

第1回、2回

行列

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1c} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2j} & \dots & a_{2c} \\ & & & \vdots & & \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{ic} \\ & & & \vdots & & \\ a_{r1} & a_{r2} & \dots & a_{rj} & \dots & a_{rc} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_i \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_r \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_{(1)}, \mathbf{a}_{(2)}, \dots, \mathbf{a}_{(j)}, \dots, \mathbf{a}_{(c)})$$

行列の転置 $t()$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1c} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2j} & \dots & a_{2c} \\ & & \vdots & & & \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{ic} \\ & & \vdots & & & \\ a_{r1} & a_{r2} & \dots & a_{rj} & \dots & a_{rc} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_i \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_r \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_{(1)}, \mathbf{a}_{(2)}, \dots, \mathbf{a}_{(j)}, \dots, \mathbf{a}_{(c)})$$

$$A' = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{i1} & \dots & a_{r1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{i2} & \dots & a_{r2} \\ & & \vdots & & & \\ a_{1j} & a_{2j} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{rj} \\ & & \vdots & & & \\ a_{1c} & a_{2c} & \dots & a_{ic} & \dots & a_{rc} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_{(1)} \\ \mathbf{a}'_{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_{(j)} \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_{(c)} \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_r)$$

ベクトルとベクトルの掛け算 %*%

$$\begin{aligned} \mathbf{a}'\mathbf{b} &= (a_1, a_2, \dots, a_r) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_r \end{pmatrix} \\ &= a_1 \times b_1 + a_2 \times b_2 + \dots + a_r \times b_r \\ &= \sum_{i=1}^r a_i b_i \end{aligned}$$

行列とベクトルの積

$$\mathbf{A} \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_i \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_a \end{pmatrix} \times \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \mathbf{b} \\ \mathbf{a}'_2 \mathbf{b} \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_i \mathbf{b} \\ \vdots \\ \mathbf{a}'_a \mathbf{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^b a_{1k} b_k \\ \sum_{k=1}^b a_{2k} b_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^b a_{ik} b_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^b a_{rk} b_k \end{pmatrix}$$

行列同士の積

$$\mathbf{A} \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1b} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2b} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ib} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{a1} & a_{a2} & \dots & a_{ab} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{b_{11}} & \boxed{b_{12}} & \dots & \boxed{b_{1j}} & \dots & \boxed{b_{1c}} \\ \boxed{b_{21}} & \boxed{b_{22}} & \dots & \boxed{b_{2j}} & \dots & \boxed{b_{2c}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ \boxed{b_{b1}} & \boxed{b_{b2}} & \dots & \boxed{b_{bj}} & \dots & \boxed{b_{bc}} \end{pmatrix} = \left\{ \sum_{k=1}^b a_{ik} b_{kj} \right\}$$

行列同士の積

$$A = \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \\ a'_a \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad B = (\mathbf{b}_{(1)}, \mathbf{b}_{(2)}, \dots, \mathbf{b}_{(c)})$$

$$\begin{aligned} AB &= A \times (\mathbf{b}_{(1)}, \mathbf{b}_{(2)}, \dots, \mathbf{b}_{(j)}, \dots, \mathbf{b}_{(c)}) \\ &= (\mathbf{A}b_{(1)}, \mathbf{A}b_{(2)}, \dots, \mathbf{A}b_{(j)}, \dots, \mathbf{A}b_{(c)}) \end{aligned}$$

行列同士の積

$$AB = \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \\ a'_i \\ \vdots \\ a'_a \end{pmatrix} \times B$$

$$= \begin{pmatrix} a'_1 B \\ a'_2 B \\ \vdots \\ a'_i B \\ \vdots \\ a'_a B \end{pmatrix}$$

行列同士の積

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1b} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2b} \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ib} \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} a_{a1} & a_{a2} & \dots & a_{ab} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \times \left(\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ \vdots \\ b_{b1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_{12} \\ b_{22} \\ \vdots \\ b_{b2} \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{bj} \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} b_{1c} \\ b_{2c} \\ \vdots \\ b_{bc} \end{pmatrix} \right) = \{ \mathbf{a}'_i \mathbf{b}_{(j)} \} \quad (53)$$

$$\mathbf{AB} = \left(\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{i1} \\ \vdots \\ a_{a1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{i2} \\ \vdots \\ a_{a2} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ \vdots \\ a_{ik} \\ \vdots \\ a_{ak} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} a_{1b} \\ a_{2b} \\ \vdots \\ a_{ib} \\ \vdots \\ a_{ab} \end{pmatrix} \right) \times \begin{pmatrix} (b_{11}, b_{12}, \dots, b_{1q}, \dots, b_{1c}) \\ (b_{21}, b_{22}, \dots, b_{2q}, \dots, b_{2c}) \\ \vdots \\ (b_{k1}, b_{k2}, \dots, b_{kq}, \dots, b_{kc}) \\ \vdots \\ (b_{b1}, b_{b2}, \dots, b_{bq}, \dots, b_{bc}) \end{pmatrix} \\
 = \sum_{k=1}^b \mathbf{a}_{(k)} \mathbf{b}'_k \quad (63, 64)$$

2.2 行列の種類

行列は、その形状や性質により様々な形で分類されることがある。以下にその主なものをあげる。

- 正方行列 (square) 行と列の数が等しい行列 (絵に描くと正方形)
- 対称行列 (symmetric) 正方行列で主対角線 (左上から右下) を境に対応する要素が等しい行列
 $a_{ij} = a_{ji}, i = 1, 2, \dots, r, j = 1, 2, \dots, c, \mathbf{A}' = \mathbf{A}$
- 対角行列 (diagonal) 正方行列で主対角線上の要素 (対角要素) 以外の要素が 0 であるもの
 $a_{ij} = 0, i \neq j$
 なお、本稿では、ある正方行列 \mathbf{A} が対角行列であるということを強調するために、その行列を $\text{diag}(\mathbf{A})$ と書く場合がある。この $\text{diag}()$ は、後節で述べる、非対角要素を 0 と置く演算してである。
- 単位行列 (unit) 対角行列でその対角要素が全て 1 のもの \mathbf{I} と書く
- ゼロ行列 (zero) 正方行列でその要素が全て 0 のもの \mathbf{O} と書く ($\mathbf{A} - \mathbf{A} = \mathbf{O}$ である。)
- 三角行列 (triangular) 正方行列で主対角線より右上もしくは左下の要素が 0 であるもの
 $a_{ij} = 0, i \geq j$ または $i \leq j$ (等号はなくても良い。)
- ダミー行列 (dummy) 要素が 0 と 1 の値しかとらない行列 (デザイン行列)
- 直交行列 (orthogonal) 自分自身の転置との積が単位行列になる行列

したがって、対称行列や対角行列は転置をしても変わらない。 ($\mathbf{A}' = \mathbf{A}$) また、下三角行列 (lower triangular matrix) を転置すると上三角行列 (upper triangular matrix) になる。

- 単位行列

$$AI = IA = A$$

- 積和行列

$$A'A = \left\{ \sum_{k=1}^b a_{ki} a_{kj} \right\}$$

- 分散共分散行列

- 直交行列 (正規直交行列)

$$A'A = AA' = I$$

行列の積の一般形

A を $ra \times ca$ B を $rb \times cb$ の行列とする。

$$C = AB, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{ca} a_{ik} b_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, ra, \quad j = 1, 2, \dots, cb$$

$$\begin{aligned} C^* = BA, \quad c_{ij} &= \sum_{k=1}^{ra} b_{ik} a_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, rb, \quad j = 1, 2, \dots, ca \\ &= \sum_{k=1}^{ra} a_{kj} b_{ik}, \end{aligned}$$

$$C^{**} = A'B, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{ra} a_{ki} b_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, ca, \quad j = 1, 2, \dots, cb$$

$$C^{***} = B'A, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{rb} b_{ki} a_{kj} = \sum_{k=1}^{rb} a_{kj} b_{ki}, \quad i = 1, 2, \dots, cb, \quad j = 1, 2, \dots, ca$$

$$C = A'A, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{ra} a_{ki}a_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, ca, \quad j = 1, 2, \dots, ca$$

$$C = AA', \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{ca} a_{ik}a_{jk}, \quad i = 1, 2, \dots, ra, \quad j = 1, 2, \dots, ra$$

対角行列

$$C = \text{diag}(\mathbf{A})\mathbf{B}, \quad c_{ij} = a_{ii}b_{ij}$$

$$C = \mathbf{A}\text{diag}(\mathbf{B}), \quad c_{ij} = a_{ij}b_{jj}$$

$$C = \text{diag}(\mathbf{A})\text{diag}(\mathbf{B}), \quad c_{ij} = \begin{cases} a_{ii}b_{ii} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

左から対角行列を掛けると行が定数倍
右から対角行列を掛けると列が定数倍

3つの行列の積 結合法則

$$\begin{aligned}
 D &= A(BC), \quad d_{ij} = \sum_{k=1}^{ca} a_{ik}[BC]_{kj} = \sum_{k=1}^{ca} a_{ik} \left(\sum_{\ell=1}^{cb} b_{k\ell} c_{\ell j} \right) \\
 &= \sum_{k=1}^{ca} a_{ik} \sum_{\ell=1}^{cb} b_{k\ell} c_{\ell j} = \sum_{k=1}^{ca} \sum_{\ell=1}^{cb} a_{ik} b_{k\ell} c_{\ell j} \\
 &= (AB)C, \quad d_{ij} = \sum_{k=1}^{cu} [AB]_{ik} c_{kj} = \sum_{k=1}^{cu} \left(\sum_{\ell=1}^{cu} a_{i\ell} b_{\ell k} \right) c_{kj} \\
 &= \sum_{k=1}^{cb} \sum_{\ell=1}^{ca} a_{i\ell} b_{\ell k} c_{kj} = \sum_{\ell=1}^{ca} a_{i\ell} \sum_{k=1}^{cb} b_{\ell k} c_{kj} = \sum_{k=1}^{ca} a_{ik} \sum_{\ell=1}^{cb} b_{k\ell} c_{\ell j} \\
 &= \sum_{k=1}^{ca} \sum_{\ell=1}^{cb} a_{ik} b_{k\ell} c_{\ell j}
 \end{aligned}$$

15

一般系 mat2sum()

$$\begin{aligned}
 F &= ABCDE \\
 f_{ij} &= \sum_{i1=1}^{ca} \sum_{i2=1}^{cb} \sum_{i3=1}^{cc} \sum_{i4=1}^{cd} a_{i,i1} b_{i1,i2} c_{i2,i3} d_{i3,i4} e_{i4,j} \\
 &= \sum_{i1=1}^{ca} a_{i,i1} \sum_{i2=1}^{cb} b_{i1,i2} \sum_{i3=1}^{cc} c_{i2,i3} \sum_{i4=1}^{cd} d_{i3,i4} e_{i4,j}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F &= AB'CD'E \\
 f_{ij} &= \sum_{i1=1}^{ca} \sum_{i2=1}^{rb} \sum_{i3=1}^{cc} \sum_{i4=1}^{rd} a_{i,i1} b_{i2,i1} c_{i2,i3} d_{i4,i3} e_{i4,j} \\
 &= \sum_{i1=1}^{ca} a_{i,i1} \sum_{i2=1}^{rb} b_{i2,i1} \sum_{i3=1}^{cc} c_{i2,i3} \sum_{i4=1}^{rd} d_{i4,i3} e_{i4,j}
 \end{aligned}$$

16

$$\mathbf{F} = \text{diag}(\mathbf{A})\mathbf{B}\mathbf{C}\text{diag}(\mathbf{D})\mathbf{E} = (\text{diag}(\mathbf{A})\mathbf{B})\mathbf{C}(\text{diag}(\mathbf{D})\mathbf{E})$$

$$\begin{aligned} f_{ij} &= \sum_{i1=1}^{ca} \sum_{i2=1}^{cc} (a_{i,i1}b_{i1,i2})c_{i2,i2}e_{i2,j} \\ &= \sum_{i1=1}^{ca} a_{i,i1}b_{i1,i1} \sum_{i2=1}^{cc} c_{i1,i2}d_{i2,i2}e_{i2,j} \end{aligned}$$

$$\mathbf{F} = \text{diag}(\mathbf{A})\mathbf{B}\mathbf{C}\text{diag}(\mathbf{D})\mathbf{E} = (\text{diag}(\mathbf{A})\mathbf{B})(\mathbf{C}\text{diag}(\mathbf{D}))\mathbf{E}$$

$$\begin{aligned} f_{ij} &= \sum_{i1=1}^{ca} \sum_{i2=1}^{cc} (a_{i,i1}b_{i1,i1})(c_{i1,i2}d_{i2,i2})e_{i2,j} \\ &= \sum_{i1=1}^{ca} a_{i,i1}b_{i1,i1} \sum_{i2=1}^{cc} c_{i1,i2}d_{i2,i2}e_{i2,j} \end{aligned}$$

演算規則

行列の演算に関しては以下の関係が成り立つ。

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} + \mathbf{C} = (\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} = \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{B} + (\mathbf{A} + \mathbf{C}) \quad (105)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{A}\mathbf{C} \quad \text{and} \quad (\mathbf{B} + \mathbf{C})\mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{C}\mathbf{A} \quad (106)$$

$$\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C} = (\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C}) \quad (107)$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})' = \mathbf{A}' + \mathbf{B}', \quad (\mathbf{A}\mathbf{B})' = \mathbf{B}'\mathbf{A}', \quad (\mathbf{A}')' = \mathbf{A} \quad (108)$$

$r \times c$ の行列 \mathbf{A} の全ての要素にスカラー量 λ を足したり引いたりする演算は、

$$\mathbf{A} \pm \lambda \mathbf{1}_r \mathbf{1}'_c \quad \text{or} \quad \mathbf{A} \pm \mathbf{1}_r \mathbf{1}'_c \lambda \quad \text{or} \quad \mathbf{A} \pm \mathbf{1}_r \lambda \mathbf{1}'_c \quad (109)$$

と書ける。ただし、 $\mathbf{1}_r \mathbf{1}'_c$ は、その要素が全て 1 である $r \times c$ の行列となる。

行列のトレース $\text{tr}()$

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{j=1}^r a_{jj}$$

$$\text{tr}(\lambda) = \lambda. \quad \text{tr}(\lambda \mathbf{A}) = \lambda \text{tr}(\mathbf{A}), \quad \text{tr}(\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A}')$$

$$\text{tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{A}) + \text{tr}(\mathbf{B})$$

$$\text{tr}(\mathbf{AB}) = \text{tr}(\mathbf{BA}) = \text{tr}(\mathbf{B}'\mathbf{A}') = \text{tr}(\mathbf{A}'\mathbf{B}'),$$

$$\text{tr}(\mathbf{ABC}) = \text{tr}(\mathbf{BCA}) = \text{tr}(\mathbf{CAB})$$

$$= \text{tr}(\mathbf{C}'\mathbf{B}'\mathbf{A}') = \text{tr}(\mathbf{B}'\mathbf{A}'\mathbf{C}') = \text{tr}(\mathbf{A}'\mathbf{C}'\mathbf{B}')$$

$$\mathbf{x}'\mathbf{Ax} = \text{tr}(\mathbf{x}'\mathbf{Ax}) = \text{tr}(\mathbf{Axx}')$$

$$\text{tr}(\mathbf{A}'\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{AA}') = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^c a_{ij}^2$$

19

残差の2乗和

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^r (y_i - \hat{y}_i)^2 = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})'(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

$$= \text{tr}((\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})'(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})) = \text{tr}((\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})')$$

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^c (y_{ij} - \hat{y}_{ij})^2 = \text{tr}((\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})'(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}))$$

$$= \text{tr}((\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})')$$

20







