ベクトルとは

ベクトルとは数値を一列に並べたものを呼ぶ。 大きさと方向をもった量と表現され$\vec{a}$などと矢印をつけて表されるが、機械学習分野では「単にパラメータや結果のスコアを並べたもの」 と解釈する。

ベクトルを$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$のように縦に並べたものを**縦ベクトル**、

$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$のように横に並べたものを**横ベクトル**と呼びます。

話を簡単にするため二次元（２つの成分をもった）ベクトル $\vec{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ について考えてみましょう。

２次元ベクトルは平面での矢印、もしくは原点Oから点を表します。

原点Oから$\boldsymbol{x}$までの距離を**ノルム**と呼びます。

$\boldsymbol{x}$のノルムは$\|x\|$と表し、三平方の定理より

$$\begin{aligned} \|x\| &= \sqrt{3^2 + 4^2} \\ &= 5 \end{aligned}$$

となります。

４のように大きさのみを表すものを**スカラー**といい、 $4 \times \boldsymbol{x}$とすると各成分が４倍されるため $4 \times \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 12 \\ 16 \end{pmatrix}$ となり、矢印が各成分方向に４倍されるイメージです。

ここで $\boldsymbol{x}$のノルムを１にしたものを単位ベクトルと呼び、 $\frac{1}{\|x\|}\boldsymbol{x}$で表されます。

具体的には $\frac{1}{\|x\|}\boldsymbol{x} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ となり、$\boldsymbol{x}$の方向のノルムが１のベクトルになります。

$$= \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ \frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

また行列(※後述）$\boldsymbol{A}$、スカラーλに対して、

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$$

を満たす$\boldsymbol{x}$のことを**固有ベクトル**と呼びます。

これは$\boldsymbol{x}$が$\boldsymbol{A}$によって回転、長さが変わるのですが、 $\boldsymbol{x}$が回転せずに、長さだけが増減するようなイメージです。

最後に**内積**を説明します。

$\boldsymbol{x}$と新しいベクトル $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$があったとすると、 内積を$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}$と表し、 それぞれの成分同士を掛け算したものの合計になり、 $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = 3 \times 1 + 4 \times 2 = 11$となります。

また$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{y}$のなす角度をθとすると

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = \|x\|\|y\| \cos\theta$$

とも表せます。

これの意味するところはθが90°、270°のとき、 内積が0となり、$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{y}$が直交している状態になります。

また図形としては、内積はそれぞれのベクトルを辺とした平行四辺形の面積に相当します。

行列とは

行列とは$m \times n$個の数値を長方形に並べたもので、 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ のように表し上からi番目をi行、 左からj番目をj列と呼び、 i行j列の成分をa_{ij}と表す。

上で説明したベクトル $\boldsymbol{x}$は2行１列の行列と見なすこともできる。

行列の和と積

行列は多くの数値を一括して計算したりするときに便利であり、行列同士の計算が定義される。

$\boldsymbol{A_{nm}}$ と$\boldsymbol{B_{nm}}$があったとして、

行列の和は $\boldsymbol{A_{nm}} + \boldsymbol{B_{nm}} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} b_{12} & \cdots & a_{1m} b_{1m} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} b_{22} & \cdots & a_{2m} b_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} + b_{n1} & a_{n2} b_{n2} & \cdots & a_{nm} b_{nm} \end{pmatrix}$ となる。 $\boldsymbol{A}$と $\boldsymbol{B}$の各成分をそれぞれの成分ごとに足しただけである。 ここで注意すべきは $\boldsymbol{A}$と $\boldsymbol{B}$の行数と列数が同じ行列でしか計算できないことです。

また$\boldsymbol{A_{nm}}$ と$\boldsymbol{B_{mo}}$があったとして、

行列の積は $\boldsymbol{A_{nm}} \boldsymbol{B_{mo}} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} a_{1i} b_{i1} & \sum_{i=1}^{m} a_{1i} b_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} a_{1i} b_{i1} \\ \sum_{i=1}^{m} a_{2i} b_{i2} & \sum_{i=1}^{m} a_{2i} b_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} a_{2i} b_{i2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{m} a_{ni} b_{io} & \sum_{i=1}^{m} a_{ni} b_{io} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} a_{ni} b_{io} \end{pmatrix}$

行列Aのi行目を抜き出した横ベクトルの転置と行列Bのi列目を抜き出した縦ベクトルの内積が各成分になっているイメージです。

ここで注意すべきなのは、 行列Aの行数と行列Bの列数が等しい必要があり、出来上がる行列はn行o列になります。

行列の積が行列演算の醍醐味でもあり、**写像**とよばれ元々のベクトル空間から別のベクトル空間へ点を写すイメージです。

分かりづらいので具体例をあげます。

スポーツテストの成績をベクトルとして、
$\boldsymbol{x} = (50m$走（秒）、走り幅跳び（cm)、反復横跳び(回)、ハンドボール投げ（M)）=（$6.7, 220, 49, 43$）とあって、ある行列$\boldsymbol{A}$の積によって、各スポーツの適正（サッカー、 野球、 テニス）をスコアにしたベクトル$\boldsymbol{y}$に変換するとしたとき

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$$

と表せます。 これはテストの成績であるR^4次元空間からスポーツの適正スコアとなるR^3次元空間への写像になります。 注意すべきは同じ次元ベクトルへの写像だったとしても**全く別の空間への写像**だと意識することです。

また実数の積と異なり、一般的には

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}$$

であることに注意してください。

単位行列

行列において、１に相当する行列を**単位行列**といい、

$$\boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

のように対角成分(e_{ii}成分)が１、それ以外が０の行列になる。

単位行列は次の性質を持つ。

$$\boldsymbol{EA} = \boldsymbol{AE} = \boldsymbol{A}$$

$$\boldsymbol{E}^n = \boldsymbol{E}(n：\text{自然数})$$

逆行列と正則行列

また

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

を満たす行列　$\boldsymbol{B}$を$\boldsymbol{A}$の**逆行列**と呼び、$\boldsymbol{A}^{-1}$と表す。

逆行列は実数でいう逆数に相当する行列になる。

また逆行列の意味は行列$\boldsymbol{A}$での写像したベクトルを$\boldsymbol{A^{-1}}$で写像すると元のベクトルに戻ることを意味します。

逆行列を持つには

- 行列式$\neq 0$
- 正方行列である（列数と行数が同じである）

を満たす必要があり、逆行列を持つ行列を**正則行列**と呼びます。 正則行列の写像であるならば必ず逆行列が存在するため、$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Ax}$があったとき、$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}$が言えます。

転置行列

転置行列とは(i, j)成分を(j, i)成分と取り替えた行列になり、$\boldsymbol{A}$における転置行列は$\boldsymbol{A^T}$と表記します。

たとえば、

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

ならば、

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

となります。

対角行列

対角行列とは

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

のように対角成分(i, i)以外が0である行列であり、$diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$と表記することもあります。

対角行列の演算結果は $y = (\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \cdots, \lambda_n x_n)$となり、計算しやすくなるため

直交行列

直行行列とは転置行列と逆行列が等しくなる正方行列のことです。

式で表すと $A^T = A^{-1}$となります。

直行行列を縦ベクトルに分けて$A = (\overrightarrow{a_1}, \overrightarrow{a_2}, \cdots, \overrightarrow{a_n})$としたとき それぞれの縦ベクトルは

- それぞれが直交（内積が０） - すべての長さ（ノルム）が1

という特徴があります。

対称行列

対称行列とは行列の要素が$a_{ij} = a_{ji}$を満たす行列のことです。

例）

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 3 & 0 & 12 \\ 7 & 12 & 9 \end{pmatrix}$$

対角化

ある行列Aに対して、

$$P^{-1}AP = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$$

となるような行列Pを求めることを**対角化する**という。

このPを求めるためには$Ax = \lambda x$(λはスカラー)となるようなx とλを求める。 つまりベクトルxへの写像が必ずxの直線上に移るようなxとλの組み合わせを求めることになる。

このλを固有値、xを固有ベクトルと呼び、 この固有ベクトルを$(p_1, p_2, \cdots, p_n)$のように並べた行列がうまいPとなる。

対角化することでAの線形変換を対角行列の変換に置き換えることができ計算がやりやすくなる。

固有値分解

Aが対称行列のとき Aの固有値ベクトルq_iを並べた行列Q,$\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$によって

$$A = Q \Lambda Q^{-1}$$

と表すことができ、これをAの固有値分解と呼ぶ。

MLDLにおいて線形代数がどう使われるか

機械学習は大量のデータ、パラメータを計算することになるが for文を複数回回すような計算より行列計算をするライブラリを使った 並列計算の方が高速で効率よく計算が行えます。

その他、

- $f(x) = \boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{x}$のようにコードを簡潔にかけるためコードがクリーンになる。
- 行列計算や行列の性質を使って、パラメータの性質を一括で判断することができる。

といったメリットがあるため、MLDL分野において線形代数で使われています.

問題の方はpngファイルで保存しております。

In [ ]: