

医学統計学：最低限の基礎知識 1

テイラー展開・ベクトル・行列

芳賀昭弘 *

本講義は医学統計学という名前ですが、医学だからと言って特別な統計学が用意されているわけではありません。古くはギリシャ時代から自然界や社会で起こる現象を理解しようと試みた数学的手法を体系的にまとめたものが統計学という学問であり、それを医学に応用するものが医学統計学です。従って医学統計学を学ぶためには、統計学の理解に必要な最低限の数学的素養が必要となります。この資料と次の資料（2 回目の講義と 3 回目の講義で使用）は、その「最低限の数学」を私なりにまとめたものです。数学が得意でない学生は、まずはこの資料で書かれていることが理解できるように事前・事後学習を進めてください。数学が得意な学生は、もっともっと研鑽を積んでください。大学数学に関しては、以下の参考図書を挙げておきます；

物理のための数学（和達 三樹 著）

物理のための応用数学（小野寺 嘉孝 著）

これとは別に、特に最近の数理統計・機械学習の理解に役に立つ実用本として以下を挙げておきます。

パターン認識と機械学習の学習－バイズ理論に挫折しないための数学（光成 滋生 著）

数学を学ばずに統計学を身につけることはできません。逆に数学の素養を身につけることで、統計学の本が読めるようになるはずです。学問に王道なし。コツコツと数学を身につけたものが統計学を身につける近道であることにいずれ気づくでしょう。統計学が、この激動の時代の荒波の中で皆さんの確固とした羅針盤となって医療に多大な貢献をもたらしてくれるものと私は信じています。

1 ベクトル (Vector) :

表記： \vec{A} , \mathbf{A} , など

方向（向き）を持つ量であり、次元を持つ。

1. 2 次元ベクトル

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}, \mathbf{A}^T = (A_x, A_y), \text{（ここで添字の } T \text{ は転置 (Transpose) という）}$$

A_x, A_y はベクトル \mathbf{A} の成分といい、それぞれは単なる数値で方向を持たない（スカラー (Scalar) という）。

2. 3 次元ベクトル

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix}, \mathbf{A}^T = (A_x, A_y, A_z)$$

* Electronic address: haga@tokushima-u.ac.jp

3. N 次元ベクトル

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix}, \mathbf{A}^T = (A_1, A_2, \dots, A_N)$$

4. ベクトルの和と差

$$\mathbf{A}^T \pm \mathbf{B}^T = (A_1 \pm B_1, A_2 \pm B_2, \dots, A_N \pm B_N)$$

5. ベクトルの大きさ

$$|\mathbf{A}| = \sqrt{A_1^2 + A_2^2 + \dots + A_N^2}$$

6. ベクトルの内積（スカラー積）

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \theta = A_1 B_1 + A_2 B_2 + \dots + A_N B_N$$

ここで θ は \mathbf{A} と \mathbf{B} のなす角

$$\text{転置記号で表すと } \mathbf{A}^T \mathbf{B} = (A_1, A_2, \dots, A_N) \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_N \end{pmatrix} = A_1 B_1 + A_2 B_2 + \dots + A_N B_N$$

（これは行列の掛け算の作法（後述）と同じです）

$$\text{交換則: } \mathbf{A}^T \mathbf{B} = \mathbf{B}^T \mathbf{A}$$

$$\text{分配則: } \mathbf{A}^T (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A}^T \mathbf{B} + \mathbf{A}^T \mathbf{C}$$

7. ベクトルの外積（ベクトル積）

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \sin \theta \hat{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} A_2 B_3 - A_3 B_2 \\ A_3 B_1 - A_1 B_3 \\ A_1 B_2 - A_2 B_1 \end{pmatrix}$$

ここで $\hat{\mathbf{C}}$ は、2つのベクトル \mathbf{A} と \mathbf{B} が作る平面に垂直な向き持つ単位ベクトル（単位ベクトルとは大きさが1のベクトルのこと）。

$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}$ （ベクトル積では勝手に順番を変えてはいけない！）なお、上記のベクトル積は3次元にのみ適用可能。 N 次元のベクトル積はクロス積と呼ばれ、

$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \circ \mathbf{B} - \mathbf{B} \circ \mathbf{A}$ 、と定義される（ $\mathbf{A} \circ \mathbf{B}$ は直積 $\mathbf{A} \mathbf{B}^T$ のこと。 $\mathbf{A} \mathbf{B}^T$ の演算は行列の掛け算の作法で行うこと）。

2 行列（Matrix）：

1. 行列の表記

m 行 n 列の行列（ $m \times n$ 行列）；

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

2. 行列の和と差

$$A \pm B = \begin{pmatrix} a_{11} \pm b_{11} & a_{12} \pm b_{12} & \cdots & a_{1n} \pm b_{1n} \\ a_{21} \pm b_{21} & a_{22} \pm b_{22} & \cdots & a_{2n} \pm b_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} \pm b_{m1} & a_{m2} \pm b_{m2} & \cdots & a_{mn} \pm b_{mn} \end{pmatrix}$$

3. 定数倍

s をスカラーの定数とすると、

$$sA = \begin{pmatrix} sa_{11} & sa_{12} & \cdots & sa_{1n} \\ sa_{21} & sa_{22} & \cdots & sa_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ sa_{m1} & sa_{m2} & \cdots & sa_{mn} \end{pmatrix}$$

4. 行列の積

A を $m \times n$ 行列、 B を $n \times k$ 行列とすると

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1k} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nk} \end{pmatrix}$$

$$AB = A \times B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + \cdots + a_{1n}b_{n1} & \cdots & a_{11}b_{1k} + a_{12}b_{2k} + \cdots + a_{1n}b_{nk} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1}b_{11} + a_{m2}b_{21} + \cdots + a_{mn}b_{n1} & \cdots & a_{m1}b_{1k} + a_{m2}b_{2k} + \cdots + a_{mn}b_{nk} \end{pmatrix}$$

行列 AB の i 行 j 列の要素を $(AB)_{ij}$ とすると、次のようにかけることがわかる；

$$(AB)_{ij} = \sum_n a_{in}b_{nj}$$

左側の行列の行数と、右側の行列の列数が一致しているものだけ、行列の掛け算が定義できることに注意。
(つまり、行列の積でも勝手に順番を変えてはいけない！)

5. 特徴のある行列

行列の転置：行と列を入れ替えること (A^T と書く)

対称行列： $A = A^T$ となる行列

反対称行列： $A = -A^T$ となる行列

エルミート行列： $A = A^\dagger = (A^*)^T$ となる行列 (* は複素共役を取ることを意味する)

対角行列：対角成分のみ値を持ち、他の要素が 0 のもの。特別な例として単位行列 I (対角成分が全て 1 で他は 0) がある。

逆行列： $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ を与える A^{-1} を A の逆行列という。

ユニタリー行列： $A^T = (A^*)^{-1} \rightarrow A^\dagger = A^{-1}$ となる A をユニタリー行列という。特に A が実数の場合は直交行列という。

6. 行列式 (determinant)

表記は $\det A, |A|$

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} \quad \text{さらに}$$

高い次元の行列の行列式を求めるには、以下の性質を利用すると便利

- 1) 行と列を交換しても行列式の値は変わらない
- 2) どの行と列で展開しても、行列式の値は変わらない
- 3) 行もしくは列が1つでも全て0となっているとき、行列式は0となる
- 4) 任意の2つの行もしくは列を入れ替えると、行列式は符号だけ変わる
- 5) 行列を定数倍すると、行列式も定数倍となる
- 6) 2つの行もしくは列が定数倍となっている場合、行列式は0となる
- 7) 行列式の任意の行または列に定数をかけて、これを他の行または列に加えても行列式の値は変わらない
- 8) A, B が正方行列ならば $|AB| = |A||B|$

練習：

$$\begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 3 & -2 & 4 \\ 8 & 1 & 7 \end{vmatrix} \xrightarrow{1 \text{ 行目を } 2 \text{ 倍して } 2 \text{ 行目に足す}} \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 3+4 & -2+2 & 4+10 \\ 8 & 1 & 7 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 7 & 0 & 14 \\ 8 & 1 & 7 \end{vmatrix} \xrightarrow{1 \text{ 行目を } -1 \text{ 倍して } 3 \text{ 行目に足す}} \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 7 & 0 & 14 \\ 8-2 & 1-1 & 7-5 \end{vmatrix} \\ = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 7 & 0 & 14 \\ 6 & 0 & 2 \end{vmatrix} \xrightarrow{1 \text{ 列目と } 2 \text{ 列目を交換}} - \begin{vmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & 6 & 2 \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} 7 & 14 \\ 6 & 2 \end{vmatrix} = -(14 - 84) = 70$$

行列式が0となるとき、行ベクトルもしくは列ベクトルは線形従属という（行列式が0でないとき、線形独立という）。

線形従属の例：

$$\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 2 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 6 & 2 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 6 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

どのような行列式が0になるのか、わかるかな？

7. 逆行列

2×2 行列

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}$$

高い次元では、

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} C_{11} & \cdots & C_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & \cdots & C_{nn} \end{pmatrix}$$

ここで $C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$ であり（余因子という）、 M_{ij} は A から i 行 j 列を除いた行列の行列式の値

である。逆行列の中の C の要素を表す添字が反転していることに注意。

8. 連立方程式と逆行列

連立方程式

$$\begin{aligned}x + 2y &= 5 \\ 3x + 4y &= 6\end{aligned}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$ と書くと、逆行列 A^{-1} を使って

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}$$

となる。逆行列 A^{-1} は、

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}$$

従って、

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 8 \\ -9 \end{pmatrix}$$

$x = -4, y = 9/2$ である。

一般に、 n 個の未知変数 $x_1 \sim x_n$ に対して m 個の線形方程式

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_m\end{aligned}$$

に対して、 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ とかける。 $n = m$ であれば A^{-1} を計算することで $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ により解が求まる。 $n \neq m$ のとき、転置 A^T を両辺にかけて、 $A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ とすることで、 $A^T A$ が正方行列となり、その逆行列 $(A^T A)^{-1}$ が得られる（ムーア・ペンローズの擬似逆行列という）。よって $\mathbf{x} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$ により解が求まる。

9. 固有値と固有ベクトル、対角化

$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ を満たす \mathbf{v} を固有ベクトル、 λ を固有値という。解は次元の数だけ得られる（重根も含める）。 A がエルミート行列で、固有ベクトル $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_n$ を並べて作った行列 $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_n)$ およびそのエルミート共役行列 V^\dagger により A を対角行列に変換することができる（対角化）

$$V^\dagger A V = \Lambda$$

$$\text{ここで } \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

練習： $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$ を対角化してみよう。特性方程式により、

$$A = \begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 \\ -1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)^2 - 1 = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda-3)(\lambda-1) = 0$$

よって固有値は 1 と 3 である。

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

の λ に 1 と 3 を入れた時の v_1 と v_2 を求める。

$\lambda = 1$ のとき $v_1 = v_2$ となる。また、 $\lambda = 3$ のとき $v_1 = -v_2$ となる。固有ベクトルは

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\lambda=1} &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{v}_{\lambda=3} &= c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ここで c_1, c_2 は定数。ベクトルの大きさを 1 となるように規格化すると、 $c_1 = 1/\sqrt{2}$, $c_2 = 1/\sqrt{2}$ となる。よって、 $V = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ であり、 V のエルミート共役行列も $V^\dagger = V$ である。よって、

$$\begin{aligned} V^\dagger A V &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

10. 座標変換とベクトル

3次元空間において、座標変換後の座標 (x', y', z') は変換前の座標 (x, y, z) に対して次のように一般的に表現することが出来る；

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{r}' = A\mathbf{r} - \mathbf{b}$$

A は回転行列、 \mathbf{b} は平行移動（並進）ベクトル。

例題： z 軸周りに回転する座標変換の回転行列を求めよ。

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

例題： z 軸周りに回転する座標変換の回転行列の逆行列を求めよ。

$\mathbf{r}' = A\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} = A^{-1}\mathbf{r}'$ なので、 θ の回転に対して $-\theta$ とすればそれが逆行列のことになる。

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

（各自、逆行列を計算して上と一致することを確認してくださいね）

3 ベクトルの微分 derivative :

1. 微分演算子

n 次元

$$\nabla^T = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

1) 勾配 (Gradient)

$\text{grad}\phi(\mathbf{x}) = \nabla\phi(\mathbf{x})$, ここで ϕ はスカラー場 (\mathbf{x} が決まると一つの値 (スカラー) が決まる)

2) 発散 (Divergence)

$\text{div}\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial A_1(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial A_2(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial A_n(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right)$, ここで \mathbf{A} はベクトル場 (\mathbf{x} が決まると一つの方向と大きさが決まる)

3) 回転 (Rotation)

$$\text{rot}\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x})$$

4) ラプラス演算子 (Laplacian)

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}, \dots, \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \right)$$

5) ヘッセ行列 (Hessian)

$$\nabla\nabla^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

4 テイラー (Taylor) 展開

1. 変数が 1 次元の時のテイラー展開

関数 $f(x)$ の $x = a$ 近傍でのテイラー展開

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(a)(x-a)^n$$

$f^{(n)}$ は $f(x)$ の n 階微分のこと

練習 :

(a) $\sin(x)$ の $x \sim 0$ 付近でのテイラー展開

(b) $\cos(x)$ の $x \sim 0$ 付近でのテイラー展開

(c) e^{ix} の $x \sim 0$ 付近でのテイラー展開

(d) $\log x$ の $x \sim 1$ 付近でのテイラー展開

2. 変数が多次元の時のテイラー展開

関数 $f(\mathbf{x})$ の $\mathbf{x} = \mathbf{a}$ 近傍でのテイラー展開

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \cdot \nabla]^n f(\mathbf{a})$$

例えば 2 次項は、ヘッセ行列で表される。

$$\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{a})^T \nabla\nabla^T f(\mathbf{a})(\mathbf{x} - \mathbf{a}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{a})^T \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{a}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{a}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{a}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\mathbf{a}) \end{pmatrix} (\mathbf{x} - \mathbf{a})$$