

回帰分析入門 ～予習資料～

京都大学PSE研究室
助教 金尚弘

2017年12月2日@ Physchem Forum Japan

- スカラー

- 1つの変数, 1つの値を意味する. 小文字斜体で表記する.
- x

- ベクトル

- 複数のスカラーを縦に並べたもの. 小文字斜体太字で表記する.
- $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$
- N を要素数と呼ぶ. 回帰分析ではサンプル数, バッチ数に対応する
- T は転置(縦横を逆転すること)の記号

- 行列

- 複数のベクトルを横に並べたもの. 大文字斜体太字で表記する.

- $$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_M] = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & \cdots & x_{NM} \end{bmatrix}$$

- スカラー同士の和, 差, 積, 商
 - 省略
- スカラー a とベクトル x の演算
 - 積: $a\mathbf{x} = [ax_1, ax_2, \dots, ax_N]^T$
 - 商: $\mathbf{x}/a = [x_1/a, x_2/a, \dots, x_N/a]^T$
- ベクトル x とベクトル a の演算 (x と a 要素数が同じと仮定する)
 - 和, 差: $\mathbf{x} \pm \mathbf{a} = [x_1 \pm a_1, x_2 \pm a_2, \dots, x_N \pm a_N]^T$
 - 積 (線形結合): $\mathbf{x}^T \mathbf{a} = x_1 a_1 + x_2 a_2 + \dots + x_N a_N = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$

- 行列 X とベクトル a の積(X の列数と a の要素数が同じと仮定する)

$$Xa = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & \cdots & x_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{m=1}^M x_{1m} a_m \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^M x_{Nm} a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \mathbf{a} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N^T \mathbf{a} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_n = [x_{n1}, \dots, x_{nM}]^T$$

- 行列 Xa の行数は N (X の行数), 列数は1 (a の列数)である.
- 行列 Xa 第 n 要素は行列 X の n 行目とベクトル a の積(線形結合)

- 行列 X とベクトル A の積(X の列数と A の行数が同じと仮定する)

$$XA = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & \cdots & x_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & \cdots & a_{ML} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{m=1}^M x_{1m}a_{m1} & \cdots & \sum_{m=1}^M x_{1m}a_{mL} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{m=1}^M x_{Nm}a_{m1} & \cdots & \sum_{m=1}^M x_{Nm}a_{mL} \end{bmatrix}$$

$$XA = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{x}_1^T \mathbf{a}_L \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_N^T \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{x}_N^T \mathbf{a}_L \end{bmatrix} = [X\mathbf{a}_1, \dots, X\mathbf{a}_L]^T \quad \begin{aligned} \mathbf{x}_n &= [x_{n1}, \dots, x_{nM}]^T \\ \mathbf{a}_l &= [a_{1l}, \dots, a_{ML}]^T \end{aligned}$$

- 行列 XA の行数は N (X の行数), 列数は L (A の列数)である.
- 行列 XA の n 行 m 列要素は行列 X の n 行目と行列 A の l 列目の積 (線形結合)

- 正方行列: 行数と列数が同じ行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

- 単位行列: 正方行列で対角要素が1, その他の要素がゼロの行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{単位行列は } I, E \text{ と表記されることが一般的.}$$

本資料では I と表記する.

- 逆行列: 正方行列 X に対して, $XA=AX=I$ となる行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \text{ に対する逆行列は } \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$

X に対する逆行列は X^{-1} と表記されることが一般的 (割り算のイメージ)

- 対称行列: 転置しても変化しない行列 ($X=X^T$)

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} \quad X^T X \text{ (次ページで説明)}$$

● 転置の公式

$$(X_1^T)^T = X_1$$

$$(X_1 X_2)^T = X_2^T X_1^T$$

$X^T X$ が対称行列である証明

$$(X^T X)^T = X^T X^{TT} = X^T X$$

● 微分の公式 (a と A は定数)

$$\frac{\partial a^T x}{\partial x} = a$$

$$\frac{\partial x^T A x}{\partial x} = 2Ax \quad (A \text{が対称行列の場合})$$

回帰分析をする際には、高校生の感覚で微分して大丈夫です。
(ax を x で微分すると a , ax^2 を x で微分すると $2ax$ みたいに)