

第4回

逆行列
行列の列空間
回帰分析
直交化
連立方程式

skip

目次

1	行列の列空間・基底・直交化	1
1.1	行列の列空間	1
1.2	回帰分析と射影子	3
1.2.1	射影子の幾何学的解釈	6
1.3	行列の直交基底	8
1.3.1	グラム・シュミットの直交化 The Gram-Schmidt Orthogonalization	8
1.3.2	列ブロック単位での直交化	11
1.4	ベクトルの線形独立と行列の階数	18
2	連立一次方程式の一般解と一般逆行列	19
2.1	連立一次方程式の一般解	19
2.1.1	回帰分析との関係	20
3	一般逆行列について	22
3.1	一般逆行列	23
3.1.1	一般逆行列の性質	23
3.1.2	一般逆行列の生成	24
3.2	ムーアペンローズ逆行列	26
3.2.1	ムーアペンローズ逆行列の生成	26
3.2.2	ムーアペンローズ逆行列の性質	27
4	行列の固有値と特異値分解	28
4.1	固有値分解	28
4.2	特異値分解	30
4.2.1	特異値分解の存在	30
4.2.2	特異値分解	32

逆行列

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$$

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

$$\lambda^{-1} = \frac{1}{\lambda}, \quad (\lambda\mathbf{A})^{-1} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{A}^{-1}, \quad \mathbf{I}^{-1} = \mathbf{I}$$

$$(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}, \quad (\mathbf{A}')^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})', \quad (\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$

式の同値変形

$$\mathbf{AB} = \mathbf{C}$$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{AB} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}$$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} \mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}$$

$$\mathbf{I} \mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}$$

$$\mathbf{AB} = \mathbf{C}$$

$$\mathbf{AB} \mathbf{B}^{-1} = \mathbf{C} \mathbf{B}^{-1}$$

$$\mathbf{A} \mathbf{BB}^{-1} = \mathbf{C} \mathbf{B}^{-1}$$

$$\mathbf{A} \mathbf{I} = \mathbf{CB}^{-1}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{CB}^{-1}$$

行列の列空間

$n \times q$ の行列 X の各列を

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_q]$$

行列 X の列空間

$$b = \sum_{j=1}^q (\beta_j \times x_j) = X\beta$$

$$b \in C(X)$$

正則な行列 A X の列空間と $Z=XA$ の列空間は、 A が正則の場合等しくなる。

$$Z = XA$$

$$b = X\beta = XAA^{-1}\beta = (XA)(A^{-1}\beta) = Z\beta^*$$

5

回帰分析

$$y = \hat{y} + \varepsilon$$

$$\hat{y} = X\beta$$

モデルの値(予測値)

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1q} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nq} \end{bmatrix} \times \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_q \end{pmatrix}$$

6

- 残差の2乗和 当てはまりの悪さの指標

$$\begin{aligned}
 \text{RSS} &= \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \text{tr} \left[(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \right] \\
 &= \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 \\
 &= (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})' (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \\
 &= \text{tr} ((\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})' (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})) = \text{tr} ((\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})')
 \end{aligned}$$

最小2乗解

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}$$

7

最小2乗解

残差の2乗和 RSS を回帰係数 $\boldsymbol{\beta}$ の要素で偏微分すると

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \text{RSS}}{\partial \beta_k} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \times \frac{\partial (y_i - \hat{y}_i)}{\partial \beta_k} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \times \frac{\partial \sum_{j=0}^q x_{ij} \beta_j}{\partial \beta_k} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \times x_{ik} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \sum_{j=0}^q x_{ij} \beta_j) \times x_{ik} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n y_i x_{ik} - 2 \sum_{i=1}^n (\sum_{j=0}^q x_{ij} \beta_j) x_{ik} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n y_i x_{ik} - 2 \sum_{i=1}^n (\sum_{j=0}^q x_{ij} x_{ik} \beta_j) \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n y_i x_{ik} - 2 \sum_{j=0}^q (\sum_{i=1}^n x_{ij} x_{ik}) \beta_j
 \end{aligned}$$

8

モデルの値

- モデルの値（予測値）

$$\begin{aligned}\hat{y} &= X\hat{\beta} \\ &= X(X'X)^{-1}X'y \\ &= P(X)y\end{aligned}$$

X の列空間への射影子

$$P(X) = X(X'X)^{-1}X'$$

$$P(X) = P(X)', P(X)^2 = P(X)$$

$$P(X)X = X$$

任意のベクトル b に $P(X)$ を適用したものを

$$\begin{aligned}P(X)b &= X(X'X)^{-1}X'b \\ \beta &= (X'X)^{-1}X'b = X\beta\end{aligned}$$

$P(X)b$ は X の列空間に入っている

9

残差ベクトル

回帰分析に於ける残差ベクトル

$$y - \hat{y} = y - P(X)y = (I - P(X))y = Q(X)y$$

$$Q(X) = I - P(X) = I - X(X'X)^{-1}X'$$

$$P(X)Q(X) = Q(X)P(X) = O$$

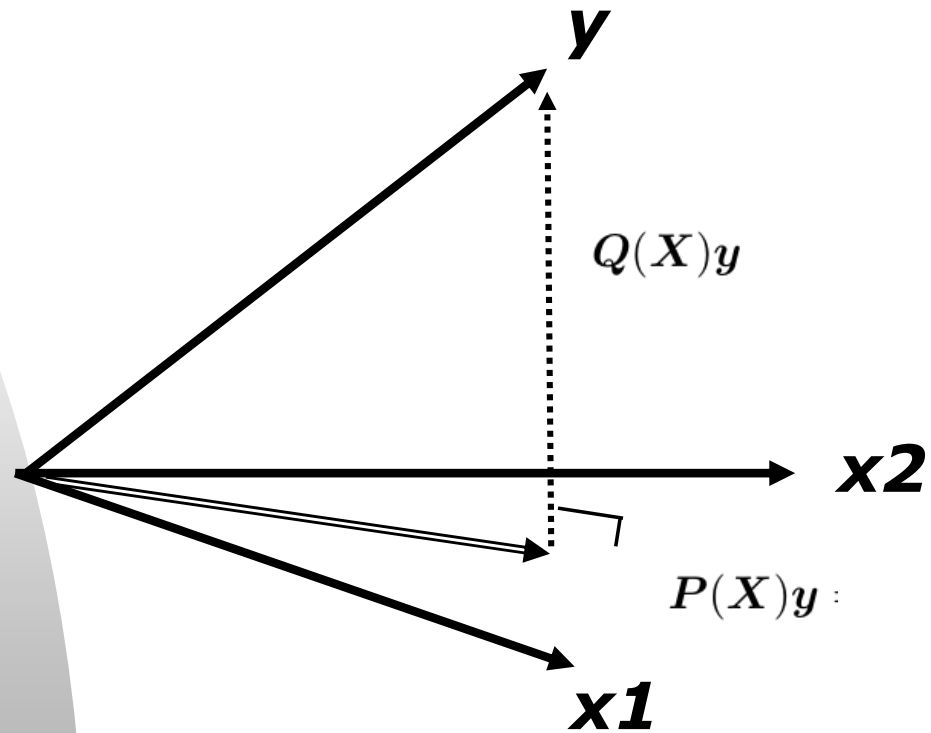
$$Q(X)X = Q(X)P(X)X = O$$

$$P(X) + Q(X) = I$$

最小2乗法を用いて推定された回帰係数 $\hat{\beta}$ を用いて計算された残差ベクトルは、説明変数行列 X ならびに基準変数 y の予測値 \hat{y} と直交する

$$y = (P(X) + Q(X))y = P(X)y + Q(X)y$$

回帰分析



11

説明変数の分割

$$X = [X_1, X_2]$$

以下の回帰モデル

$$y = X_1 b_1 + \varepsilon_1, \quad y = X_2 b_2 + \varepsilon_2$$

$$y = X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2 + \varepsilon$$

$$y = X_1 \gamma_1 + Q(X_1) X_2 \gamma_2 + \varepsilon$$

$$y = Q(X_2) X_1 \lambda_1 + X_2 \lambda_2 + \varepsilon$$

$$y = Q(X_2) X_1 \delta_1 + \varepsilon_3, \quad y = Q(X_1) X_2 \delta_2 + \varepsilon_4$$

$$y = Q(X_2) X_1 \kappa_1 + Q(X_1) X_2 \kappa_2 + \varepsilon$$

におけるパラメタ間には

$$\beta_1 = \delta_1 = \lambda_1$$

$$\beta_2 = \delta_2 = \gamma_2$$

$$b_1 = \gamma_1, \quad b_2 = \lambda_2$$

という関係がある。

12

行列の直交基底、QR 分解、グラムシュミット

$$X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_q]$$

列ベクトルの添え字に括弧 () を付けない

- 第 1 列はそのまま

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{x}_1$$

- 第 2 列は \mathbf{x}_2 を \mathbf{x}_1 へ回帰した残差とする。

$$\mathbf{u}_2 = Q(\mathbf{x}_1) \mathbf{x}_2$$

- 第 3 列は \mathbf{x}_3 を \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 へ回帰した残差とする。

$$\mathbf{u}_3 = Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \mathbf{x}_3$$

\vdots

- 第 j 列は \mathbf{x}_j を $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{j-1}$ へ回帰した残差とする。

$$\mathbf{u}_j = Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{j-1}) \mathbf{x}_j$$

\vdots

- 第 q 列は \mathbf{x}_q を $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{q-1}$ へ回帰した残差とする。

$$\mathbf{u}_q = Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{q-1}) \mathbf{x}_q$$

13

グラムシュミット

$$U = X A$$

$$[\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_4, \dots, \mathbf{u}_q] = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \dots, \mathbf{x}_q] \times \begin{bmatrix} 1 & -\beta_{12} & -\beta_{13} & -\beta_{14} & \cdots & -\beta_{1q} \\ 0 & 1 & -\beta_{23} & -\beta_{24} & \cdots & -\beta_{2q} \\ 0 & 0 & 1 & -\beta_{34} & \cdots & -\beta_{3q} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\beta_j = [\beta_{1j}, \beta_{2j}, \dots, \beta_{j-1,j}]$$

\mathbf{x}_j を $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{j-1}$ へ回帰したときの回帰係数ベクトル

14

QR 分解

- U の基準化 長さを 1 に

$$Q = X A \text{diag} (A' X' X A)^{-\frac{1}{2}} = X A^*$$

$$U = X A$$

$$X = Q A^{*-1} = Q R$$

$$R = A^{*-1} = \text{diag} (A' X' X A)^{\frac{1}{2}} A^{-1}$$

Q は直交行列、**R** は上三角行列

QR by GS

表 1: グラム・シュミットの直交化：列フルランクの場合

X						U					
	X1	X2	X3	X4	X5		U1	U2	U3	U4	U5
1)	7	3	1	6	9	1)	7	-3.560	-2.280	-0.683	4.687
2)	6	9	5	9	2	2)	6	3.377	-1.014	1.460	-0.561
3)	6	9	7	9	0	3)	6	3.377	0.986	2.926	-3.710
4)	3	6	5	7	8	4)	3	3.189	1.246	3.931	5.900
5)	5	9	8	0	2	5)	5	4.315	2.241	-4.605	-0.447
6)	7	1	7	1	8	6)	7	-5.560	4.717	0.220	-0.371
7)	7	8	4	5	4	7)	7	1.440	-1.771	-3.255	1.207
8)	7	4	1	9	0	8)	7	-2.560	-2.778	1.563	-4.072

R						A					
	U1	U2	U3	U4	U5		U1	U2	U3	U4	U5
U1	1	0.937	0.722	0.914	0.639	X1	1	-0.937	-0.255	-0.736	-0.692
U2	0	1	0.498	0.389	-0.288	X2	0	1	-0.498	-0.754	0.623
U3	0	0	1	-0.733	0.481	X3	0	0	1	0.733	-0.575
U4	0	0	0	1	0.127	X4	0	0	0	1	-0.127
U5	0	0	0	0	1	X5	0	0	0	0	1

表 2: グラム・シュミットの直交化：列フルランクではない場合

X						U					
	X1	X2	X3	X4	X5		U1	U2	U3	U4	U5
1)	7	14	1	8	9	1)	7	0	-4.053	0	4.955
2)	6	12	5	11	2	2)	6	0	0.669	0	-1.905
3)	6	12	7	13	0	3)	6	0	2.669	0	-4.117
4)	3	6	5	8	8	4)	3	0	2.834	0	5.783
5)	5	10	8	13	2	5)	5	0	4.391	0	-1.660
6)	7	14	7	14	8	6)	7	0	1.947	0	3.321
7)	7	14	4	11	4	7)	7	0	-1.053	0	-0.362
8)	7	14	1	8	0	8)	7	0	-4.053	0	-4.045

R						A					
	X1	X2	X3	X4	X5		U1	U2	U3	U4	U5
U1	1	2	0.722	1.722	0.639	X1	1	0	-0.722	0	-0.563
U2	0	0	0	0	0	X2	0	0	0	0	0
U3	0	0	1	1	0.106	X3	0	0	1	0	-0.106
U4	0	0	0	0	0	X4	0	0	0	0	0
U5	0	0	0	0	1	X5	0	0	0	0	1

行列の階数

なお、上記の手続きを行う際に、ある時点で回帰の残差 u_j が 0 となった場合、それは x_j が $[x_1, x_2, \dots, x_{j-1}]$ の列空間に含まれることを示しているが、この場合には、以降の回帰係数の計算には、 x_j を省いて行い、 $\beta_{i,j}, i = 1, 2, \dots$ と $\beta_{j,i}, i = j+1, j+2, \dots$ を全て 0 として先に進んで行く。すると、最終的にいくつかの全ての要素が 0 である列を持つ U 行列と全ての要素が 0 である行を持つ A 行列が生成されるが、この、 U 行列の中の全てが 0 でない列の数を、行列の**階数 (rank)** と呼び $\text{rank}(X)$ と記す。また、行列の階数とその列数に等しい場合を**列フルランク**、行数に等しい場合を**行フルランク**と呼ぶ。行フルランクな行列の各列は互いに**線型独立**である。そして、 $u_j = 0$ に対応した x_j は、 $[x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_p]$ に**線形従属**であるという。

行列の階数

- A のサイズが $a \times b$ の場合、 $\text{rank}(A) \leq \min(a, b)$
- $\text{rank}(A) = \text{rank}(A') = \text{rank}(A'A) = \text{rank}(AA')$
- $\text{rank}(AB) \leq \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B))$
- B のサイズが $b \times r$, $r \leq b$ で $\text{rank}(B) = r$ の場合 $\text{rank}(AB) = r$
- P と Q が正則の場合、 $\text{rank}(PAQ) = \text{rank}(A)$
- A が特異の場合、行列式の値は 0 となる。
- A が対称の場合 $\text{rank}(A) = A$ の 0 でない固有値の数

19

連立方程式の解

A を $a \times b$ の係数行列、 c を $b \times 1$ のベクトル

$$Ax = c$$

解が存在する条件

$$\text{rank}(A) = \text{rank}([A, c]) \quad c \text{ は } A \text{ の列空間の中にある}$$

係数行列 A が正則

$$x = A^{-1}c$$

A 行列が特異行列の場合

$$x^* = A^-c + (I - A^-A)y \quad \text{任意のベクトル } y$$

A^- は A の一般逆行列

20

一般逆行列

$$g1) \quad A = AA^{-1}A$$

$$g2) \quad A^{-1} = A^{-1}AA^{-1}$$

$$g3) \quad AA^{-1} = (AA^{-1})'$$

$$g4) \quad A^{-1}A = (A^{-1}A)'$$

$$A(I - A^{-1}A) = A - AA^{-1}A = A - A = O$$

$$x^* = A^{-1}c + (I - A^{-1}A)y$$

$$\begin{aligned} Ax^* &= A(A^{-1}c + (I - A^{-1}A)y) = AA^{-1}c + A(I - A^{-1}A)y \\ &= AA^{-1}c = AA^{-1}Az = Az = c \end{aligned}$$

$$c = Az \quad c \text{ は } A \text{ の列空間の中にある}$$