Differentiate Matrix Formula 線形代数式を微分する

ryamada

2016年12月27日

1 最小二乗法 Least square method

When the number of rows of X is more than the number of columns, the estimates $\hat{\mathbf{a}}$ were obtained by minimizing the least square indicated below.

$$y¥simX¥mathbfa$$

なる関係式があり、Xの行数が列数より多いとき、

$$¥sum_{i=1}^n (y_i - ¥haty_i)^2 = (y - X¥mathbfa)^T¥cdot(y - X¥mathbfa)$$

を最小にするような$\hat{\mathbf{a}}$が、推定値であった。

It can be calculated with matrix calculation. そして

$$¥hat¥mathbfa = (X^T X)^{-1} X^T y$$

で求まるのであった。

2 偏微分方程式 Partial differential equation

When y and X are given, the following formula indicates a function of m variables $(a_1, \ldots, a_m)$.

$$f(\mathbf{a}) = f((a_1, \ldots, a_m)) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = (y - X\mathbf{a})^T \cdot (y - X\mathbf{a})$$

は、y,Xが与えられているとき、m個の変数$(a_1, \ldots, a_m)$の二次式となっているスカラー関数である。

You can minimize the function when the following partial differential equations are satisfied with all a_i.

今、この$f(¥mathbfa)$を最小にする$¥mathbfa = (a_1, \ldots, a_m)$とは、

$$\frac{\partial f(\mathbf{a})}{\partial a_i} = 0$$

がすべてのa_iについて成り立つ場合である。

スカラーを返す$z^T w$は$z^T w = w z^T$であることを使うと

Using $z^T w$ is $z^T w = w z^T$,

$$f(\mathbf{a}) = (y - X\mathbf{a})^T \cdot (y - X\mathbf{a}) = y^T y - 2(X\mathbf{a})^T y + (X\mathbf{a})^T \cdot (X\mathbf{a})$$

さらに変形して

Further transformation gives us,

$$f(\mathbf{a}) = y^T y - 2(X^T y) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a}^T X^T X \mathbf{a}$$

Let’s partially differentiate it with $\mathbf{a}$.

これを$\mathbf{a}$で偏微分する。

第1項は0

The 1st term is 0.

第2項は、各成分に$-2y^T X$の各成分が残る。

The 2nd term will have $-2y^T X$ for each.

第３項は、$X^T X = Z$と置くと

The 3rd term is given as follows with $X^T X = Z$,

$$\mathbf{a}^T Z \mathbf{a} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} a_i a_j Z_{ij}$$

であり、そのa_kによる偏微分は

Now we have,

$$\frac{\partial}{\partial a_k}(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} a_i a_j Z_{ij}) = 2 \sum_{i=1}^{m} Z_{ik} a_i$$

All formulae are summarized in one matrix formula as below.

となり、$k = 1, \ldots, m$について合わせると

$$2Z\mathbf{a}$$

となるから、 結局、

The following appears.

$$0 - 2X^T y + 2Z\mathbf{a} = 2(X^T X)\mathbf{a} - 2X^T y = \mathbf{0}$$

となり、

Eventually we have,

$$(X^T X)\mathbf{a} = X^T y$$

が得られる。

When $X^T X$ has the inverse, we an calculate as follow.

ここから、$X^T X$に逆行列があるときは

$$\mathbf{a} = (X^T X)^{-1} X^T y$$

が得られる。