作成日：2019 年 9 月 1 日
慶應義塾大学理工学部物理学科
岡崎健人

卒研ゼミ「深層学習」

2　線形代数

2.6　特殊な行列とベクトル

- $$D = \begin{bmatrix} v_1 & & & \\ & v_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & v_n \end{bmatrix}$$
  のように対角成分以外の成分がゼロであるような行列を対角行列（diagonal matrix）といい、それを $\mathrm{diag}(v_1, v_2, \ldots, v_n)$ や、ベクトル $\boldsymbol{v} = [v_1, v_2, \ldots, v_n]^\top$ を用いて $\mathrm{diag}(\boldsymbol{v})$ などと表記する。対角行列 D とベクトル $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^\top$ との積は
  $$D\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} v_1 & & & \\ & v_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 x_1 \\ v_2 x_2 \\ \vdots \\ v_n x_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{v} \odot \boldsymbol{x}$$
  となる。
- 対角行列の対角成分にゼロが現れなければ、行列式はゼロでないので正則であり、逆行列が存在することがわかる。その逆行列 D^{-1} も対角行列で、その i 番目の成分は $1/v_i$ となる。
- 一般に対角行列といえば正方行列の一種だが、対角行列はかならずしも正方行列である必要はないと筆者はのべている。たとえば
  $$\begin{bmatrix} v_1 & & \\ & v_2 & \\ & & v_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 x_1 \\ v_2 x_2 \\ v_3 x_3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} v_1 & & & 0 & 0 \\ & v_2 & & 0 & 0 \\ & & v_3 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 x_1 \\ v_2 x_2 \\ v_3 x_3 \end{bmatrix}$$
  のように、D が縦に長い長方形ならば計算結果のベクトルにいくつかのゼロを付けることができ、横に長い長方形ならばベクトルの最後の成分を破棄することができる。
- 対称行列（symmetric matrix）とは、対角成分に関して成分が対称であるような行列である。すなわち転置をとっても変わらない：$A^\top = A$.
- 単位ベクトル（unit vector）とはユークリッド・ノルムが 1 となる（単位ノルムをもつ）ようなベクトルである：$\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$.
- ゼロベクトルでない 2 つのベクトル $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ について $\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y} = 0$ であるならば、それらは互いに直交している（orthogonal）という。さらにそれらのベクトルが単位ノルムを持つならば、正規直交（orthonomal）であるという。

- 直交行列とは、逆行列が転置行列に等しいような正方行列のこと。すなわち I を n 次の単位行列として

$$A^\mathsf{T} A = A A^\mathsf{T} = I$$

となるような n 次正方行列 A を直交行列という。この等式から A の列ベクトルは正規直交基底をなしていることがわかる。なぜならば $A = [\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \cdots\ \boldsymbol{u}_n]$ のように列ベクトルを用いて表したとき

$$A^\mathsf{T} A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1{}^\mathsf{T} \\ \boldsymbol{u}_2{}^\mathsf{T} \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_n{}^\mathsf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \ldots & \boldsymbol{u}_n \end{bmatrix} = (i,j) \text{ 成分に } \boldsymbol{u}_i{}^\mathsf{T} \boldsymbol{u}_j \text{をもつ行列} = I$$

より $\boldsymbol{u}_i{}^\mathsf{T} \boldsymbol{u}_j = \delta_{ij}$ となるからである。