講義の概要

多変量解析 - 第 1 講

村田 昇

この講義について

講義の概要

- 講義題目 : 多変量解析
- 担当 : 村田 昇
- 授業の目標
  - 統計解析手法である **多変量解析**の基本的な方法に習熟する
    - 大規模データから効果的に情報を抽出する
    - データの背後に潜む統計的構造をモデル化して分析する
  - 解析法の数理科学的側面を理解する
  - 実データに多変量解析を適用する

受講にあたっての注意

- 微分積分学と線形代数学を復習しておく
- 自身で解析するための計算機環境を準備する
- 講義の資料は Moodle および Web で公開する
- 成績評価は課題の提出 (2 回) による
  - 回帰分析
  - 自由課題

講義計画 (予定)

- オリエンテーション
- 数学的準備 (1 回)
- 回帰分析 (3 回)
- 第 1 回レポート (回帰分析終了から 2 週間で締切)
- 主成分分析 (2 回)
- 判別分析 (2 回)
- クラスタ分析 (2 回)
- 時系列解析入門 (2 回)
- 第 2 回レポート (1 月末締切，自由課題)

講義の内容

- 多変量解析法の紹介
  - 回帰分析
  - 主成分分析
  - 判別分析
  - クラスタ分析
  - 時系列解析
- 関数の微分
  - ベクトルによる微分
  - 行列による微分

多変量解析

多変量解析とは

- 複数の変量からなるデータを分析する手法の総称
  - 回帰分析 : 複数の量を用いて注目する変数の値を説明する
  - 主成分分析 : 全体を説明する少数の特徴量を構成する
  - 判別分析 : 特徴量の違いでカテゴリ分けを行う
  - クラスタ分析 : 特徴量の違いに着目してクラスタを構成する
  - 時系列解析 : 時間とともに変化する現象を記述する
- 機械学習で使われる手法の基礎
  - 教師あり問題 : 回帰分析 (量的データ)・判別分析 (質的データ)
  - 教師なし問題 : 主成分分析・クラスタ分析

回帰分析の考え方

- ある変数 (目的変数) を別の変数 (説明変数) によって説明・予測するための関係式 (回帰式) を構成する
  - 単回帰 : 一つの変数で目的変数を説明する
  - 重回帰 : 複数の変数で目的変数を説明する
- 分析の事例
  - 広告宣伝費と商品の売上を予測する式を作り，広告効果があるかどうか判定する
  - 築年数・駅からの距離・広さ・間取りで家賃を説明する式を作り，新規に家賃を設定する際に利用する

例 : 体重と脳の重さの関係

	body	brain
Mountain beaver	1.350	8.1
Cow	465.000	423.0
Grey wolf	36.330	119.5
Goat	27.660	115.0
Guinea pig	1.040	5.5
Dipliodocus	11700.000	50.0
Asian elephant	2547.000	4603.0
Donkey	187.100	419.0
Horse	521.000	655.0
Potar monkey	10.000	115.0
Cat	3.300	25.6
Giraffe	529.000	680.0
Gorilla	207.000	406.0
Human	62.000	1320.0
African elephant	6654.000	5712.0
Triceratops	9400.000	70.0
Rhesus monkey	6.800	179.0
Kangaroo	35.000	56.0
Golden hamster	0.120	1.0
Mouse	0.023	0.4
Rabbit	2.500	12.1
Sheep	55.500	175.0
Jaguar	100.000	157.0
Chimpanzee	52.160	440.0
Rat	0.280	1.9
Brachiosaurus	87000.000	154.5
Mole	0.122	3.0
Pig	192.000	180.0

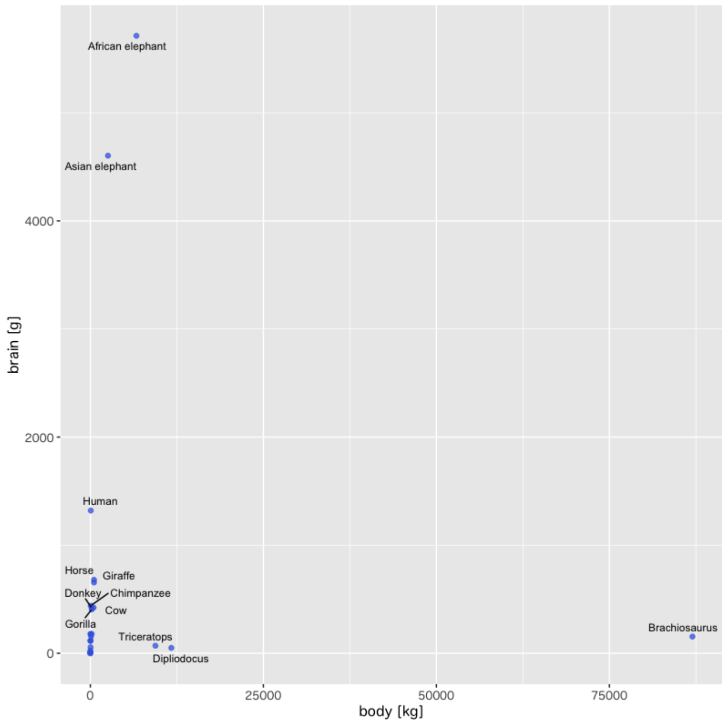

Figure 1: 体重と脳の重さの関係

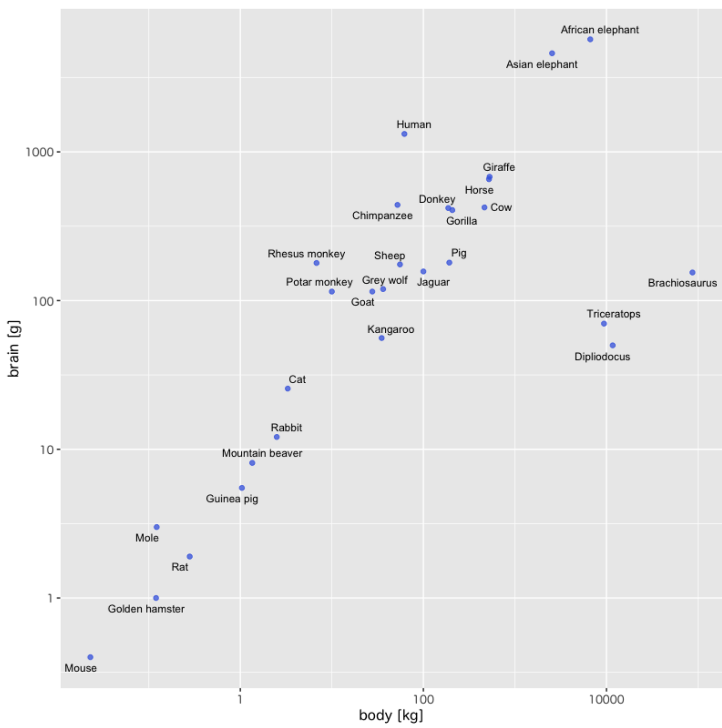

Figure 2: 体重と脳の重さの関係 (対数変換)

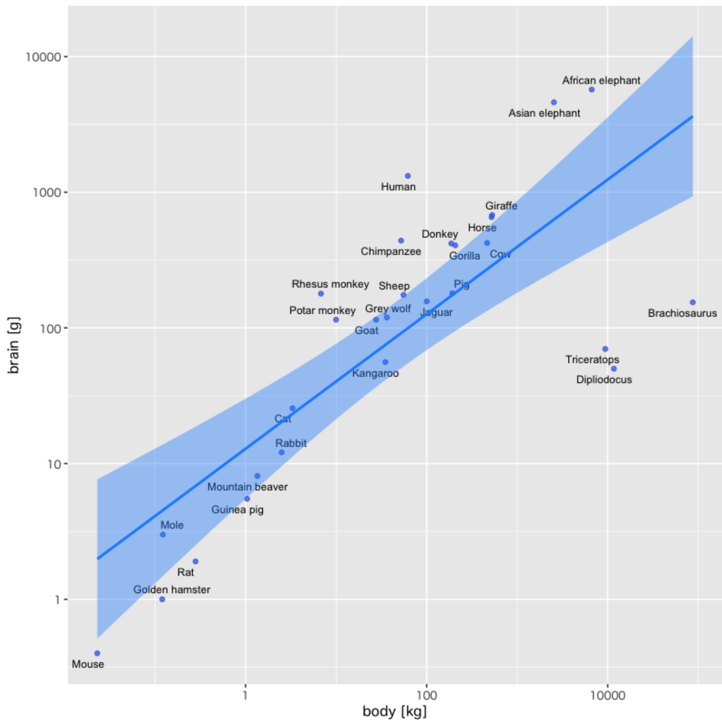

Figure 3: 回帰式とその信頼区間

例：ボルドーワインの価格と気候の関係

VINT	LPRICE2	WRAIN	DEGREES	HRAIN	TIME_SV
1952	-0.99868	600	17.1167	160	31
1953	-0.45440	690	16.7333	80	30
1954	NA	430	15.3833	180	29
1955	-0.80796	502	17.1500	130	28
1956	NA	440	15.6500	140	27
1957	-1.50926	420	16.1333	110	26
1958	-1.71655	582	16.4167	187	25
1959	-0.41800	485	17.4833	187	24
1960	-1.97491	763	16.4167	290	23
1961	0.00000	830	17.3333	38	22
1962	-1.10572	697	16.3000	52	21
1963	-1.78098	608	15.7167	155	20
1964	-1.18435	402	17.2667	96	19
1965	-2.24194	602	15.3667	267	18
1966	-0.74943	819	16.5333	86	17
1967	-1.65388	714	16.2333	118	16
1968	-2.25018	610	16.2000	292	15
1969	-2.14784	575	16.5500	244	14
1970	-0.90544	622	16.6667	89	13
1971	-1.30031	551	16.7667	112	12
1972	-2.28879	536	14.9833	158	11
1973	-1.85700	376	17.0667	123	10
1974	-2.19958	574	16.3000	184	9
1975	-1.20168	572	16.9500	171	8
1976	-1.37264	418	17.6500	247	7
1977	-2.23503	821	15.5833	87	6
1978	-1.30769	763	15.8167	51	5
1979	-1.53960	717	16.1667	122	4
1980	-1.99582	578	16.0000	74	3
1981	NA	535	16.9667	111	2
1982	NA	712	17.4000	162	1
1983	NA	845	17.3833	119	0
1984	NA	591	16.5000	119	-1
1985	NA	744	16.8000	38	-2
1986	NA	563	16.2833	171	-3
1987	NA	452	16.9833	115	-4
1988	NA	808	17.1000	59	-5
1989	NA	443	NA	82	-6

Characteristic	**Beta**	**95% CI**	**p-value**
WRAIN	0.0012	0.0002, 0.0022	0.024
DEGREES	0.6164	0.4190, 0.8138	<0.001
HRAIN	-0.0039	-0.0055, -0.0022	<0.001
TIME_SV	0.0238	0.0090, 0.0387	0.003

Abbreviation: CI = Confidence Interval
$R^2 = 0.828$; Adjusted $R^2 = 0.796$; Statistic = 26.4; p-value = <0.001

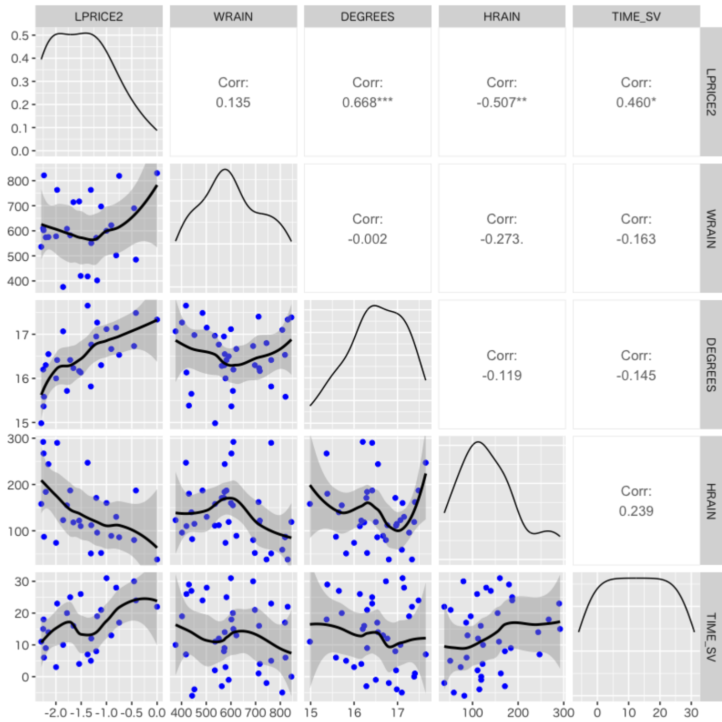

Figure 4: 価格と気候の散布図

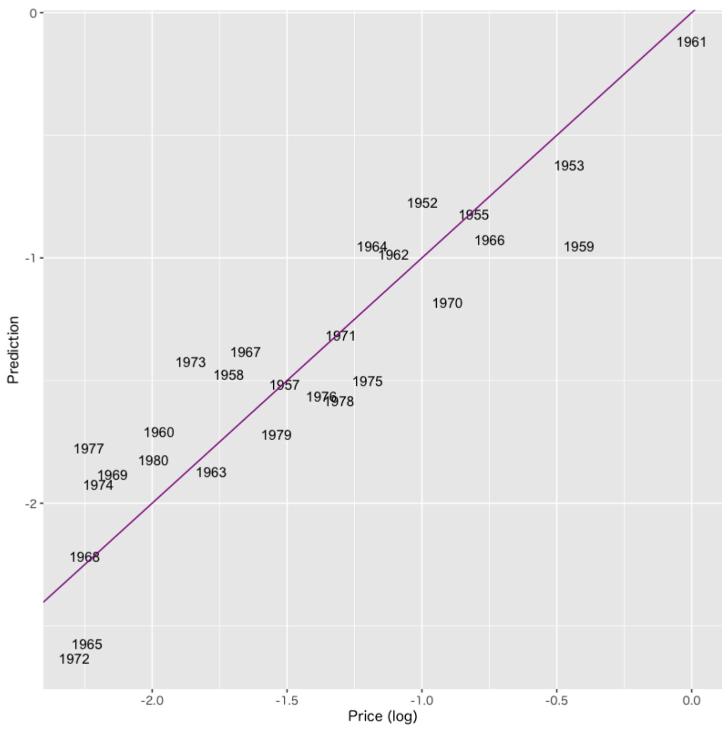

Figure 5: 重回帰による予測値と実際の価格

主成分分析の考え方

- 多数の変数が与えられたときに，変数のもつ構造を効率的に記述できる少数個の特徴量を構成する
- 分析の事例
  - 野球選手の打撃成績 (打率，本塁打数，打点など) から，打者としての特徴を記述する指標を作成する
  - 複数銘柄からなる株価の時系列データから，市場全体の変動を記述する総合指標を作成する

例：都道府県別の生活環境

県名	地方名	昼夜人口比	年少人口比	老年人口比	人口増減率	粗出生率	粗死亡率	婚姻率	離婚率	高校数／人
北海道	北海道	100.0	11.7	26.0	-0.47	7.09	10.63	4.86	2.12	192.6
青森県	東北	100.0	12.1	27.0	-0.95	6.79	12.81	4.33	1.78	194.3
岩手県	東北	99.7	12.4	27.9	-0.84	7.12	12.33	4.32	1.52	195.1
宮城県	東北	100.2	13.0	22.9	-0.09	8.05	9.51	5.30	1.70	146.3
秋田県	東北	99.9	11.1	30.7	-1.12	6.16	13.98	3.78	1.41	186.7
山形県	東北	99.8	12.6	28.3	-0.78	7.13	12.81	4.24	1.46	178.0
福島県	東北	99.6	12.9	26.1	-1.41	7.02	11.94	4.73	1.64	171.3
茨城県	関東	97.2	13.2	23.8	-0.51	7.78	10.20	4.92	1.79	138.3
栃木県	関東	99.1	13.2	23.2	-0.40	8.02	10.43	5.13	1.85	136.7
群馬県	関東	99.9	13.4	24.9	-0.45	7.49	10.63	4.64	1.77	135.4
埼玉県	関東	88.6	13.0	22.0	0.07	7.90	8.20	5.10	1.86	96.8
千葉県	関東	89.5	12.8	23.2	-0.31	7.89	8.59	5.19	1.86	110.4
東京都	関東	118.4	11.3	21.3	0.26	8.12	8.25	6.75	1.91	144.6
神奈川県	関東	91.2	13.0	21.5	0.10	8.32	7.94	5.68	1.85	98.4
新潟県	中部	100.0	12.5	27.2	-0.64	7.45	11.97	4.35	1.37	148.9
富山県	中部	99.8	12.7	27.6	-0.55	7.28	11.79	4.50	1.43	171.3
石川県	中部	100.2	13.4	25.0	-0.26	8.21	10.51	4.91	1.52	163.0
福井県	中部	100.1	13.7	26.0	-0.50	8.40	11.01	4.55	1.55	158.2
山梨県	中部	99.0	12.9	25.6	-0.58	7.44	11.21	4.60	1.87	158.1
長野県	中部	99.9	13.5	27.4	-0.47	7.81	11.48	4.67	1.66	159.3
岐阜県	中部	96.0	13.7	25.2	-0.48	8.00	10.45	4.62	1.60	127.8
静岡県	中部	99.9	13.4	24.9	-0.37	8.25	10.23	5.17	1.84	131.5
愛知県	中部	101.5	14.2	21.4	0.15	9.14	8.26	5.75	1.82	103.0
三重県	関西	98.1	13.5	25.3	-0.38	8.00	10.44	4.89	1.76	128.6
滋賀県	関西	96.6	14.8	21.6	0.07	9.35	8.64	5.22	1.66	134.8
京都府	関西	101.2	12.6	24.7	-0.27	7.66	9.68	5.02	1.77	145.4
大阪府	関西	104.7	13.0	23.7	-0.06	8.24	9.09	5.43	2.12	107.8
兵庫県	関西	95.7	13.5	24.3	-0.20	8.34	9.63	5.07	1.84	131.6
奈良県	関西	89.9	12.9	25.5	-0.43	7.60	9.82	4.48	1.72	122.7
和歌山県	関西	98.1	12.5	28.4	-0.70	7.51	12.59	4.72	1.98	168.2
鳥取県	中国	100.0	13.2	27.2	-0.51	8.20	12.15	4.74	1.83	171.8
島根県	中国	100.0	12.7	30.0	-0.70	7.90	13.46	4.40	1.43	228.2
岡山県	中国	99.9	13.5	26.2	-0.26	8.41	10.94	4.94	1.82	157.5
広島県	中国	100.3	13.5	25.3	-0.25	8.72	10.28	5.15	1.78	155.4
山口県	中国	99.5	12.6	29.2	-0.76	7.55	12.74	4.58	1.67	206.3
徳島県	四国	99.7	12.2	28.0	-0.51	7.40	12.60	4.34	1.62	175.1
香川県	四国	100.2	13.2	27.1	-0.30	8.25	11.50	4.84	1.91	149.4
愛媛県	四国	100.1	12.8	27.8	-0.56	7.87	12.17	4.51	1.79	156.8
高知県	四国	99.9	11.9	30.1	-0.79	7.00	13.49	4.33	1.87	208.4
福岡県	九州	100.1	13.5	23.3	0.12	9.01	9.63	5.50	2.07	112.3
佐賀県	九州	100.2	14.4	25.3	-0.47	8.83	11.48	4.75	1.74	159.8
長崎県	九州	99.8	13.4	27.0	-0.64	8.33	11.92	4.50	1.74	169.3
熊本県	九州	99.6	13.7	26.5	-0.33	8.85	11.38	4.96	1.87	144.2
大分県	九州	100.0	12.9	27.6	-0.50	8.14	11.86	4.77	1.85	181.5
宮崎県	九州	100.0	13.8	26.7	-0.44	8.75	11.59	5.03	2.15	146.6
鹿児島県	九州	99.9	13.6	27.0	-0.53	8.78	12.59	4.78	1.84	166.9
沖縄県	九州	100.0	17.6	17.7	0.57	12.12	7.54	6.28	2.58	122.1

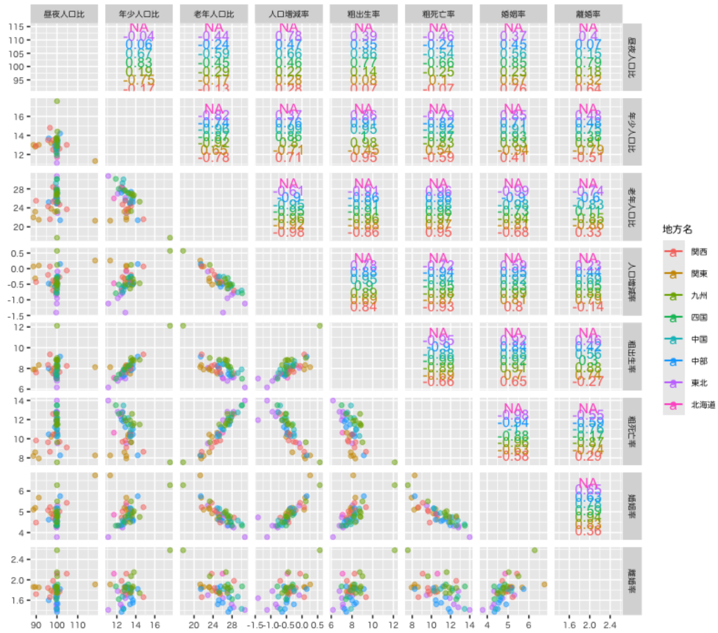

Figure 6: 都道府県別の人口動態

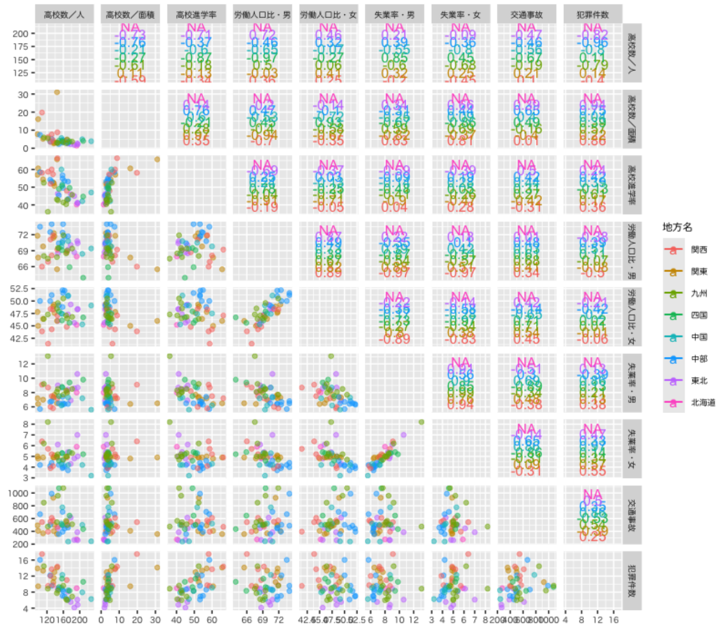

Figure 7: 都道府県別の教育・労働環境

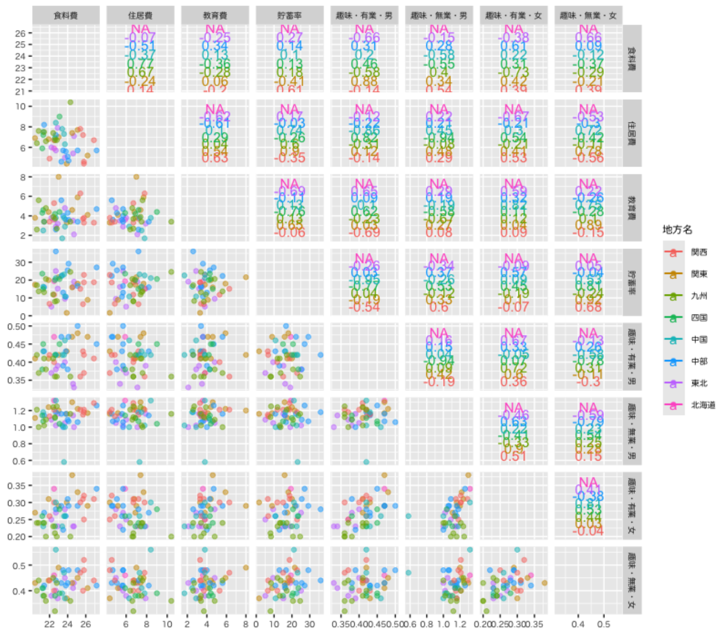

Figure 8: 都道府県別の貯蓄・余暇

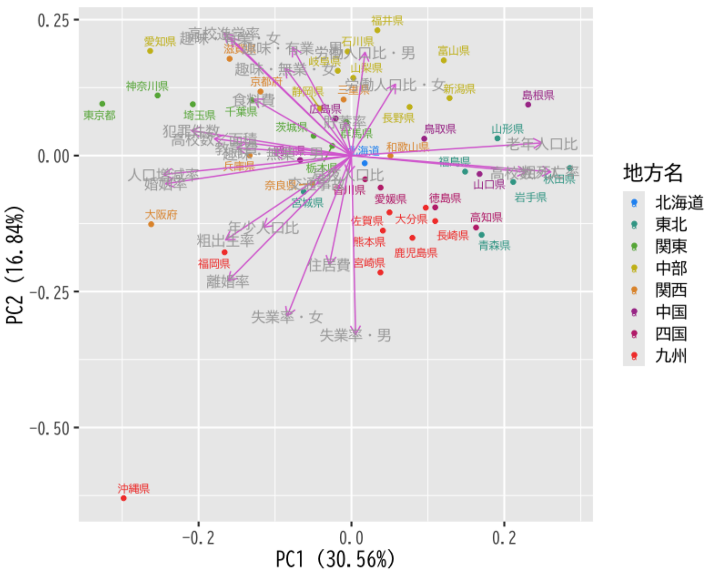

Figure 9: 都道府県別の生活環境の主成分分析

判別分析の考え方

- ある個体が複数のクラスのいずれかに属するとき，その個体の特徴量からどのクラスに属するかを予測するモデルを構築する
- 分析の事例
  - 食道がんを患っている人とそうでない人を，年齢・飲酒量・喫煙度から判別する
  - 銀行が融資判断をするために，企業の財務データから，その企業が期間内に債務不履行となるか否かを予測する

例：乳癌患者の生研検査

V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	V8	V9	class
5	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
5	4	4	5	7	10	3	2	1	benign
3	1	1	1	2	2	3	1	1	benign
6	8	8	1	3	4	3	7	1	benign
4	1	1	3	2	1	3	1	1	benign
8	10	10	8	7	10	9	7	1	malignant
1	1	1	1	2	10	3	1	1	benign
2	1	2	1	2	1	3	1	1	benign
2	1	1	1	2	1	1	1	5	benign
4	2	1	1	2	1	2	1	1	benign
1	1	1	1	1	1	3	1	1	benign
2	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
5	3	3	3	2	3	4	4	1	malignant
1	1	1	1	2	3	3	1	1	benign
8	7	5	10	7	9	5	5	4	malignant

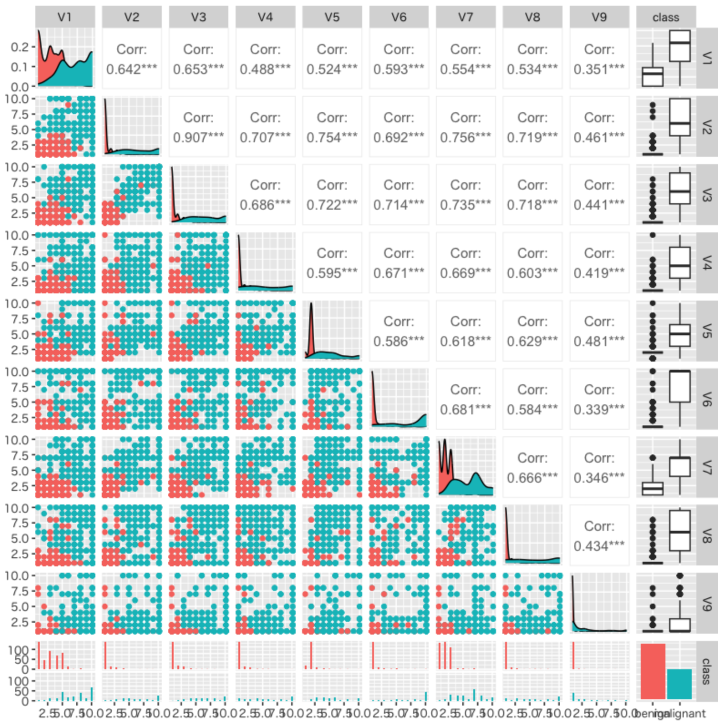

Figure 10: 乳癌患者 (良性・悪性) の生研検査の散布図

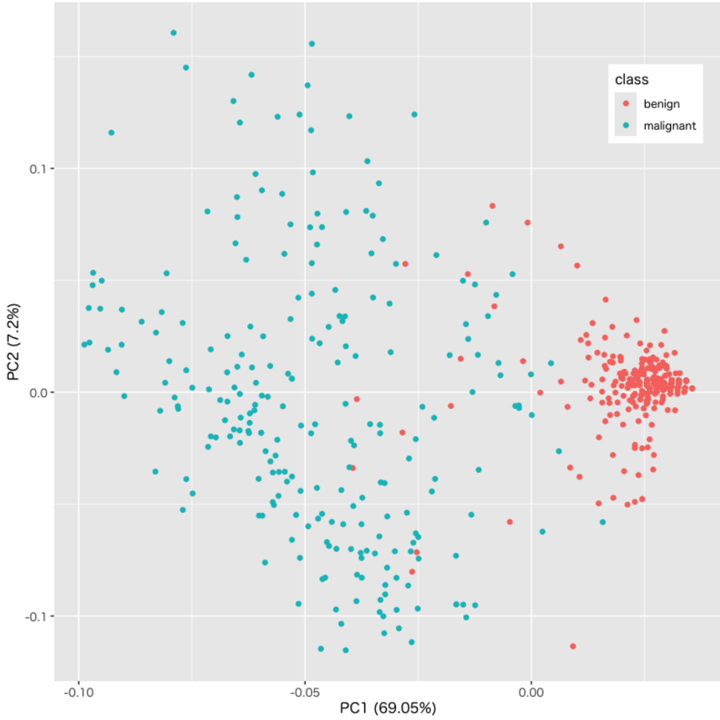

Figure 11: 生研検査の主成分分析

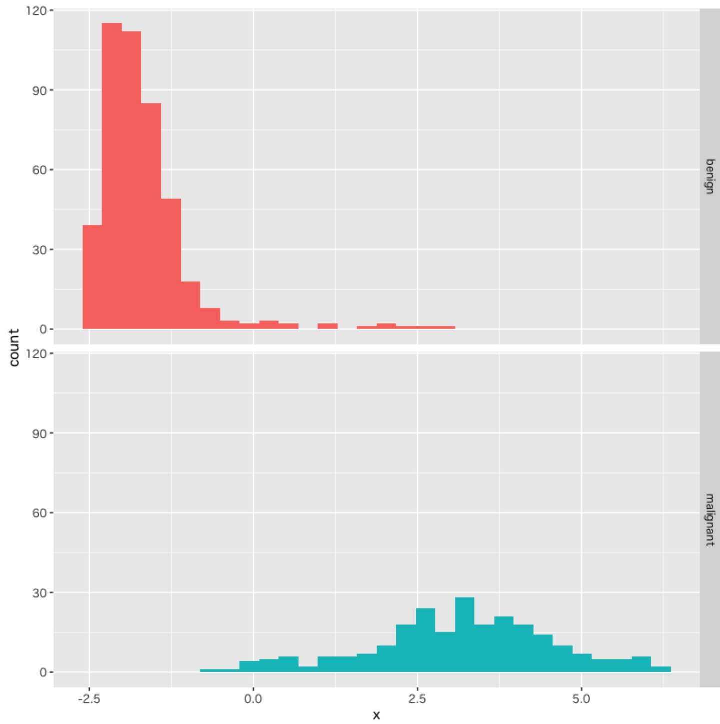

Figure 12: 生研検査による乳癌患者の判別分析

クラスタ分析の考え方

- 特徴量の違いに着目して，妥当な個体のグループ (クラスタ) を構成する
  - 階層的な方法 : 系統樹を作成する
  - 非階層的な方法 : グループの代表値を推定する
- 分析の事例
  - 映画に関するアンケート調査から潜在的なジャンル (グループ) を抽出する
  - 顧客の購買履歴から，嗜好の異なる顧客グループに分類し，グループごとの販売戦略を立てる

例 : 好きなおむすびの具に関するアンケート

県名	梅	鮭	昆布	鰹	明太子	鱈子	ツナ	その他
北海道	13.86	27.94	5.58	5.26	9.26	15.06	11.61	11.39
青森県	14.93	30.79	7.01	2.43	10.36	11.58	11.58	11.28
岩手県	17.91	23.13	5.22	3.35	17.91	10.07	10.44	11.94
宮城県	15.16	29.50	10.00	1.66	14.83	8.83	12.83	7.16
秋田県	10.63	31.38	5.31	3.19	14.89	13.29	10.63	10.63
山形県	16.58	20.27	8.29	1.38	18.89	10.13	12.90	11.52
福島県	12.37	21.99	8.93	3.43	16.49	9.62	19.24	7.90
茨城県	15.42	26.49	7.98	2.54	18.33	11.79	11.79	5.62
栃木県	16.61	27.04	10.70	1.97	16.90	9.29	12.67	4.78
群馬県	14.24	22.53	6.21	1.81	20.20	15.28	13.73	5.95
埼玉県	13.91	27.17	8.03	3.57	19.36	10.17	13.58	4.18
千葉県	14.96	28.49	7.10	3.67	19.07	10.53	10.97	5.17
東京都	14.07	28.03	8.28	3.28	17.80	11.74	11.20	5.56
神奈川県	15.05	28.06	9.61	3.47	16.10	10.67	11.49	5.51
新潟県	21.06	23.03	3.37	1.12	19.66	15.16	7.02	9.55
富山県	19.41	21.84	14.56	4.85	13.59	7.76	11.16	6.79
石川県	23.05	20.00	19.66	4.06	13.89	7.11	10.16	2.03
福井県	20.58	20.58	18.62	4.90	15.68	6.86	9.80	2.94
山梨県	14.11	20.58	9.41	2.35	20.58	12.35	18.23	2.35
長野県	18.64	21.30	9.68	2.66	20.33	13.80	10.16	3.38
岐阜県	16.52	20.55	11.44	4.44	15.88	8.68	15.46	6.99
静岡県	15.96	27.71	11.86	4.98	14.30	9.20	10.75	5.21
愛知県	15.38	27.62	10.87	3.10	14.77	8.23	13.64	6.35
三重県	13.51	29.50	11.26	5.18	14.63	7.88	10.58	7.43
滋賀県	14.96	23.12	12.92	6.12	18.70	7.14	12.24	4.76
京都府	18.99	26.62	12.66	5.68	15.09	8.44	8.92	3.57
大阪府	17.19	25.33	13.71	6.87	14.54	8.22	10.49	3.61
兵庫県	17.93	23.82	13.85	5.74	15.23	7.34	12.04	4.01
奈良県	16.45	24.83	11.61	8.38	14.83	9.35	10.64	3.87
和歌山県	16.22	20.61	15.78	7.89	12.28	9.21	14.47	3.50
鳥取県	18.64	16.10	10.16	2.54	22.03	11.86	13.55	5.08
島根県	20.33	18.64	15.25	6.77	15.25	6.77	12.71	4.23
岡山県	17.30	18.20	12.80	4.49	18.20	9.43	14.38	5.16
広島県	22.03	21.12	17.17	6.38	17.17	6.23	7.44	2.43
山口県	22.22	17.20	16.84	2.86	20.07	5.37	9.67	5.73
徳島県	22.06	20.68	17.24	7.58	13.79	5.51	11.03	2.06
香川県	17.75	22.42	12.61	4.67	13.08	8.41	14.95	6.07
愛媛県	21.72	25.29	11.60	5.95	15.17	5.95	12.50	1.78
高知県	11.72	33.79	17.93	3.44	9.65	10.34	9.65	3.44
福岡県	15.62	22.59	11.73	4.94	22.77	5.11	11.65	5.56
佐賀県	17.98	19.42	5.75	3.59	12.94	9.35	23.74	7.19
長崎県	23.36	22.13	11.88	7.78	16.39	3.68	8.60	6.14
熊本県	21.57	14.72	13.69	7.19	19.52	4.79	12.67	5.82
大分県	14.00	27.53	11.11	4.83	20.77	3.38	9.66	8.69
宮崎県	20.88	22.15	10.75	3.79	18.35	11.39	7.59	5.06
鹿児島県	17.59	24.53	9.25	4.16	19.44	6.01	14.81	4.16
沖縄県	19.59	22.85	7.34	2.04	15.10	4.48	11.42	17.14

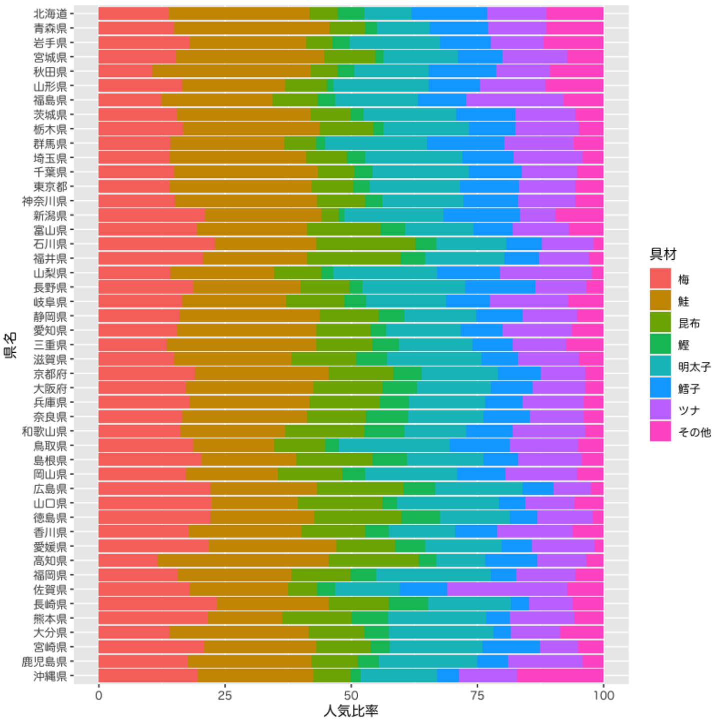

Figure 13: 都道府県別の好きなおむすびの具の集計結果

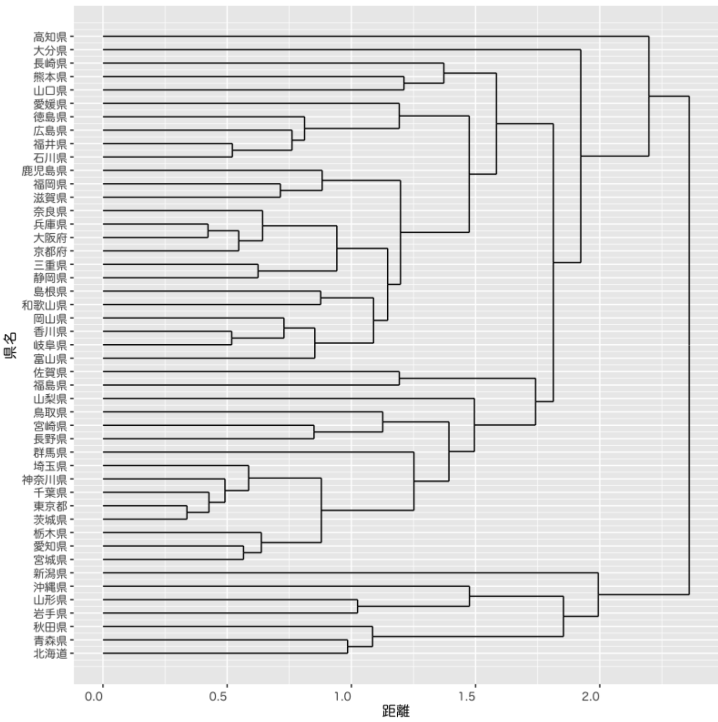

Figure 14: アンケート結果にもとづく県のクラスタ分析

時系列解析の考え方

- 時間とともに変化する現象を記述するために，未来の値を過去の値で近似する式を構成する
  - 自己回帰 (AR モデル) : 過去の影響の記述
  - 移動平均 (MA モデル) : 記憶のある不確定性
- 分析の事例
  - 市町村の過去の年齢別の人口変動から将来の人口比率の推移を予測する
  - 食品・飲料の季節ごとの販売履歴から，将来の需要量を予測して生産計画を立てる

例：米国航空機旅客量の変遷

Year	1 月	2 月	3 月	4 月	5 月	6 月	7 月	8 月	9 月	10 月	11 月	12 月
1949	112	118	132	129	121	135	148	148	136	119	104	118
1950	115	126	141	135	125	149	170	170	158	133	114	140
1951	145	150	178	163	172	178	199	199	184	162	146	166
1952	171	180	193	181	183	218	230	242	209	191	172	194
1953	196	196	236	235	229	243	264	272	237	211	180	201
1954	204	188	235	227	234	264	302	293	259	229	203	229
1955	242	233	267	269	270	315	364	347	312	274	237	278
1956	284	277	317	313	318	374	413	405	355	306	271	306
1957	315	301	356	348	355	422	465	467	404	347	305	336
1958	340	318	362	348	363	435	491	505	404	359	310	337
1959	360	342	406	396	420	472	548	559	463	407	362	405
1960	417	391	419	461	472	535	622	606	508	461	390	432

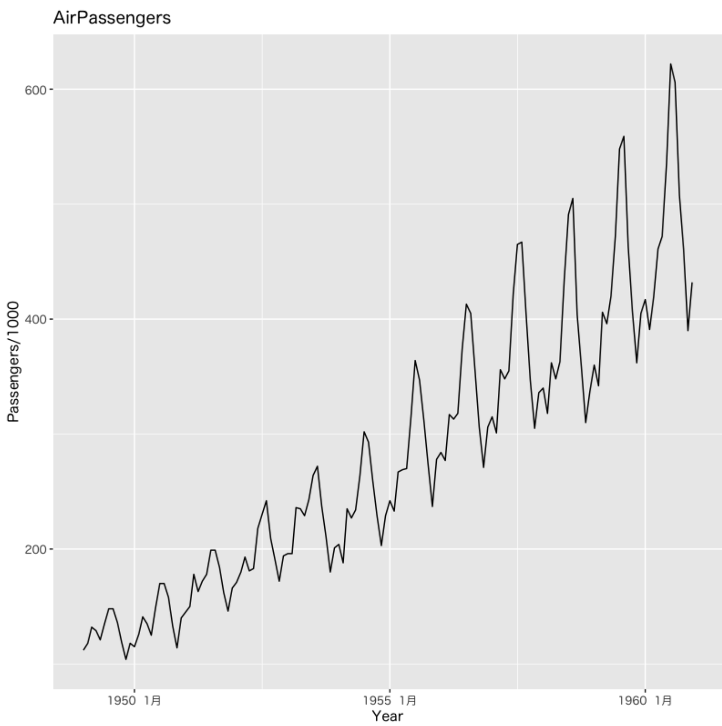

Figure 15: 旅客量の変遷

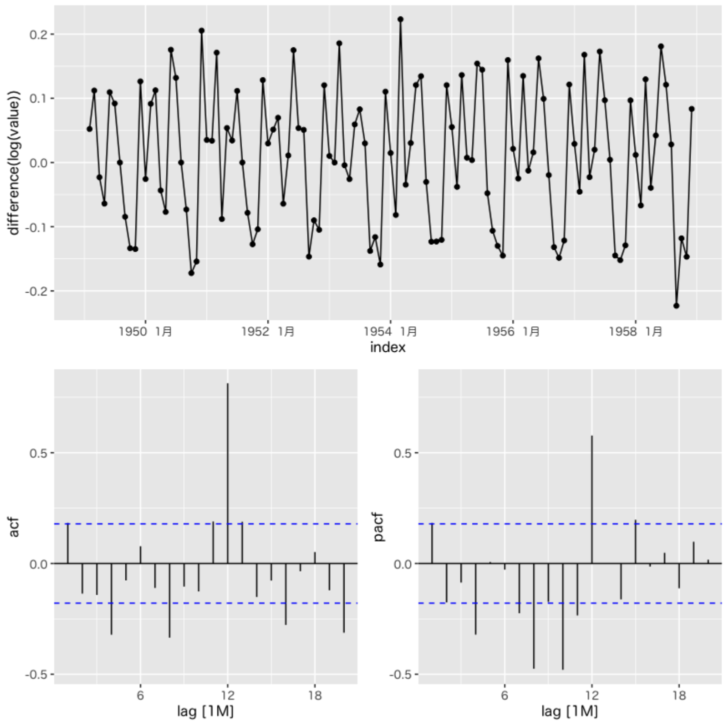

Figure 16: 階差時系列の自己相関分析

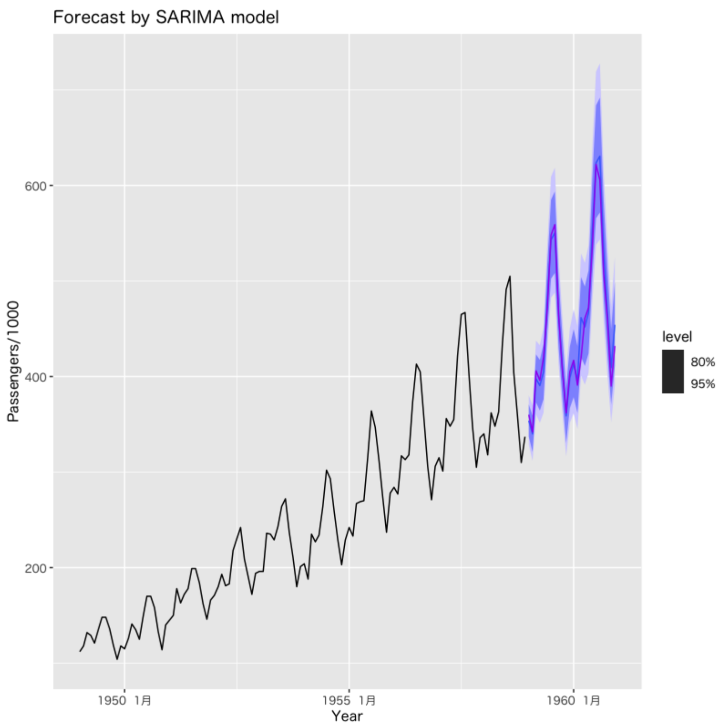

Figure 17: SARIMA モデルによる旅客量の予測

関数の微分

ベクトルによる微分

- d 次元ベクトル

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix} = (a_1, a_2, \ldots, a_d)^\top$$

- ベクトル $\boldsymbol{a}$ による関数 $f(\boldsymbol{a})$ の微分の定義

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{a}} = \left(\frac{\partial f}{\partial a_1}, \frac{\partial f}{\partial a_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial a_d} \right)^\top$$

ベクトルによる微分 (例題)

- 問題

  d 次元ベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ を用いて定義される関数 $f(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{b}$ の $\boldsymbol{a}$ による微分を求めよ.

- 解答例

  各成分で考えると以下のように計算される.

  $$\frac{\partial f}{\partial a_i} = \frac{\partial}{\partial a_i} (a_1 b_1 + \cdots + a_i b_i + \cdots + a_d b_d) = b_i.$$

  したがって

  $$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{a}} = (b_1, b_2, \ldots, b_d)^\top = \boldsymbol{b}$$

  となる.

- 注意

  $$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \left(\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{b} \right) = \boldsymbol{b}$$
  $$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \left(\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{a} \right) = (\boldsymbol{b}^\top)^\top = \boldsymbol{b}$$

  というルールがあることがわかる.

行列による微分

- $d \times d$ 行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1d} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{d1} & a_{d2} & \cdots & a_{dd} \end{pmatrix}$$

- 行列 A による関数 $f(A)$ の微分の定義

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_{11}} & \frac{\partial f}{\partial a_{12}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial a_{1d}} \\ \frac{\partial f}{\partial a_{21}} & \frac{\partial f}{\partial a_{22}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial a_{2d}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial a_{d1}} & \frac{\partial f}{\partial a_{d2}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial a_{dd}} \end{pmatrix}$$

行列による微分 (例題 1)

- 問題

  行列 A と d 次元ベクトル $\boldsymbol{b}$ を用いて定義される関数

  $$f(A) = \boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{b} = \sum_{i,j=1}^{d} b_i a_{ij} b_j$$

  の行列 A による微分を求めよ.

- 解答例

  成分で考えると

  $$\frac{\partial f}{\partial a_{ij}} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \sum_{i',j'=1}^{d} b_{i'} a_{i'j'} b_{j'} = b_i b_j$$

  となるので,

  $$\frac{\partial}{\partial A}\boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 b_1 & b_1 b_2 & \dots & b_1 b_d \\ b_2 b_1 & b_2 b_2 & \dots & b_2 b_d \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ b_d b_1 & b_d b_2 & \dots & b_d b_d \end{pmatrix} = \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^\top$$

  と書くことができる.

行列による微分 (例題 2)

- 問題

  $d \times d$ 行列 A と B を用いて定義される関数

  $$f(A) = \mathrm{tr}AB = \sum_{i,j=1}^{d} a_{ij} b_{ji}$$

  の行列 A による微分を求めよ.

- 解答例

  成分では

  $$\frac{\partial f}{\partial a_{ij}} = b_{ji}$$

  となるので,

  $$\frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}AB = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & \dots & b_{d1} \\ b_{12} & b_{22} & \dots & b_{d2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ b_{1d} & b_{2d} & \dots & b_{dd} \end{pmatrix} = B^\top$$

  と書くことができる.

- 注意 1

  行列のトレースの性質

  $$\mathrm{tr}AB = \mathrm{tr}BA, \quad \mathrm{tr}AB = \mathrm{tr}(AB)^\top = \mathrm{tr}B^\top A^\top$$

  より

  $$\frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}AB = \frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}BA = \frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}A^\top B^\top = \frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}B^\top A^\top = B^\top$$

  となることが容易に確かめられる.

- 注意 2

  $$\boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{b} = \mathrm{tr}\boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{b} = \mathrm{tr}A\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^\top$$

  となることから

  $$\frac{\partial}{\partial A}\boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{b} = \frac{\partial}{\partial A}\mathrm{tr}A\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^\top = \left(\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^\top\right)^\top = \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^\top$$

  となり，2 つの例での計算結果が矛盾しないことが確かめられる.

演習

問題

- 行列 (正方行列に限らない) のトレースに関して

  $$\mathrm{tr}AB = \mathrm{tr}B^\top A^\top = \mathrm{tr}BA = \mathrm{tr}A^\top B^\top$$

  が成り立つことを示せ
- d 次元ベクトル $\boldsymbol{a}$ と $d \times d$ 行列 A で定義される関数 $f(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a}^\top A\boldsymbol{a}$ のベクトル $\boldsymbol{a}$ による微分を求めよ
- 行列 A の行列式を $|A|$ と書くとき行列 A による行列式 $|A|$ の微分を求めよ
  - ヒント : 余因子展開を利用すると容易に求められる

解答例

- $\mathrm{tr}AB$ より，行列 A, B の積は正方行列になることから，A が $n \times m$ 行列とすれば，B は $m \times n$ 行列となる．したがって

  $$\mathrm{tr}AB = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} a_{ij}b_{ji}$$

  と書くことができる．他の式も同様に書けることを確認すればよい.

- 微分における積の法則 (Leibniz 則) を用いればよい.

  $$\begin{aligned}\frac{\partial f(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\boldsymbol{a}^\top A\boldsymbol{b}\ |_{\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\boldsymbol{b}^\top A\boldsymbol{a}\ |_{\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}} \\ &= A\boldsymbol{a} + (\boldsymbol{a}^\top A)^\top \\ &= (A + A^\top)\boldsymbol{a}\end{aligned}$$

- 行列 A の (i, j) 成分に関する余因子を Δ_{ij} とする．行列式 $|A|$ と逆行列 A^{-1} の (i, j) 成分はそれぞれ

$$|A| = \sum_{j=1}^{d} a_{ij}\Delta_{ij}, \ \forall i \qquad (A^{-1})_{ij} = \frac{\Delta_{ji}}{|A|}$$

と書くことができる．したがって

$$\frac{\partial |A|}{\partial A} = |A|(A^{-1})^{\mathsf{T}}$$

となる．

次回の予定

- 確率
  - 確率分布
  - 確率質量関数・確率密度関数
  - 正規分布 (χ^2 分布，t 分布，F 分布)
- 統計
  - 統計量 (標本平均，不偏分散・共分散，相関係数)
  - 最尤法 (尤度関数)
  - Bayes の定理