線型推測論

第01回 ガイダンスと講義の準備

2018/4/12

統計数理研究所

長島 健悟

本講義のねらい

- 一般線型モデル (General Linear Models) における推測の理解
  - 線型モデル (t検定・単回帰・重回帰・分散分析・共分散分析) の統一表現
  - ガウス-マルコフの定理
  - 一般化最小二乗推定量
  - 線型仮説の検定
  - 最尤推定量

本講義の参考図書

- 線型モデル
  - **Rencher AC, Schaalje GB. *Linear Models in Statistics, 2nd ed*. Wiley, 2008.**
  - Ravishanker N, Dey DK. *A First Course in Linear Model Theory*. Chapman & Hall/CRC, 2001.
  - Monahan JF. *A Primer on Linear Models*. Chapman & Hall/CRC, 2008.
- 線型代数
  - Harville DA. *Matrix Algebra from a Statiscian's Perspective*. Springer, 1997.

一般線型モデル

統計モデルとは？

- モデル (Model): 模型
  - 実物の縮小, 問題を単純化したもの, ひな形, お手本
  - プラモデル, ファッションモデル
- 統計モデル
  - 統計学的推測のために, すなわち, データを説明するための近似式

統計モデルとは？

- なぜ近似式で表現するのか？
  - 客観的であるから
  - 定量的であるから

一般線型モデル

- 一般線型モデル (General Linear Models)
  - 以下の形式で表わされるモデルを指す

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

  - $\mathbf{Y}$: $n \times 1$次元の観測値確率変数ベクトル
  - $\mathbf{X}$: $n \times p$次元の定数行列
  - $\boldsymbol{\beta}$: $p \times 1$次元の未知パラメータベクトル
  - $\boldsymbol{\epsilon}$: $n \times 1$次元の平均が0の誤差確率変数ベクトル

講義のゴールと達成目標

- 本講義のゴール
  - 一般線型モデルの一般解法の理解
- 御利益
  - 一般線型モデルを使いこなせるようになる
  - 一般線型モデル以外のモデルを理解する際の助けとなる⇒一般化線型モデル, 一般化線型混合モデル, Cox回帰モデル

講義のゴールと達成目標

- 理解できるとよい点
  - 一般線型モデルの解法が複数あるという点(一般線型モデルだけではないが)
- 注意点
  - 本講義では計算と理解を優先して数学的な議論は極力省いた
  - より厳密・発展的な議論のためには数学が必須になる
  - 本講義は頻度論の理論をベースに想定

線形と線型

- 世間的には特に区別されていないが本講義では「線型」を使う
- 根拠
  - 線形：Linear shape
  - 線型：Linear type

線型代数の復習

線型代数の復習

- 一般線型モデルの推測では線型代数の定理・概念を多用します
- 線型代数の基本が分からないと先に進めないため復習します
- 行列演算がしっかり頭に入っていないと教科書も論文も読めない

ベクトル・行列の表記法と注意点

- スカラーは斜体で書きます; 例：a_1, θ, β_j
- ベクトルは**小文字太字**の**立体**で書きます
  - p次元ベクトル： $\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix}$
  - 単にベクトルというときは列ベクトル
  - 行ベクトルは $\mathbf{a}' = (a_1 \quad a_2 \quad \cdots \quad a_p)$
    - 転置は ′ とします

ベクトル・行列の表記法と注意点

- 行列は**大文字太字**の**立体**で書きます
  - $n \times p$次元行列：
$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \{x_{ij}\},$$
$$1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p.$$
  - p次元ベクトル$= p \times 1$次元ベクトル

ベクトル・行列の表記法と注意点

- 単位行列は $\mathbf{I}$ もしくは $\mathbf{I}_n$ (添え字は次元)

  とします：$\mathbf{I}_n = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$ $(n \times n$次元)

- 対角行列は $\mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n)$ とします

$$\mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n) = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

ベクトル・行列の表記法と注意点

- ゼロベクトル、ゼロ行列

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{O} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

- 逆行列は $^{-1}$、一般化逆行列は $^{-}$
- 本講義ではベクトル・行列の要素は全て実数とします ($\in \mathbb{R}$)

ベクトル・行列の表記法と注意点

- 転置 $\mathbf{X}'$ の定義

$$\mathbf{X}' = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1p} & x_{2p} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \{x_{ji}\}.$$

- 定理1-1
  - $(\mathbf{A}')' = \mathbf{A}$

行列の和と差

- 行列の和(差)は同じ次元の行列同士だけで定義され、対応する要素同士の和(差)となる
- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$
- $\mathbf{A} + \mathbf{B} = ?$

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{pmatrix}$$
$$= \{a_{ij} + b_{ij}\}$$

行列の和と差

- 行列の次元が同じでないと和(差)をとることはできない、次元を意識するようにすべし
- 定理1-2
  - $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$
  - $(\mathbf{A} + \mathbf{B})' = \mathbf{A}' + \mathbf{B}'$

練習問題

- $\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$, $\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}$
  - $\mathbf{A}_2 + \mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 9 & 8 \\ 5 & 10 \end{pmatrix}$
- $\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} 13 & 4 \\ 1 & 8 \end{pmatrix}$, $\mathbf{B}_3 = \begin{pmatrix} -5 & 4 \\ 7 & 0 \end{pmatrix}$
  - $\mathbf{A}_3 - \mathbf{B}_3 = \begin{pmatrix} 18 & 0 \\ -6 & 8 \end{pmatrix}$

行列のスカラー倍

- 行列をスカラー倍すると、各要素をスカラー倍したものになる
- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$
- $c\mathbf{A} = ?$
- $c\mathbf{A} = \begin{pmatrix} ca_{11} & ca_{12} \\ ca_{21} & ca_{22} \end{pmatrix} = \{ca_{ij}\}$

行列の積

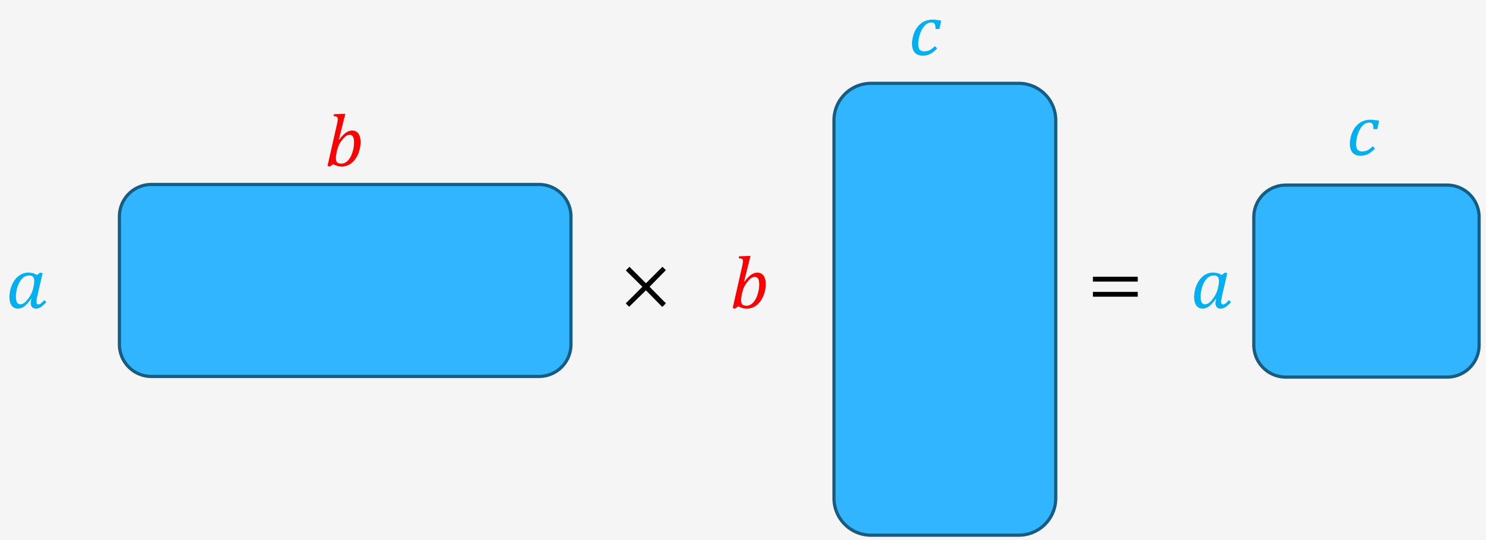
- 行列の積$\mathbf{AB}$は、$\mathbf{A}$の列数と$\mathbf{B}$の行数が等しい場合にのみ定義される
- 一般に、$\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$
- $\mathbf{AB} = ?$

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix}$$

$$= \left\{ \sum_k a_{ik} b_{kj} \right\}$$

行列の積

- 行列の次元が合っていないと積をとれない：次を瞬時に処理できるように
  - ($a \times b$次元)× ($b \times c$次元)=($a \times c$次元)
  - ($a \times b$次元)× ($c \times b$次元)：定義できず



練習問題

- 次の各行列の積は何次元？
  - (4×6次元)×(6×1次元)=(4 × 1 次元)
  - (2×1次元)×(2×1次元)=(定義不能)
  - (6×6次元)×(6×9次元)=(6 × 9 次元)
- $\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}$
  - $\mathbf{A}_2\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 28 & 44 \\ 16 & 27 \end{pmatrix}$

行列の積

- 単位行列との積：$\mathbf{IA} = \mathbf{AI} = \mathbf{A}$
- 分配則は成立する
  - $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$
  - $(\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} - \mathbf{BC}$
- 練習問題 (ヒント：上式を用いる)
  $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{C} - \mathbf{D}) = (\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{C} - (\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{D}$
  $= \mathbf{AC} - \mathbf{BC} - \mathbf{AD} + \mathbf{BD}$

覚えておくと便利

- 内積 (転置が間に挟まる)
  - $\mathbf{a}'\mathbf{a} = a_1 a_1 + a_2 a_2 + \cdots + a_p a_p$
  - $(1 \times p$次元$)\times(p \times 1$次元$)=(1 \times 1$次元$)$
- 結果が正方行列になるベクトル積
  - $\mathbf{a}\mathbf{a}' = \begin{pmatrix} a_1^2 & \cdots & a_1 a_p \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_p a_1 & \cdots & a_p^2 \end{pmatrix}$
  - $(p \times 1$次元$)\times(1 \times p$次元$)=(p \times p$次元$)$

覚えておくと便利

- 二次形式
  - $\mathbf{x}$ ($p \times 1$次元), $\mathbf{A}$ ($p \times p$次元)
  - $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = \sum_i \sum_j a_{ij} x_i x_j$

覚えておくと便利

- 定理1-3
  - $\mathbf{a}'\mathbf{b} = \mathbf{b}'\mathbf{a}$
- 定理1-4
  - $(\mathbf{AB})' = \mathbf{B}'\mathbf{A}'$
- 系1-1
  - $(\mathbf{ABC})' = \mathbf{C}'\mathbf{B}'\mathbf{A}'$

逆行列の性質

- 通常の逆行列はフルランクの正方行列 (正則行列) でしか定義されない
  - $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$
  - $\left(\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1} = \mathbf{A}$

練習問題

- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 7 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}, \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.6 & -0.7 \\ -0.2 & 0.4 \end{pmatrix}$
  - $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = ?$

$$\begin{pmatrix} 4 & 7 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.6 & -0.7 \\ -0.2 & 0.4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2.4 - 1.4 & -2.8 + 2.8 \\ 1.2 - 1.2 & -1.4 + 2.4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

行列のスカラー微分

- 行列の各要素を微分したもの
- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$
- a_{ij}, b_{ij}がθで微分可能とすると
- $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial \theta} & \frac{\partial a_{12}}{\partial \theta} \\ \frac{\partial a_{21}}{\partial \theta} & \frac{\partial a_{22}}{\partial \theta} \end{pmatrix}$と書ける

行列積のスカラー微分

- 行列積$\mathbf{AB}$のスカラーθによる微分を考える
- $\frac{\partial\mathbf{AB}}{\partial\theta}=\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial\theta}\mathbf{B}+\mathbf{A}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial\theta}$
- これについては積の微分の公式をそのまま適用できる

応用：逆行列の微分

- $\mathbf{A}$は正方行列で逆行列が存在し, θで微分可能とする
  - $\dfrac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial \theta} =?$

$$\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial \theta} = -\mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \theta} \mathbf{A}^{-1}$$

スカラーのベクトル微分

- スカラーをベクトルの各要素で微分して微分するベクトルと同じ形に並べたもの
- $$\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial x_1} \\ \frac{\partial Q}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial Q}{\partial x_p} \end{pmatrix}$$

次元はこのベクトルと同じ！

練習問題

- $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)', \mathbf{c}$ も同次元のベクトル
  - $\frac{\partial(x_1+x_2+x_3+x_4)}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
  - $\frac{\partial \mathbf{x}'\mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{c}$

スカラーのベクトル微分の応用

- $\dfrac{\partial \mathbf{x}'\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}$
  - $\dfrac{\partial x^2}{\partial x} = 2x$の類推
  - $\dfrac{\partial \mathbf{x}'\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} \Rightarrow \dfrac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{x} + \mathbf{x}'\dfrac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}$ (積の微分の公式)
    - $\dfrac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{x} = \mathbf{x}$
    - $\cancel{\mathbf{x}'\dfrac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}} \Rightarrow \dfrac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{x} = \mathbf{x}$

スカラーは転置
しても不変
定理1-4 $(\mathbf{x}'\mathbf{x})' = \mathbf{x}'\mathbf{x}$

$\dfrac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}}, \dfrac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}'}$
この形の時だけ
微分できる

ベクトルのベクトル微分

- これは・・・
  - $\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{I}$ になる
  - $\frac{\partial (x_1, x_2, x_3)}{\partial \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x_1} & \frac{\partial x_2}{\partial x_1} & \frac{\partial x_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_2} & \frac{\partial x_2}{\partial x_2} & \frac{\partial x_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_3} & \frac{\partial x_2}{\partial x_3} & \frac{\partial x_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}$
  - $\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x} = \mathbf{I}\mathbf{x} = \mathbf{x}$

ベクトルのベクトル微分の一般型

- 計算結果がベクトルになってさえいれば, ベクトルのベクトル微分は定義可能
- $\mathbf{A}$: $a \times b$次元行列, $\mathbf{B}$: $b \times c$次元行列, $\mathbf{x}$: $c \times 1$次元ベクトル

$$\frac{\partial \mathbf{ABx}}{\partial \mathbf{x}'} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{ABx}}{\partial x_1} & \frac{\partial \mathbf{ABx}}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{ABx}}{\partial x_c} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{ABx}$は$a \times 1$次元行列で, $\mathbf{x}'$は$1 \times c$次元ベクトルなので, $a \times c$次元行列になる

まとめ

- 行列とベクトルの微分は定義されるケースが限られる
  - スカラーはスカラーまたはベクトルによる微分が定義できる
  - ベクトルはスカラーまたはベクトルによる微分が定義できる
  - 行列はスカラーによる微分だけ定義できる

トレース

- トレースは正方行列において対角要素の和で定義される
  - $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \{a_{ij}\}$
  - $\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = a_{11} + a_{22} = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$

トレースの性質

- 行列$\mathbf{A}$と$\mathbf{B}$は正方行列とする
- 行列$\mathbf{C}$は$n \times p$、$\mathbf{D}$は$p \times n$とする
- 定理1-5
  - $\mathrm{tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \mathrm{tr}(\mathbf{A}) + \mathrm{tr}(\mathbf{B})$
- 定理1-6
  - $\mathrm{tr}(\mathbf{CD}) = \mathrm{tr}(\mathbf{DC})$