先週までの「データ解析」

Prologue: データを読み解くとは何なのか
(多変量解析とデータサイエンスと統計学とパターン認識と機械学習とデータマイニング)

DAY-1 6/16 (01)(02) **単回帰: 点群への直線当てはめを”真剣に”考える**
(見えない世界へようこそ)

今日の内容

DAY-2 6/23 (03)(04) **重回帰と線形代数: 回帰の行列計算とその意味**
(データの計算とデータの解釈)

$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$ の意味を考える

ある $m \times n$ 行列 $\boldsymbol{X}$ に対して

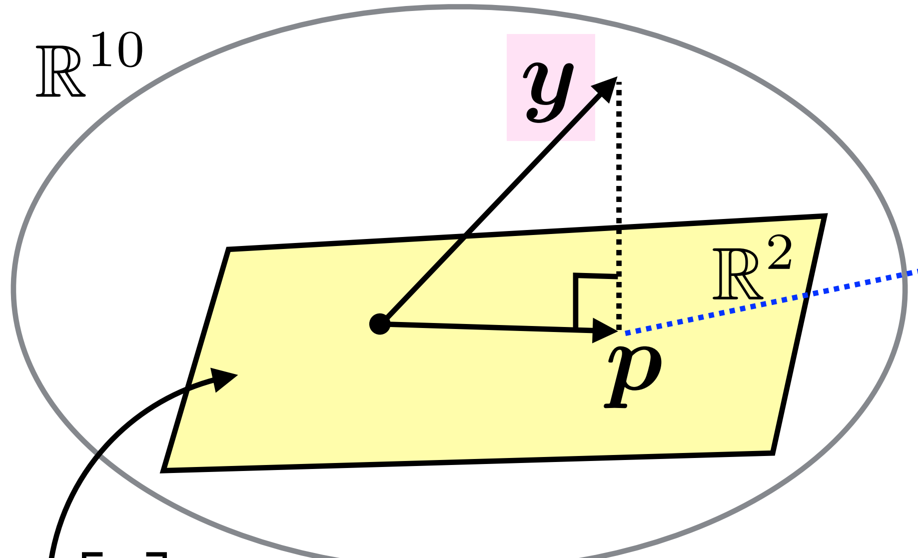
$$(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top$$

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top$$

はどういう意味を持つのか?

先週の理解(復習): 直交射影

$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ を色々変えて、予測値 $\hat{\boldsymbol{y}} = a \begin{bmatrix} 0.541 \\ 1.277 \\ 0.26 \\ 3.93 \\ 2.676 \\ 2.466 \\ 1.566 \\ 4.119 \\ 4.515 \\ 3.709 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ を $\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 20.336 \\ 21.326 \\ 19.898 \\ 25.043 \\ 22.81 \\ 22.195 \\ 21.708 \\ 25.528 \\ 25.554 \\ 24.015 \end{bmatrix}$ に近づける



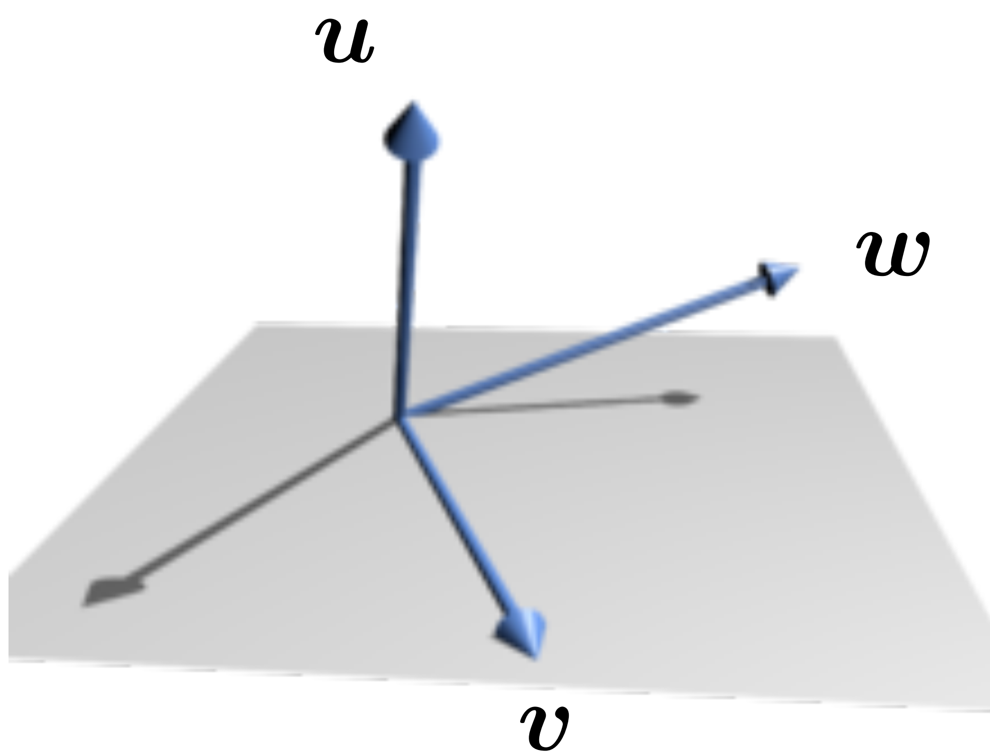
$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ の可動域

$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$

のとき $\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{y}\|^2$ が最小に

つまり $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$

一次独立



ある組のベクトルについて
どの一つのベクトルも
他のベクトルの線形結合で
表すことができない

線形結合　$a\boldsymbol{u} + b\boldsymbol{v}$

$\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}$ が逆行列を持つ　$\Leftrightarrow$　$\boldsymbol{X}$ の列ベクトルが一次独立

証明: $\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}, \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathrm{Ker}(\boldsymbol{X}) = \mathrm{Ker}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}) = \{\mathbf{0}\}$

行列の転置

行と列の入れ替え: i列をi行へ

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{A}^\top = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$$

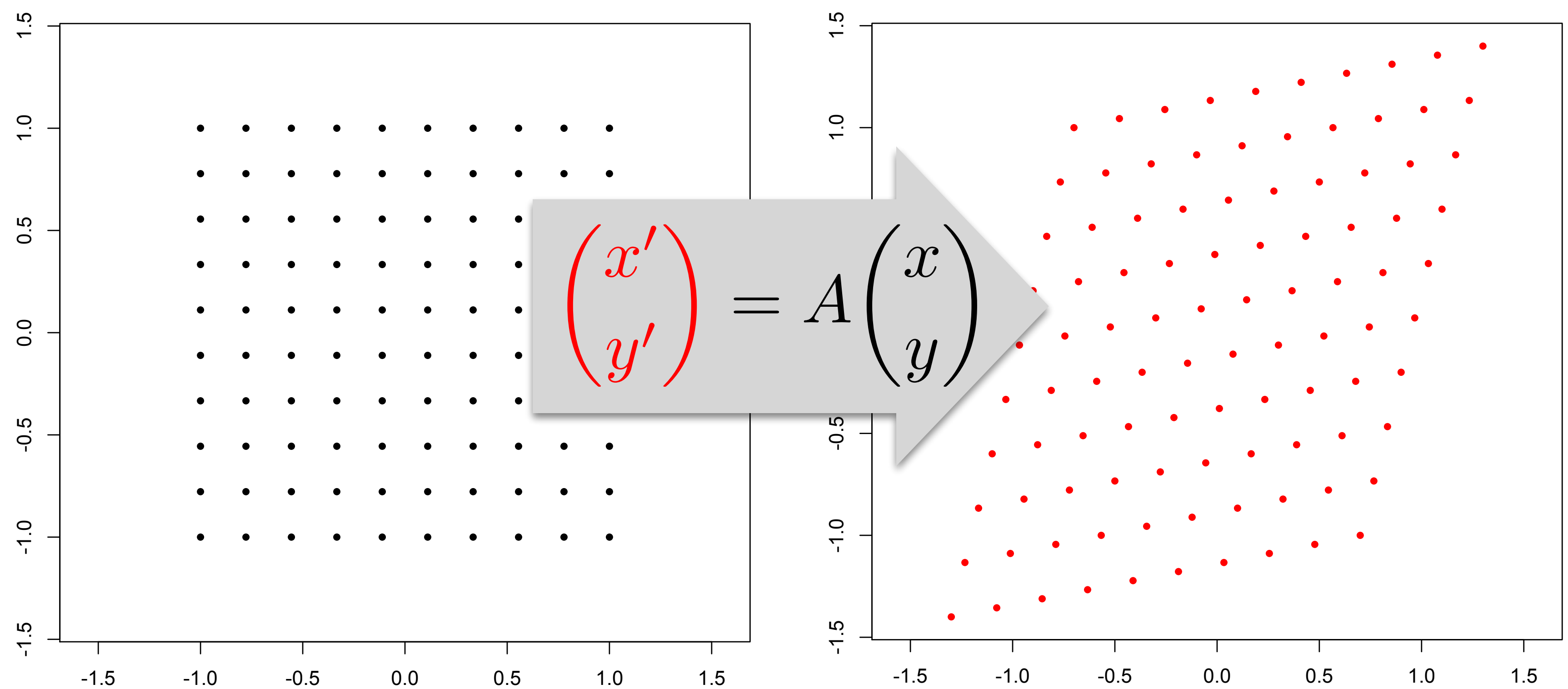
対称な正方行列

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 5 \end{bmatrix}$$

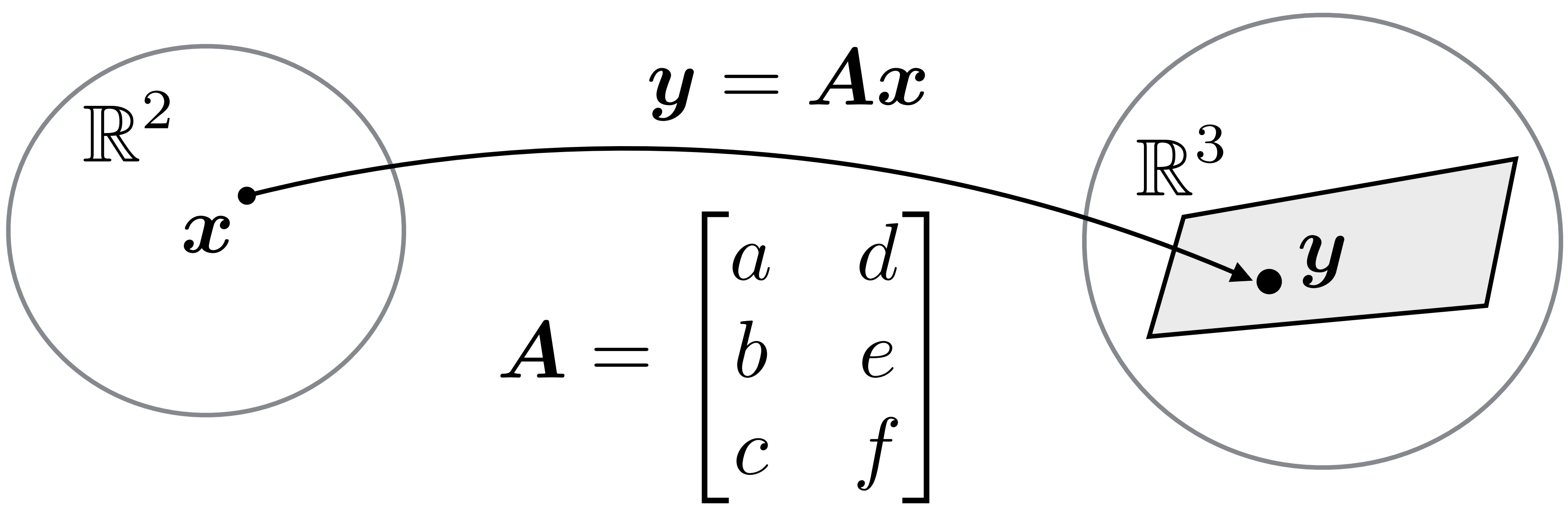
写像としての行列：線形写像

$$A = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.2 & 1.2 \end{bmatrix}$$

点がAによる線形写像で
どこへ移るか観察



$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$



$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{bmatrix}$$

行列の２つの見方

行ベクトル

$$\begin{bmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (a, d)^\top (x, y) \\ (b, e)^\top (x, y) \\ (c, f)^\top (x, y) \end{bmatrix}$$

列ベクトル

$$\begin{bmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = x \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} + y \cdot \begin{bmatrix} d \\ e \\ f \end{bmatrix}$$

列空間と行空間

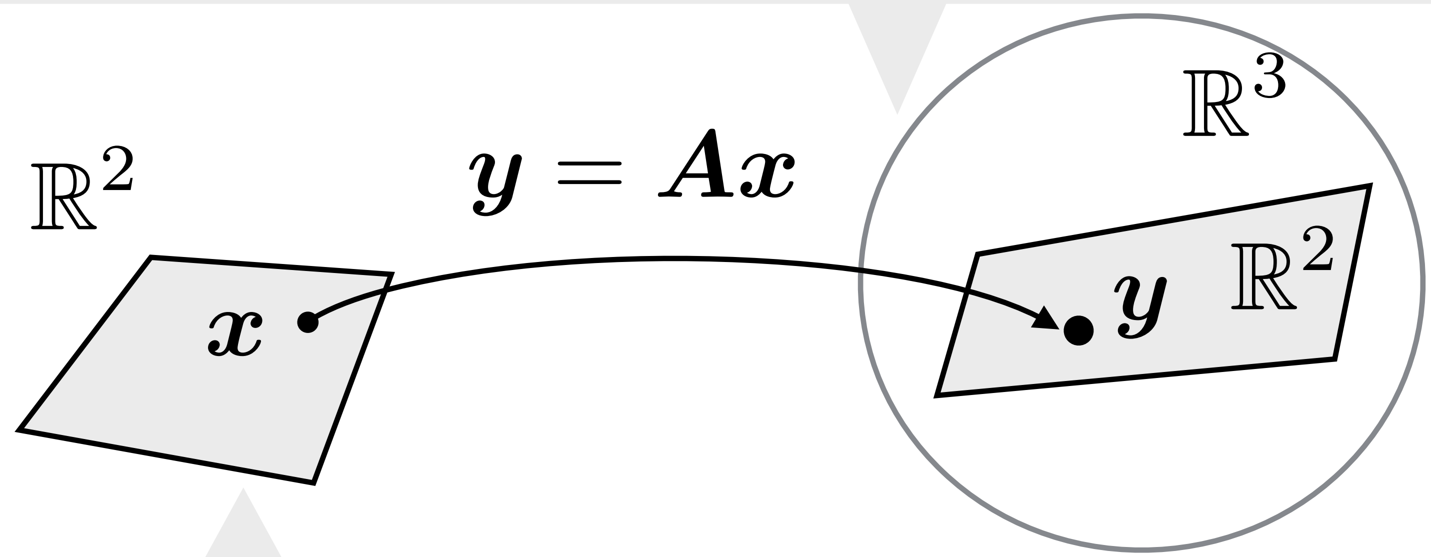
$$\boldsymbol{c}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{c}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

列空間

列ベクトルが張る空間

(列ベクトル=基底)

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$



$$\boldsymbol{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{r}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{r}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

行空間

行ベクトルが張る空間

(=転置行列の列空間)

「像」と「核」

Image or Range

$\mathrm{Im}(\boldsymbol{A})$

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ となる $\boldsymbol{y}$ の集合

(列空間のこと)

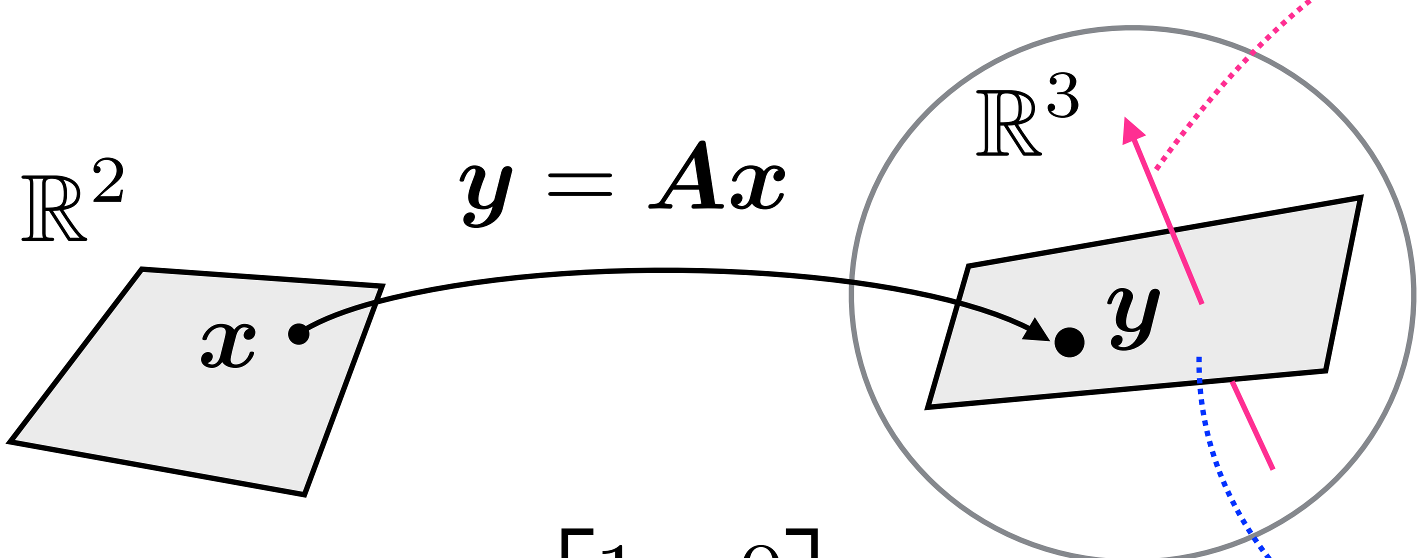
Kernel or Null Space

$\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A})$

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ となる $\boldsymbol{x}$ の集合

列ベクトル全てと直交

$\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^\top)$

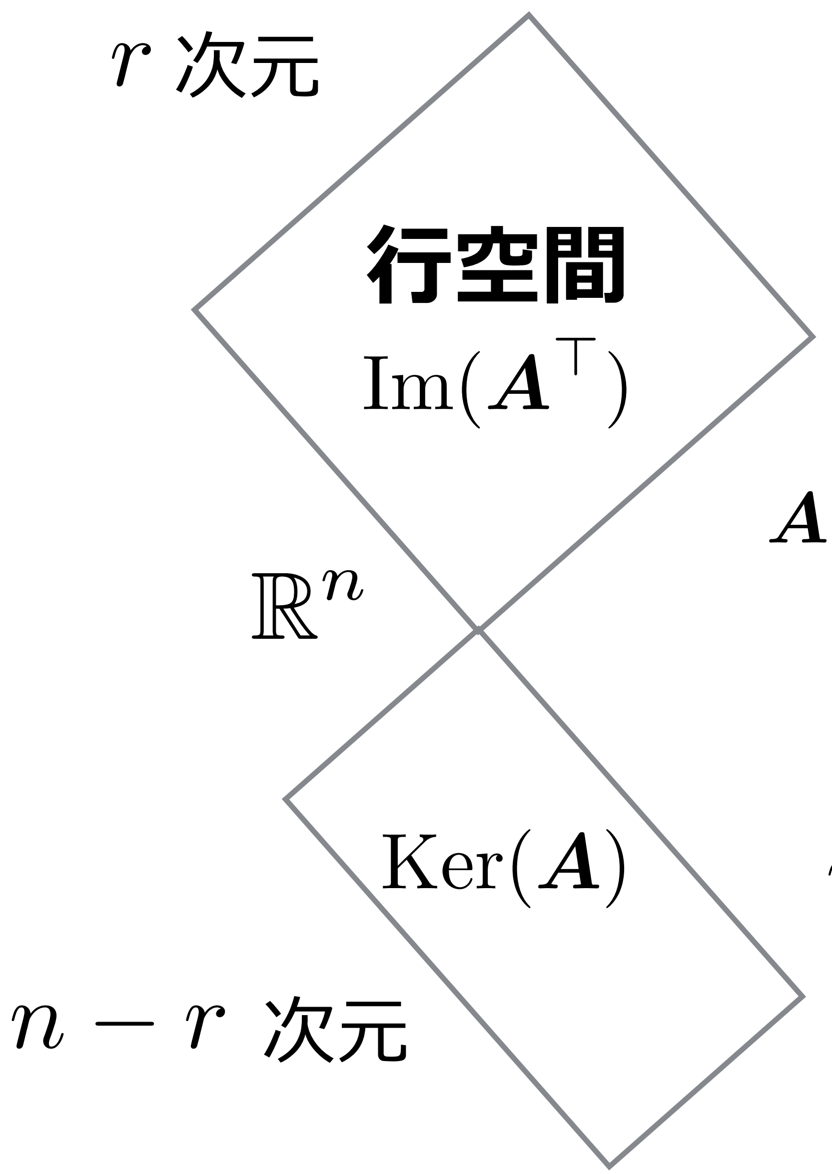


$$\boldsymbol{A}^\top = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$\mathrm{Im}(\boldsymbol{A})$

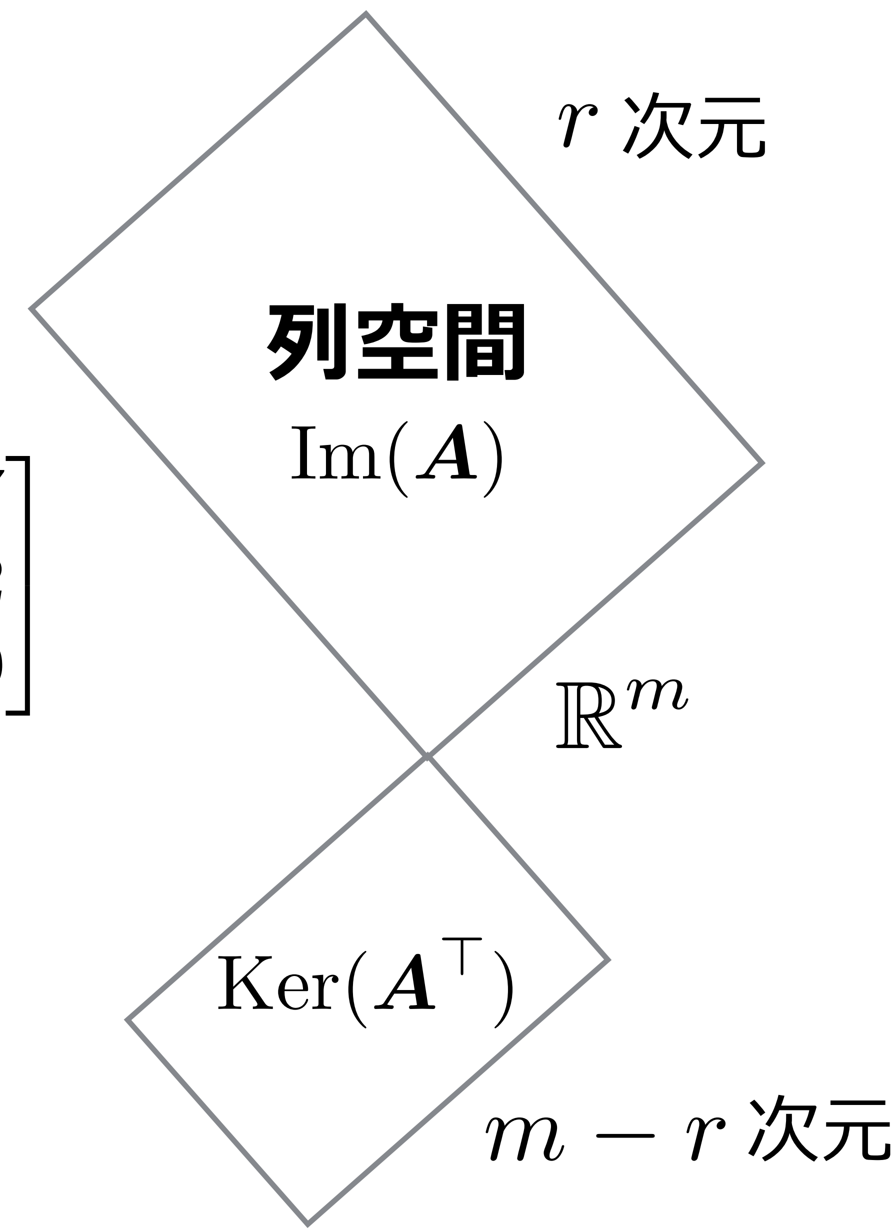
参考：行列が一つあると４種類の空間を定める



$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 & 0 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 5 & 1 & 9 \end{bmatrix}$$

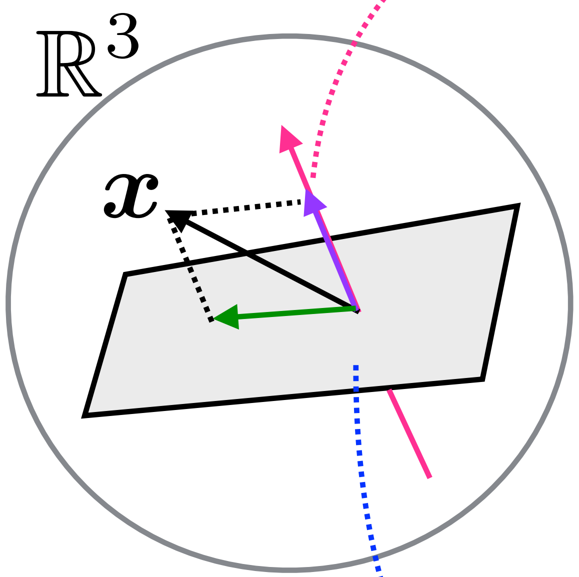
$$m = 3, n = 5$$

$$r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = 2$$



世界標準MIT教科書 ストラング:線形代数イントロダクション. 近代科学社 (2015, ISBN-10: 4764904055)

$\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^\top)$



任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ は

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2, \quad \boldsymbol{x}_1 \in \mathrm{Im}(\boldsymbol{A}), \boldsymbol{x}_2 \in \mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^\top)$$

と書ける！($\boldsymbol{x}_1 \perp \boldsymbol{x}_2$)

$\mathrm{Im}(\boldsymbol{A})$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{A}^\top = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

(線形代数学の基本定理)

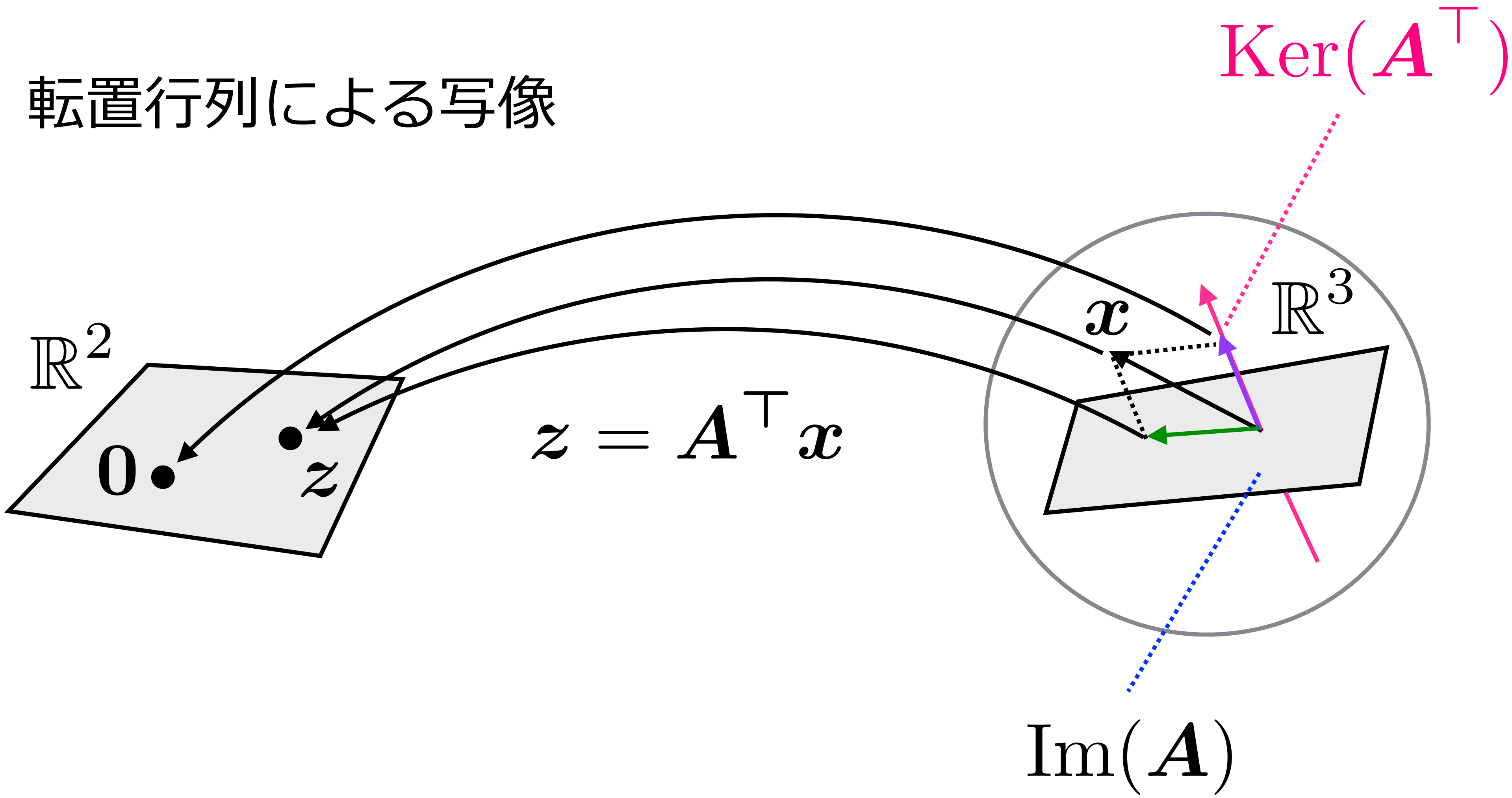
$$\mathbb{R}^3 = \mathrm{Im}(\boldsymbol{A}) \oplus \mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^\top)$$

直交直和分解という

$$\mathrm{Im}(\boldsymbol{A}) = \left\{ \begin{bmatrix} a \\ a+b \\ a+2b \end{bmatrix} \middle| \, a, b \in \mathbb{R} \right\}$$

$$\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^\top) = \left\{ c \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \middle| \, c \in \mathbb{R} \right\}$$

転置行列による写像

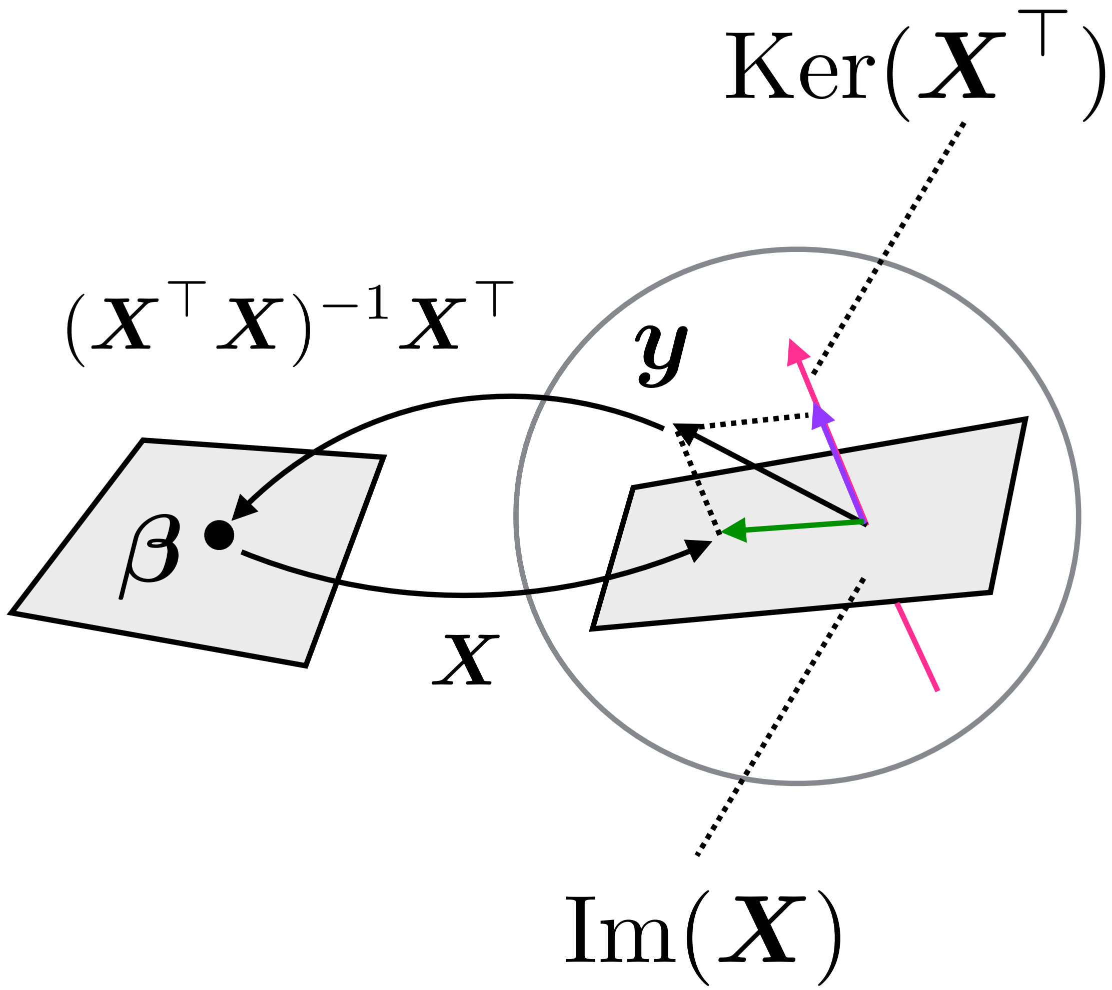


Q.　与えられた任意の $\boldsymbol{x}$ に対して

$\boldsymbol{x}_1$ および $\boldsymbol{x}_2$ をどう求める??

基底が分かるので「直交射影」

$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$ の再考



$$X = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_p \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$ は$\boldsymbol{X}$の全ての列ベクトルと直交

$\Leftrightarrow$

$$\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{X}^\top (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{0}$$

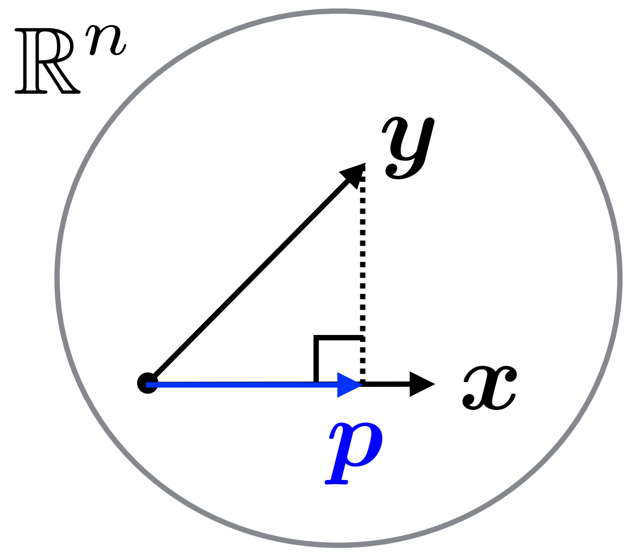
$\Leftrightarrow$

$$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$$

$\Leftrightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned} \boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{x}_2 &= (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top)\boldsymbol{y} \end{aligned}}$$

直線上への直交射影



任意の２つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$

ベクトル $\boldsymbol{x}$ 方向の直線へベクトル $\boldsymbol{y}$ を直交射影することを考える。

射影先の点　$\boldsymbol{p} = \alpha \cdot \boldsymbol{x}$

直交条件 $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{p} \perp \boldsymbol{x}$ より

$$\boldsymbol{x}^\top(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{x}^\top(\boldsymbol{y} - \alpha \cdot \boldsymbol{x}) = 0$$

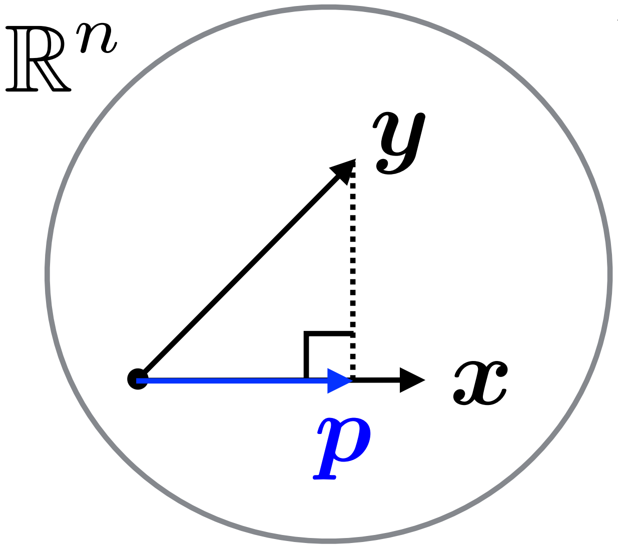
$$\iff \quad \alpha = \frac{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}}$$

$$= (\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x})^{-1} \cdot \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}$$

参考:

$$\beta = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$$

直線上への直交射影



射影先の点

$$\boldsymbol{p} = \alpha \cdot \boldsymbol{x}$$

$$\alpha = \frac{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x})^{-1} \cdot \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p} &= \|\boldsymbol{y}\| \cos\theta \cdot \frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|} \\ &= \|\boldsymbol{y}\| \frac{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|} \cdot \frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|} \\ &= \frac{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{x}\|} \cdot \boldsymbol{x} \end{aligned}$$

射影行列

射影行列

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{x} \cdot \alpha = \boldsymbol{x} \frac{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}} = \frac{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top}{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}} \boldsymbol{y}$$

参考:

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top$$

例)

$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ のとき

$$\frac{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top}{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 4 \\ 2 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

解のない連立方程式の最良近似解

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

これは連立方程式を表すが
すべての方程式を満たす解がない。
(未知変数 < 方程式の数)

両辺のベクトルに $\boldsymbol{A}^\top$をかけることにより
方程式を解ける形に変換

$$\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{b}$$

$\rightarrow$ これは正規方程式と一致し、最小二乗
近似解を与える方程式になる

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A})^{-1} \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{b}$$

一般逆行列による解

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

これは連立方程式を表すが
左辺の行列が正方行列ではないので
逆行列を掛けて求解ができない。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

やりたいこと $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}^{-1}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}$

が、こんなのは存在しない

$$\Downarrow$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{b}$$

Pseudoinverse

$\boldsymbol{A}^{+} = (\boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\top}$ は「(左)一般逆行列」と呼ばれる行列

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{+}$ は $\boldsymbol{A}$ の列空間への射影行列になる。

やってみる？

練習問題１　$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ を $\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ に射影して $\boldsymbol{p} = \alpha \cdot \boldsymbol{a}$

を求めよ。

練習問題2　$\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$ への射影行列 $\boldsymbol{P}$ を求めよ。

練習問題3　上記の射影行列 $\boldsymbol{P}$ の対称性・べき等性を確認せよ。

$\boldsymbol{P}^\top = \boldsymbol{P}$　　$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}$

練習問題4　$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ に対して

の列ベクトルが張る平面への $\boldsymbol{b}$ の射影点、

および、射影行列を求めよ。

練習問題１　$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ を $\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ に射影して $\boldsymbol{p} = \alpha \cdot \boldsymbol{a}$ を求めよ。

$$\alpha = \frac{\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{a}} = \frac{5}{9} \qquad \boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} 5/9 \\ 10/9 \\ 10/9 \end{bmatrix}$$

練習問題2　$\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$ への射影行列 $\boldsymbol{P}$ を求めよ。

$$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{c}\boldsymbol{c}^\top}{\boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{c}} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix}$$

練習問題3　上記の射影行列 $\boldsymbol{P}$ の対称性・べき等性を確認せよ。

$$\boldsymbol{P}^\top = \boldsymbol{P}$$

$$\boldsymbol{P}^2 = \frac{1}{14^2}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 4 & 6\\ 3 & 6 & 9\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 4 & 6\\ 3 & 6 & 9\end{bmatrix} = \frac{1}{14^2}\begin{bmatrix}14 & 28 & 42\\ 28 & 56 & 84\\ 42 & 84 & 126\end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{14}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 4 & 6\\ 3 & 6 & 9\end{bmatrix} = \boldsymbol{P}$$

練習問題4 $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ に対して

の列ベクトルが張る平面への $\boldsymbol{b}$ の射影点、

および、射影行列を求めよ。

$$\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A})^{-1} = \begin{bmatrix} 5/6 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^\top = \begin{bmatrix} 5/6 & 1/3 & -1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/6 & 1/3 & 5/6 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

授業計画

Prologue: データを読み解くとは何なのか
(多変量解析とデータサイエンスと統計学とパターン認識と機械学習とデータマイニング)

DAY-1 6/16 (01)(02) **単回帰: 点群への直線当てはめを"真剣に"考える**
(見えない世界へようこそ)
DAY-2 6/23 (03)(04) **重回帰と線形代数: 回帰の行列計算とその意味**
(データの計算とデータの解釈)
DAY-3 6/30 (05)(06) **重回帰と確率統計: なぜ回帰に確率が必要?**
(推測統計入門:データの向こう側について語るための代償)
DAY-4 7/07 (07)(08) **多変量正規分布: 多次元の正規分布と線形代数**
(ゼロから理解する正規分布)
DAY-5 7/14 (09)(10) **マハラノビス距離と判別分析: 線形代数を使う1**
(最適な判別とは)
DAY-6 7/28 (11)(12) **固有値分解と主成分分析: 線形代数を使う2**
(高次元データがかかえる大問題)
DAY-7 8/04 (13)(14) **特異値分解と数量化: 線形代数を使う3**
(数値じゃない対象に統計を効かすには)

Epilogue: 基礎の上に在る世界(話したことと話さなかったこと)