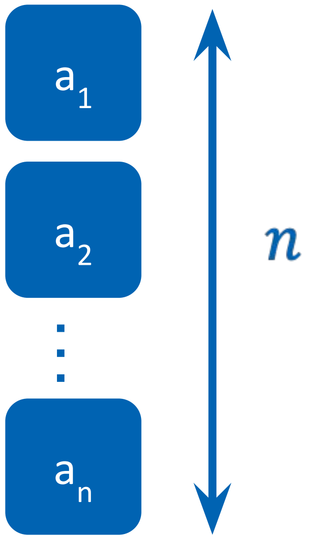
• 行列

- 行と列の2D配列.
- 行列 A の i 行 j 列目の要素を $A_{i,j}$ や a_{ij}，$a_{i,j}$ と表す.

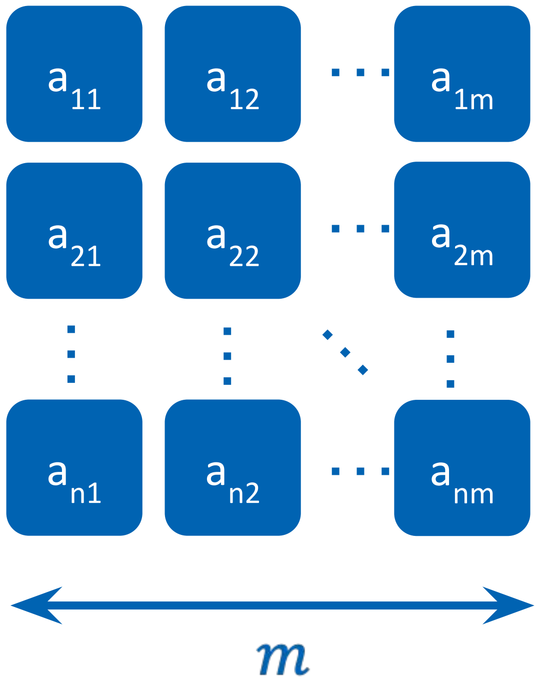
スカラー a



n次元ベクトル $\boldsymbol{a}$



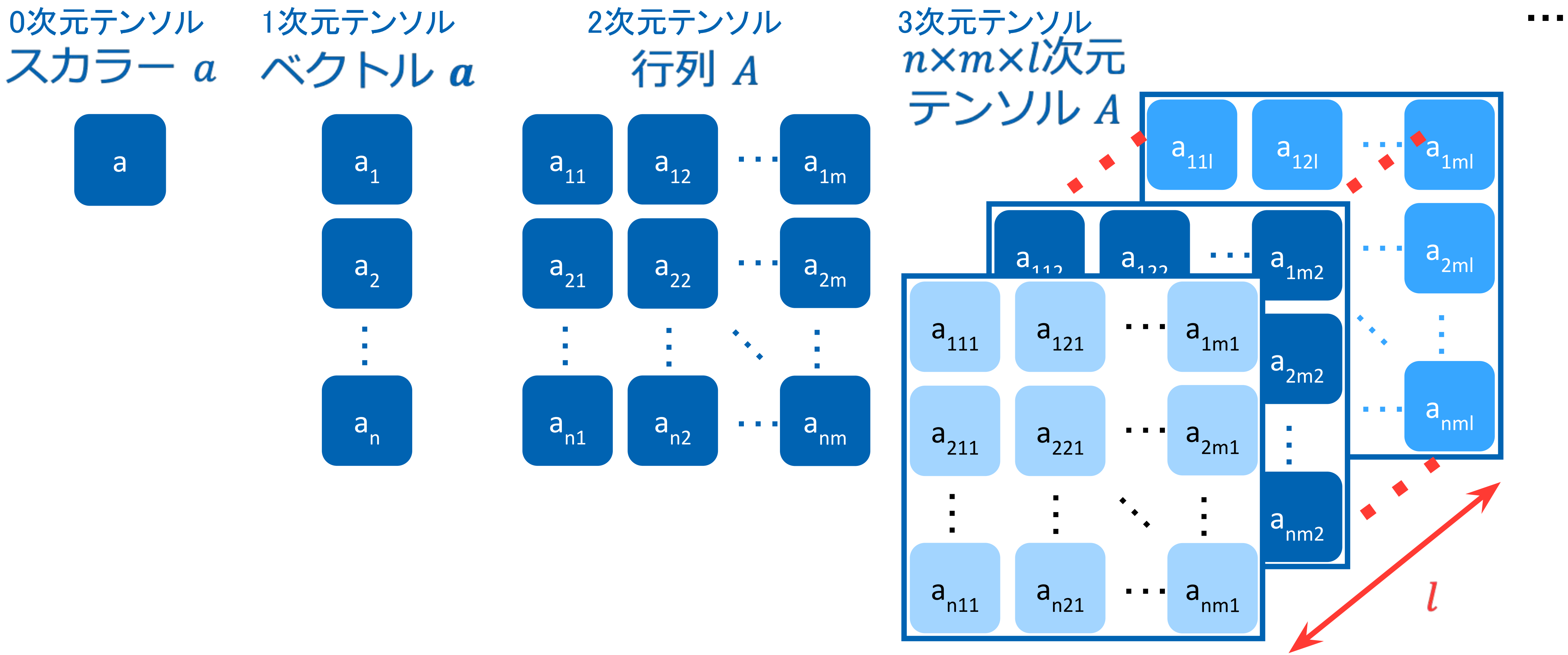
n×m次元行列 A



テンソル

• テンソル

- 多次元配列のことで，行列の概念を一般化したもの．
- カラー画像は（チャネル数，行，列）の3次元テンソルで表されることが多い．



ベクトルのノルム

- ベクトル $\boldsymbol{v} = (v_1, \dots, v_n)$ について， $\boldsymbol{v}$ の **L_pノルム**を

$$\|\boldsymbol{v}\|_p = (v_1^p + \cdots + v_n^p)^{1/p}$$

と定義する（p は正整数）．

  - $p = 2$ のときは特に**ユークリッドノルム**（**L_2ノルム**，**ユークリッド距離**）ともいい，2点間の直線距離を表す（$n = 2$ のとき，平面上の2点間の距離）．

- $p = \infty$ の時は**最大値ノルム**ともいい，

$$\|\boldsymbol{v}\|_\infty = \max\{|v_1|, \dots, |v_n|\}$$

と定義する.

ベクトルの内積と外積

• 内積（スカラー積）

- ベクトル $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ の内積は,

  $$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + \cdots = \sum_i a_ib_i$$

  と定義される.

例題:

$$\boldsymbol{a} = (1,5,4,2)^T, \boldsymbol{b} = (2,0,3,1)^T.$$

に対して，内積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ を求めよ.

解答:

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$$

$$= 1\cdot 2 + 5\cdot 0 + 4\cdot 3 + 2\cdot 1$$

$$= 16$$

• 外積（ベクトル積）

- 3次元実数ベクトル $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ の外積は,

  $$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_2b_3 - a_3b_2 \\ a_3b_1 - a_1b_3 \\ a_1b_2 - a_2b_1 \end{pmatrix}$$

  と定義される.
- 外積自体は3次元以外の次元でも定義されるが，あまり出てこない.

例題:

$$\boldsymbol{a} = (2,4,1)^T, \boldsymbol{b} = (0,5,3)^T.$$

に対して，外積 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ を求めよ.

解答:

$$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 4\cdot 3 - 1\cdot 5 \\ 1\cdot 0 - 2\cdot 3 \\ 2\cdot 5 - 4\cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ -6 \\ 10 \end{pmatrix}$$

行列の和・差・定数倍

- 行列の和と差は成分ごとにとる.
- 行列の定数倍は，各成分を定数倍する.

例題：

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 6 & 5 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 7 & -1 \\ -3 & 0 \end{pmatrix}.$$

に対して，$A + B$を求めよ.

解答：

$$A + B = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ \boxed{6} & 5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 7 & -1 \\ \boxed{-3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 9 & 2 \\ \boxed{3} & 5 \end{pmatrix}$$

例題：

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

に対して，$3A - B$を求めよ.

解答：

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

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

$$= \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 5 & -2 \end{pmatrix}$$

行列の転置

- **転置**
  - 対角線で成分を折り返すこと.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{pmatrix} \Rightarrow A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \end{pmatrix}$$

  - インデックスは逆になる. $(A^T)_{i,j} = A_{j,i}$

  - ベクトルの場合，縦ベクトルから横ベクトルになる.
  - 縦ベクトルを表す際にも使われる.

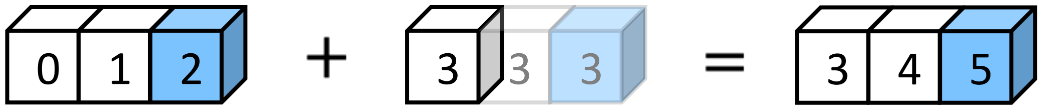
$$\boldsymbol{x} = (x_1 \quad x_2 \quad x_3)^T$$

ブロードキャスティング

- **ブロードキャスティング**
  - 形状が違う配列同士の演算．下記は数学では一般的ではない記法．

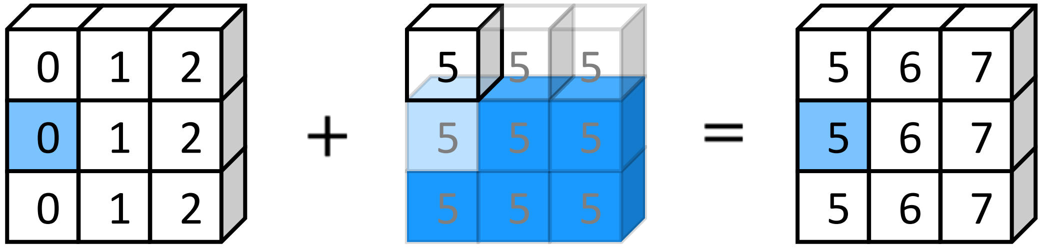
- ベクトルとスカラーの和

$$c_i = a_i + b$$



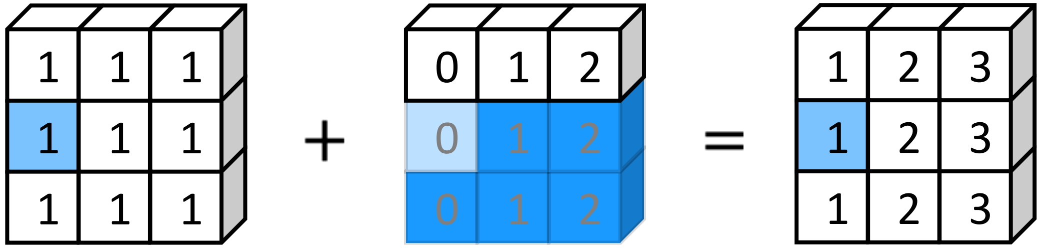
- 行列とスカラーの和

$$C_{i,j} = A_{i,j} + b$$



- 行列とベクトルの和
  - 行列の行または列の次元数とベクトルの次元数が一致していれば可能．

$$C_{i,j} = A_{i,j} + b_j$$



行列積とアダマール積

• 行列積

- AB と表記.
- 2つ以上の行列に対し，それぞれの成分の全組合せに対して乗算を行うこと.

例：

$$1\times1+2\times2+3\times3$$

$$\begin{pmatrix} \boxed{1} & \boxed{2} & \boxed{3} \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \boxed{1} & 4 \\ \boxed{2} & 5 \\ \boxed{3} & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{14} & 32 \\ 32 & 77 \\ 50 & 122 \\ 68 & 167 \end{pmatrix}$$

4×3　　3×2　　4×2

一致していなければならない

• アダマール積

- $A\circ B$ または $A\odot B$ と表記.
- 同じサイズの2つ以上のテンソルに対し，対応する各要素を掛け合わせること.

例：

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

行列積とアダマール積

• 行列積

- AB と表記.
- 2つ以上の行列に対し，それぞれの成分の全組合せに対して乗算を行うこと.

例題:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -6 & 5 & 4 \end{pmatrix}.$$

に対して，AとBの積を求めよ.

解答:

$$AB = \begin{pmatrix} 1\cdot 1 + 1\cdot(-6) & 1\cdot 2 + 1\cdot 5 & 1\cdot 3 + 1\cdot 4 \\ 2\cdot 1 + 2\cdot(-6) & 2\cdot 2 + 2\cdot 5 & 2\cdot 3 + 2\cdot 4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -5 & 7 & 7 \\ -10 & 14 & 14 \end{pmatrix}$$

• アダマール積

- $A \circ B$ または $A \odot B$ と表記.
- 同じサイズの2つ以上のテンソルに対し，対応する各要素を掛け合わせること.

例題:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 3 & -3 \\ 4 & -4 \end{pmatrix}.$$

に対して，AとBのアダマール積を求めよ.

解答:

$$A \circ B = \begin{pmatrix} 1\cdot 3 & (-1)\cdot(-3) \\ 2\cdot 4 & (-2)\cdot(-4) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 8 & 8 \end{pmatrix}$$

行列積の性質

- 分配法則を満たす．

$$A(B+C) = AB + AC$$

- 結合法則を満たす．

$$A(BC) = (AB)C$$

- 交換法則は満たさない．

$AB = BA$ は必ずしも成立しない．

- 行列式の転置は次のように書き換えられる．

$$(AB)^T = B^T A^T$$

行列のランク

- **行列のランク（階数）**
  - $m \times n$行列 A に対して行基本変形を行い，階段行列に変形した時に成分が全て0ではない行の数を「A のランク（階数）」といい，$\mathrm{rank}(A)$ と表記する．
  - 線形独立な（行または列）ベクトルの数と一致する．

    互いの線形和で表すことができない複数のベクトル（$\neq \mathbf{0}$）のこと

- **行基本変形**
  - ある行をc倍($c \neq 0$)すること．
  - 2つの行の位置を入れ替えること．
  - ある行のc倍($c \neq 0$)を他の行へ足すこと．

- **階段行列**
  - 行番号が増えるにつれて主成分より前に連続して並ぶ0の数が増え，主成分のない行以下の行では成分が全て0の行列．
    （主成分：ある行の中で左から数え始めてから初めて現れる，0でない数のこと）

行列のランク

• 行列のランク（階数）

- $m \times n$行列 A に対して行基本変形を行い，階段行列に変形した時に成分が全て0ではない行の数を「A のランク（階数）」といい，$\mathrm{rank}(A)$ と表記する．

例題：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 4 \\ -1 & 1 & -2 \\ 3 & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

のランクを求めよ．

解答：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 4 \\ -1 & 1 & -2 \\ 3 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

行基本変形

②′ = ② + ①×(−2)

③′ = ③ + ①

④′ = ④ + ①×(−3)

$$\rightarrow \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & -6 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} ①' \\ ②' \\ ③' \\ ④' \end{array}$$

行基本変形

③″ = ③′ + ②′×3

④″ = ④′ + ②′×(−6)

$$\rightarrow \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} ①'' \\ ②'' \\ ③'' \\ ④'' \end{array}$$

階段行列

$\mathrm{rank}(A) = 2$

単位行列・対角行列

- **単位行列**
  - 対角成分が1で，それ以外の成分が0である正方行列．
  - n次元の単位行列を E または E_n と表す．

例：

$$E_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

対角成分

- **対角行列**
  - 対角成分以外の成分が0である正方行列．

例：

$$\mathrm{diag}(1,3,8) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

行列式・正則行列・逆行列・直交行列

- **行列式**
  - 正方行列 A に対して，$\det(A)$ または $|A|$ と表す.
  - 2次正方行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して，$|A| = ad - bc$ で求められる.

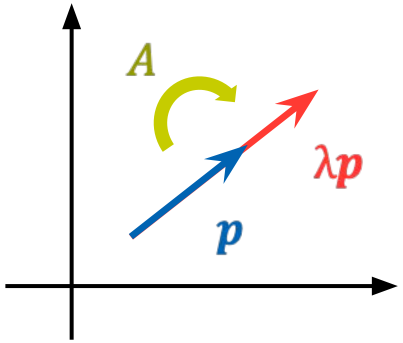
- **正則行列**
  - A が逆行列 A^{-1} を持つとき， A を正則行列という.

- **逆行列**
  - 正方行列Aに対して $XA = AX = E$ を満たす行列Xのこと． A^{-1} と表す.

- **直交行列**
  - 転置行列と逆行列が一致する正方行列のこと．すなわち， $AA^T = A^TA = E$.

固有値分解

- **固有値・固有ベクトル**
  - 正方行列 A に対して $A\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{p}$ を満たす数λとベクトル $\boldsymbol{p}(\neq \mathbf{0})$ があるとき，λ を固有値，$\boldsymbol{p}$ を固有ベクトルという.
  - $\boldsymbol{p}$ は A で変換しても縮尺だけが変化する.
  - 通常は単位固有ベクトルのみに着目する.



- **固有値分解**
  - **対角化**ともいう．正方行列 A を線形独立なn個の固有ベクトルによって次のように分解すること.

$$A = P\mathrm{diag}(\boldsymbol{\lambda})P^{-1}$$

    - ただし，$P = \left[\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{p}^{(n)}\right]$．および $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]^T$.
  - 全ての行列が固有値分解できるわけではないが，機械学習ではできることが多い.
  - **実対称行列**（対称行列かつ実数）は，全ての固有値が実数であり，それぞれの固有ベクトルが直交する.
  - 対角行列という扱いやすい形への分解により，A による変換の性質が把握しやすくなる.

特異値分解

• 特異値分解

- 行列を特異値と特異ベクトルに分解すること.

$$A = UDV^T$$

  - U と V は直交行列（U の列は左特異ベクトル，V の列は右特異ベクトル）.
  - D は対角成分が特異値である行列.

- 固有値分解とは異なり，すべての実行列について定義できる.
- 機械学習では，低ランク近似に使われることがある.

$$\begin{matrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{matrix} = \begin{matrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{n1} & \cdots & u_{nn} \end{matrix} \times \begin{matrix} \sigma_{11} & 0 & \cdots & & & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 & \cdots & & & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & & \sigma_{nn} & 0 & \cdots & 0 \end{matrix} \times \begin{matrix} v_{11} & \cdots & u_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{m1} & \cdots & u_{mm} \end{matrix}$$

参考文献

[1] 石井俊全 (2015), “1冊でマスター 大学の線形代数”C.M.ビショップ (2012), ”, 技術評論社

[2] 三津村 直貴 (2021), “「テンソル」「ベクトル」「行列」とは？ディープラーニングの情報整理のカラクリ ”, ビジネス+IT, アクセス日：2024/01/09

[3] Jake VanderPlas (2016), “ Computation on Arrays: Broadcasting ”, Python Data Science Handbook, アクセス日：2024/01/09

[4] 大柴 徹弥 (2024), “ 機械学習によく出てくる「スカラー・行列・テンソル」とは？ ”, zero to one, アクセス日：2024/01/09

[5] 数学の景色 (2022), “ 行列の階数(ランク)の定義と求め方～計算の手順～ ”, 数学の景色, アクセス日：2024/01/09

[6] ますまとめ (2022), “【入門線形代数】階段行列-連立一次方程式- ”, ますまとめ, アクセス日：2024/01/09

松尾・岩澤研究室
MATSUO-IWASAWA LAB UTOKYO