線形代数と記述統計

2023.11.24 白石和夫

3 記述統計

線形代数の応用分野。
回帰直線と主成分分析の数理的側面を学ぶ。

3.1 期待値・分散

3.1.1 代表値

N 個の数値 $x_1, x_2, \ldots, x_N$ に対し，
相加平均 $\overline{x} = \dfrac{1}{N}\left(x_1 + x_2 + \cdots + x_N\right)$,
相乗平均 $\sqrt[N]{x_1 x_2 \cdots x_N}$,
調和平均 $\dfrac{1}{\dfrac{1}{N}\left(\frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2} + \cdots + \frac{1}{x_N}\right)}$,
2 乗平均平方根値 $\sqrt{\dfrac{1}{N}\left({x_1}^2 + {x_2}^2 + \cdots + x_N^2\right)}$
対象を正の数とするとき，
　2 乗平均平方根値 $\geqq$ 相加平均 $\geqq$ 相乗平均 $\geqq$ 調和平均
の関係がある。
たとえば，正の 2 数 a, b に対して
$\dfrac{1}{2}(a^2 + b^2) - \left\{\dfrac{1}{2}(a+b)\right\}^2 = \dfrac{a^2 + b^2 - 2ab}{4} = \frac{1}{4}(a-b)^2 \geqq 0$ なので，
$\sqrt{\dfrac{1}{2}(a^2 + b^2)} \geqq \dfrac{1}{2}(a+b)$

3.1.2 散布度

標準偏差

N 個の数値 $x_1, x_2, \ldots, x_N$ に対し，
$s_x = \sqrt{\dfrac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})^2}$ を標準偏差という。
標準偏差は，偏差 $x_k - \overline{x}$ の 2 乗平均平方根値。
${s_x}^2 = \dfrac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})^2$ を分散という。
$\dfrac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})^2 = \dfrac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\left({x_k}^2 - 2\overline{x}x_k + \overline{x}^2\right) = \dfrac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}{x_k}^2 - \overline{x}^2$
すなわち，分散$=$ x^2 の平均 $-$(平均 $)^2$
${s_x}^2 = \overline{x^2} - \overline{x}^2$

3.1.3 データの標準化

$z = \dfrac{x - \overline{x}}{s_x}$ の式を用いて変換すると，$\overline{z} = 1$，$s_z = 1$。

3.2 2 変量の統計

2 次元集計表や散布図は中学校で学ぶことを想定。

3.2.1 2 次元度数分布

$x_0 < x_1 < \cdots < x_m$，$y_0 < y_1 < \cdots < y_n$ とする。区間 $[x_{i-1}, x_i) \times [y_{j-1}, y_j)$ にある点 (x, y) の個数を a_{ij} で表すとき，

区間 $[x_i, x_{i+1})$ にある点の個数は $\sum\limits_{j=1}^{m} a_{ij}$，区間 $[y_{j-1}, y_j)$ にある点の個数は $\sum\limits_{i=1}^{n} a_{ij}$

3.2.2 相関係数

ある集団に属する 2 つの変量 x, y について，その値の組を $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$ $, \ldots, (x_N, y_N)$ とする。

$r = \dfrac{1}{N} \sum\limits_{k=1}^{N} \dfrac{(x_k - \overline{x})}{s_x} \dfrac{(y_k - \overline{y})}{s_y}$ を x と y の相関係数という。

$s_{xy} = \dfrac{1}{N} \sum\limits_{k=1}^{N} (x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y})$ とおくと，$r = \dfrac{s_{xy}}{s_x s_y}$

s_{xy} を x, y の共分散という。

命題 1 $-1 \leqq r \leqq 1$

証明. $-1 \leqq r \leqq 1$ を示すために，$-s_x s_y \leqq s_{xy} \leqq s_x s_y$ を示す。

$\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n), \boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_n)$ に対し，

$|\boldsymbol{a}|^2 = \sum\limits_{k=1}^{n} a_k$，$|\boldsymbol{b}|^2 = \sum\limits_{k=1}^{n} b_k$，$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \sum\limits_{k=1}^{n} a_k b_k$

と定めるとき，コーシー・シュワルツの不等式　$-|\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}| \leqq \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \leqq |\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}|$　が成立することを利用する。

$|\boldsymbol{a}|^2 |\boldsymbol{b}|^2 - (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})^2 \geqq 0$ を示せばよい。

$$\sum_{k=1}^{n} (a_k x + b_k)^2 = x^2 \sum_{k=1}^{n} {a_k}^2 + 2x \sum_{k=1}^{n} a_k b_k + \sum_{k=1}^{n} {b_k}^2$$

$\sum\limits_{k=1}^{n} (a_k x + b_k)^2 \geqq 0$ だから，x に関する 2 次方程式 $x^2 \sum\limits_{k=1}^{n} {a_k}^2 + 2x \sum\limits_{k=1}^{n} a_k b_k + \sum\limits_{k=1}^{n} {b_k}^2 = 0$ の解は高々 1 つなので，判別式を D として

$$\frac{D}{4} = \left(\sum_{k=1}^{n} a_k b_k \right)^2 - \left(\sum_{k=1}^{n} {a_k}^2 \right) \left(\sum_{k=1}^{n} {b_k}^2 \right) \leqq 0$$

$$\therefore \left(\sum_{k=1}^{n} a_k b_k \right)^2 \leqq \left(\sum_{k=1}^{n} {a_k}^2 \right) \left(\sum_{k=1}^{n} {b_k}^2 \right)$$

この不等式において，$a_k = x_k - \overline{x}$, $b_k = y_k - \overline{y}$ とおいて N^2 で割ると，

$$\left\{\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y})\right\}^2 \leqq \left\{\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})^2\right\}\left\{\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(y_k - \overline{y})^2\right\}$$

$\therefore {s_{xy}}^2 \leqq {s_x}^2{s_y}^2$

$\therefore -s_x s_y \leqq s_{xy} \leqq s_x s_y$ □

3.2.3 回帰直線

最小 2 乗法

ある集団に属する 2 つの変量 x, y について，その値の組を $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \ldots, (x_N, y_N)$ とする。

一次関数 $y = ax + b$ で変量 x の値から y の値を推定したい。

$\sum\limits_{k=1}^{N}\{y_k - (ax_k + b)\}^2$ が最小となるように a, b を定める。

$\frac{1}{N}\sum\limits_{k=1}^{N}{x_k}^2 = {s_x}^2 + \overline{x}^2$, $\frac{1}{N}\sum\limits_{k=1}^{N}{y_k}^2 = {s_y}^2 + \overline{y}^2$, $\frac{1}{N}\sum\limits_{k=1}^{N}x_k y_k = s_{xy} + \overline{xy} = rs_x s_y + \overline{xy}$ に注意すると，

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\{y_k - (ax_k + b)\}^2 = \{b - (\overline{y} - a\overline{x})\}^2 + {s_x}^2\left(a - r\frac{s_y}{s_x}\right) + {s_y}^2(1 - r^2)$$

と変形できるので，

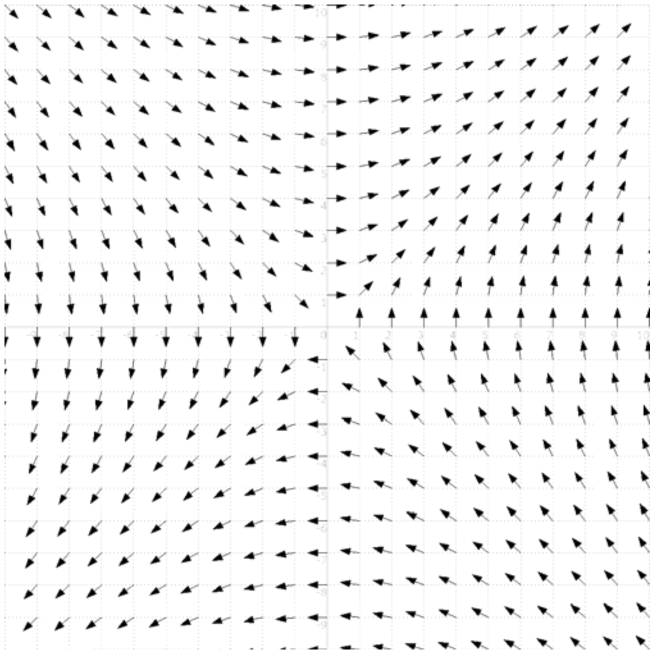
$a = r\dfrac{s_y}{s_x}$ ，$b = \overline{y} - a\overline{x}$ と定めると $\sum\limits_{k=1}^{N}\{y_k - (ax_k + b)\}^2$ が最小になる。

y の x への回帰直線

直線 $y = r\dfrac{s_y}{s_x}(x - \overline{x}) + \overline{y}$ を y の x への回帰直線という。

3.3 固有値・固有ベクトル

観察 2 次の図は，一次変換 $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ によって各格子点がどの向きに移動するか，同じ大きさの有向線分を用いて図示したものである。移動方向が原点へ向かう向き，あるいは，原点と反対の向きとなるものを見出すことができる。



この図は次のプログラムを用いて描いた。

```
100 DATA 1,2
110 DATA 2,1
120 DIM m(2,2)
130 MAT READ m
140 SET WINDOW -10,10,-10,10
150 DRAW grid
160 FOR x=-10 TO 10
170    FOR y=-10 TO 10
180       LET xx=m(1,1)*x+m(2,1)*y
190       LET yy=m(2,1)*x+m(2,2)*y
200       IF (xx-x)^2+(yy-y)^2>0 THEN
210          LET ang=ANGLE(xx-x, yy-y)
220          DRAW arrow WITH ROTATE(ang)*SHIFT(x,y)
230       END IF
240       WAIT DELAY 0.01
250    NEXT y
260 NEXT x
280 PICTURE arrow
290    PLOT LINES: 0,0; 0.3,0
300    PLOT AREA : 0.3,0.1; 0.3,-0.1 ; 0.6,0
310 END PICTURE
320 END
```

正方行列 $A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ に対し，$A\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v}$，すなわち，

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

となる $\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\neq\boldsymbol{0}$ を固有ベクトル，実数 λ を固有値という。

固有値 λ と固有ベクトル $\boldsymbol{v}$ は，$(A-\lambda E)\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}$ を満たす。

$\boldsymbol{v}\neq\boldsymbol{0}$ なので，$\det(A-\lambda E)=0$。逆に $\det(A-\lambda E)=0$ であれば，$(A-\lambda E)\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}$ となる零でないベクトル $\boldsymbol{v}$ が存在する。

$\det(A-\lambda E)$ を固有多項式，$\det(A-\lambda E)=0$ を固有方程式という。

転置行列　（**transposed matrix**）

行列 A に対し，行と列を入れ換えて得られる行列を A の転置行列といい，${}^tA$ で表す。

たとえば，

$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ に対し，${}^tA=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}$

$v=(a,b)$ に対し，${}^tv=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

転置行列の計算公式

${}^t(AB)=\ {}^tB\ {}^tA$

${}^t({}^tA)=A$

実数 k に対し，${}^t(kA)=k\ {}^tA$

Note. 転置演算 ${}^tA$ は行列の積に優先する。

Note. A の転置行列を A^{T} と書く流儀もある。

内積　ベクトルの内積を転置行列を用いて表すことができる。

$u=(a,b), v=(c,d)$ に対し，$u\cdot v=u\ {}^tv$

$u=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, v=\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ に対し，$u\cdot v={}^t\,u\ v$

対称行列

正方行列 A は，${}^tA=A$ となるとき対称行列と呼ばれる。

対称行列の固有値・固有ベクトル

対称行列 $A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}$ の固有方程式 $(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)-{a_{12}}^2=0$ を展開して整理すると，$\lambda^2-(a_{11}+a_{22})\lambda+a_{11}a_{22}-{a_{12}}^2=0$。判別式を D とすると，

$D=(a_{11}+a_{22})^2-4(a_{11}a_{22}-{a_{12}}^2)=(a_{11}-a_{22})^2+4{a_{12}}^2>0$

なので，単位行列のスカラー倍でない 2 次対称行列は異なる 2 個の固有値を持つ。

その固有値を λ_1,λ_2 とし，λ_1,λ_2 に対応する固有ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2$ とする。

すなわち，${}^tA=A$，$\lambda_1\neq\lambda_2$，$A\boldsymbol{v}_1=\lambda_1\boldsymbol{v}_1$，$A\boldsymbol{v}_2=\lambda_2\boldsymbol{v}_2$

$\lambda_1(\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2)=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2={}^t(\lambda_1\boldsymbol{v}_1)\boldsymbol{v}_2={}^t(A\boldsymbol{v}_1)\boldsymbol{v}_2={}^t\boldsymbol{v}_1\,{}^tA\boldsymbol{v}_2={}^t\boldsymbol{v}_1\,A\boldsymbol{v}_2$
$\lambda_2(\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2)=\boldsymbol{v}_1\cdot\lambda_2\boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{v}_1\cdot\ A\boldsymbol{v}_2={}^t\boldsymbol{v}_1\,A\boldsymbol{v}_2$
$\therefore\lambda_1(\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2)=\lambda_2(\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2)$
$(\lambda_1-\lambda_2)(\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2)=0$
$\lambda_1\neq\lambda_2$ より $\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2=0$。

命題 3 単位行列のスカラー倍でない 2 次実対称行列は 2 個の異なる固有値を持つ。

命題 4 実対称行列の異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する。

3.4 多変量統計解析（主成分分析）

主成分分析への入口 ある集団に属する 2 つの変量 x, y について，
その値の組を $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \ldots, (x_N, y_N)$ とする。

直線 $ax+by+c=0$ と各点 (x_k, y_k) との距離の平方の和 $\displaystyle\sum_{k=1}^{N}\frac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}$ が最小となるように $a:b:c$ を定める。

$\displaystyle\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}{x_k}^2={s_x}^2+\overline{x}^2$，$\displaystyle\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}{y_k}^2={s_y}^2+\overline{y}^2$，$\displaystyle\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}x_ky_k=s_{xy}+\overline{xy}$ を用いて，

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}$$
$$=\frac{1}{N}\cdot\frac{1}{a^2+b^2}\left(a^2\sum_{k=1}^{N}{x_k}^2+2ab\sum_{k=1}^{N}x_ky_k+b^2\sum_{k=1}^{N}{y_k}^2+2ac\sum_{k=1}^{N}x_k+2bc\sum_{k=1}^{N}y_k+c^2\right)$$
$$=\frac{a^2\left({s_x}^2+\overline{x}^2\right)+2ab\left(s_{xy}+\overline{xy}\right)+b^2\left({s_y}^2+\overline{y}^2\right)+2ac\overline{x}+2bc\overline{y}+c^2}{a^2+b^2}$$
$$=\frac{(c+a\overline{x}+b\overline{y})^2-a^2\overline{x}^2-2ab\overline{xy}-b^2\overline{y}^2+a^2\left({s_x}^2+\overline{x}^2\right)+2ab\left(s_{xy}+\overline{xy}\right)+b^2\left({s_y}^2+\overline{y}^2\right)}{a^2+b^2}$$
$$=\frac{(c+a\overline{x}+b\overline{y})^2+a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2}{a^2+b^2}$$

$c+a\overline{x}+b\overline{y}=0$ のとき最小。$a:b$ を定めればよい。

以降の展開に 5 案ある。

解法 1

$a=\cos\theta, b=\sin\theta$ としておく。

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}=\frac{a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2}{a^2+b^2}={s_x}^2\cos^2\theta+2s_{xy}\cos\theta\sin\theta+{s_y}^2\sin^2\theta$$
$$=\tfrac{1}{2}{s_x}^2(1+\cos 2\theta)+s_{xy}\sin 2\theta+\tfrac{1}{2}{s_y}^2(1-\cos 2\theta)$$
$$=\tfrac{1}{2}\left({s_x}^2+{s_y}^2\right)+\tfrac{1}{2}\left({s_x}^2-{s_y}^2\right)\cos 2\theta+s_{xy}\sin 2\theta$$

$\tfrac{1}{2}\left({s_x}^2-{s_y}^2\right)=r\cos 2\alpha, s_{xy}=r\sin 2\alpha$ (ただし $r>0$) とおくと，

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}=\tfrac{1}{2}\left({s_x}^2+{s_y}^2\right)+r\cos(2\theta-2\alpha)$$

最小となるのは，$2\theta-2\alpha=\pi$，すなわち，$\theta=\dfrac{\pi}{2}+\alpha$ のとき。

このとき，$a=\cos\theta=-\sin\alpha$，$b=\sin\theta=\cos\alpha$

$\frac{1}{2}\left({s_x}^2-{s_y}^2\right)=r\cos 2\alpha, s_{xy}=r\sin 2\alpha$ より，${s_x}^2-{s_y}^2=2r(b^2-a^2), s_{xy}=2rab$

r を消去して，$a^2 s_{sy}+ab{s_y}^2=ab{s_x}^2+b^2 s_{xy}$

Note.

$a(as_{xy}+b{s_y}^2)=b(a{s_x}^2+bs_{xy})=ab\lambda$ とおくと

$as_{sy}+b{s_y}^2=b\lambda$

$a{s_x}^2+bs_{xy}=a\lambda$

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

すなわち，$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ は共分散行列 $\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}$ の固有ベクトル。

Note2.

この直線は，直線 $y-\overline{y}=\dfrac{s_y}{s_x}(x-\overline{x})$ ではない。

別解（商の微分法を利用，三角関数を回避）

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}=\frac{a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2}{a^2+b^2}=\frac{{s_x}^2+2\frac{b}{a}s_{xy}+\left(\frac{b}{a}\right)^2{s_y}^2}{1+\left(\frac{b}{a}\right)^2}$$

$\frac{b}{a}=t$ とおいて $f(t)=\dfrac{{s_x}^2+2ts_{xy}+t^2{s_y}^2}{1+t^2}$ とすると，

$$f'(t)=\frac{\left(2s_{xy}+2t{s_y}^2\right)\left(1+t^2\right)-2t\left({s_x}^2+2ts_{xy}+t^2{s_y}^2\right)}{\left(1+t^2\right)^2}=\frac{-2t^2s_{xy}-2ts_x^2+2ts_y^2+2s_{xy}}{\left(1+t^2\right)^2}$$

$f'(t)=0$ より $s_{xy}-ts_x^2+ts_y^2-t^2s_{xy}=0$

$$t^2s_{xy}+t(s_x^2-s_y^2)-s_{xy}=0$$

別解 *2*（偏微分を利用）

$f(a,b)=\dfrac{a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2}{a^2+b^2}$ とおく。

$$\frac{\partial f}{\partial a}=\frac{\left(2a{s_x}^2+2bs_{xy}\right)\left(a^2+b^2\right)-\left(a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2\right)(2a)}{\left(a^2+b^2\right)^2}$$
$$=\frac{-2b\left(a^2s_{xy}-ab{s_x}^2+ab{s_y}^2-b^2s_{xy}\right)}{\left(a^2+b^2\right)^2}$$

同様に，$\dfrac{\partial f}{\partial b}=\dfrac{-2a\left(-a^2s_{xy}+ab{s_x}^2-ab{s_y}^2+b^2s_{xy}\right)}{\left(a^2+b^2\right)^2}$

$\dfrac{\partial f}{\partial a}=\dfrac{\partial f}{\partial b}=0$ より $a^2s_{xy}-ab{s_x}^2+ab{s_y}^2-b^2s_{xy}=0$

別解 *3*（ラグランジュの未定乗数法）

$a^2+b^2=1$ の制約のもとで $a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2s_y^2$ を最小にしたい。

$f(a,b)=a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2$, $g(a,b)=a^2+b^2-1$ とおき，ラグランジュの未定乗数法を適用する。以後の計算は最も容易だが，ラグランジュの未定乗数法が成立する理由を説明するのは簡単ではない。

別解 *4*（固有値，固有ベクトル）

行列を固有値，固有ベクトルを用いて分解する。この手法だと微積分は不要。以後，これを述べる。

共分散行列の固有ベクトル

$r=\dfrac{s_{xy}}{s_x s_y}$ とし，$|r|<1$ の場合を考える。

共分散行列 $\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}$ の固有値を λ_1,λ_2 とする。

λ_1,λ_2 は正の数である。

なぜなら，固有多項式 $\lambda^2-({s_x}^2+{s_y}^2)\,\lambda+{s_x}^2{s_y}^2-s_{xy}{}^2=0$ において 2 次方程式の解と係数の関係から

$\lambda_1+\lambda_2={s_x}^2+{s_y}^2\geqq 0,\ \lambda_1\lambda_2={s_x}^2{s_y}^2-s_{xy}{}^2>0 \qquad (\because\ r=\dfrac{s_{xy}}{s_x s_y}$ で $|r|<1)$。

$\lambda_1>\lambda_2$ とし，λ_1,λ_2 に対応する固有ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2$ とし，$|\boldsymbol{v}_1|=1,|\boldsymbol{v}_2|=1$ としておく。

$\dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{k=1}^{N}\dfrac{(ax_k+by_k+c)^2}{a^2+b^2}=\dfrac{a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2}{a^2+b^2}$ の最小値を求める。

$a^2+b^2=1$ としておく。$\binom{a}{b}=t_1\boldsymbol{v}_1+t_2\boldsymbol{v}_2$ とする。$a^2+b^2=1$ より，${t_1}^2+{t_2}^2=1$

$a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2=\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

$=\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}A(t_1\boldsymbol{v}_1+t_2\boldsymbol{v}_2)=\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}(t_1A\boldsymbol{v}_1+t_2A\boldsymbol{v}_2)$

$=\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}(t_1\lambda_1\boldsymbol{v}_1+t_2\lambda_2\boldsymbol{v}_2)=t_1\lambda_1\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}\boldsymbol{v}_1+t_2\lambda_2\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}\boldsymbol{v}_2$

$=t_1\lambda_1\,{}^t\boldsymbol{v}_1\binom{a}{b}+t_2\lambda_2\ {}^t\boldsymbol{v}_1\binom{a}{b}=t_1\lambda_1\,{}^t\boldsymbol{v}_1(t_1\boldsymbol{v}_1+t_2\boldsymbol{v}_2)+t_2\lambda_2\ {}^t\boldsymbol{v}_1t_1\boldsymbol{v}_1+t_2\boldsymbol{v}_2$

$={t_1}^2\lambda_1\,{}^t\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1+{t_2}^2\lambda_2\ {}^t\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2={t_1}^2\lambda_1+{t_2}^2\lambda_2={t_1}^2(\lambda_1-\lambda_2)+\lambda_2$

$a^2{s_x}^2+2abs_{xy}+b^2{s_y}^2$ が最小となるのは，$t_1=0,t_2=1$，すなわち，$\binom{a}{b}=\boldsymbol{v}_2$ のとき。

3.4.1 主成分分析 (2 変数)

ある集団に属する 2 つの変量 x,y について，
その値の組を (x_1,y_1)，(x_2,y_2)，(x_3,y_3)，…，(x_N,y_N) とする。

$(\overline{x},\overline{y})$ を原点とする新たな座標軸 z,w を導入して，

$$\begin{pmatrix} z_k \\ w_k \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_k-\overline{x} \\ y_k-\overline{y} \end{pmatrix}\qquad (k=1,2,\ldots,N)$$

とする。ただし，$a^2+b^2=1$。

$\displaystyle\sum_{k=1}^{N}{z_k}^2$ が最大となるように a,b を定めたい。

$$\sum_{k=1}^{N}{z_k}^2=\sum_{k=1}^{N}\{a\,(x_k-\overline{x})+b\,(y_k-\overline{y})\}^2$$

$$=\sum_{k=1}^{N}\left\{a^2\,(x_k-\overline{x})^2+2ab\,(x_k-\overline{x})\,(y_k-\overline{y})+b^2\,(y_k-\overline{y})^2\right\}$$

$$=a^2\sum_{k=1}^{N}(x_k-\overline{x})^2+2ab\sum_{k=1}^{N}(x_k-\overline{x})\,(y_k-\overline{y})+b^2\sum_{k=1}^{N}(y_k-\overline{y})^2$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}{z_k}^{\,2} &= {s_x}^2a^2+2s_{xy}ab+{s_y}^2b^2\\ &= {s_x}^2a^2+s_{xy}ab+s_{xy}ab+{s_y}^2b^2\\ &= \left({s_x}^2a+s_{xy}b\right)a+\left(s_{xy}a+{s_y}^2b\right)b\\ &= \begin{pmatrix} {s_x}^2a+s_{xy}b & s_{xy}a+{s_y}^2b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}$ の固有値を $\lambda\,,\ \lambda'\ (\lambda > \lambda')$ とし，

λ に対応する大きさ 1 の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ とする。

$v \perp v'$ なので，$v'=\begin{pmatrix} v_2 \\ -v_1 \end{pmatrix}$ としてよい。

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\boldsymbol{v}=\lambda\,\boldsymbol{v}$，$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\boldsymbol{v}'=\lambda'\boldsymbol{v}'$

${}^t\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}$ なので，

${}^t\boldsymbol{v}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}=\lambda\,\boldsymbol{v}$，${}^t\boldsymbol{v}'\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}=\lambda'\boldsymbol{v}'$

$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=s\boldsymbol{v}+t\boldsymbol{v}'$ とする。ただし，$s^2+t^2=1$ とする。

$\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}=s\,{}^t\boldsymbol{v}+t\,{}^t\boldsymbol{v}'$

$$\begin{aligned}&\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}{z_k}^{\,2}=\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}\\ &=\left\{s\,{}^t\boldsymbol{v}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}+t\,{}^t\boldsymbol{v}'\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} \\ s_{xy} & {s_y}^2 \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}\\ &=\left(s\ \lambda\,{}^t\boldsymbol{v}+t\ \lambda'\,{}^t\boldsymbol{v}'\right)\left(s\boldsymbol{v}+t\boldsymbol{v}'\right)\\ &=s^2\lambda\ +t^2\lambda'\end{aligned}$$

$\lambda > \lambda'$，$s^2+t^2=1$ としたので，

$\dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{k=1}^{N}{z_k}^{\,2}$ が最大となるのは $s=1$，すなわち，$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\boldsymbol{v}$ のとき。

3.4.2　主成分分析 (3 変数)

ある集団に属する 2 つの変量 x, y, z について，その値の組を (x_1, y_1, z_1)，(x_2, y_2, z_2)，(x_3, y_3, z_3)，$\ldots$，(x_N, y_N, z_N) とする。

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix}$ の固有値を λ, λ', λ'' ($\lambda > \lambda' > \lambda''$) とし，
λ, λ', λ'' に対応する大きさ 1 の固有ベクトルを，それぞれ，$\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}', \boldsymbol{v}''$ とする。

$w_k = a(x_k - \overline{x}) + b(y_k - \overline{y}) + c(z_k - \overline{z}) \quad (k = 1, 2, \ldots, N)$
（ただし，$a^2 + b^2 + c^2 = 1$）

とおいて，$\displaystyle\sum_{k=1}^{N} {w_k}^2$ が最小となるように a, b, c を定めたい。

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{N} {w_k}^2 &= \sum_{k=1}^{N} \{a\,(x_k - \overline{x}) + b\,(y_k - \overline{y}) + c\,(z_k - \overline{z})\}^2 \\
&= a^2\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})^2 + b^2\sum_{k=1}^{N}(y_k - \overline{y})^2 + c^2\sum_{k=1}^{N}(z_k - \overline{z})^2 \\
&\quad +2ab\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y}) + 2ac\sum_{k=1}^{N}(x_k - \overline{x})(z_k - \overline{z}) + 2bc\sum_{k=1}^{N}(y_k - \overline{y})(z_k - \overline{z})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} {w_k}^2 &= {s_x}^2a^2 + {s_y}^2b^2 + {s_z}^2c^2 + 2s_{xy}ab + 2s_{xz}ac + 2s_{yz}bc \\
&= {s_x}^2a^2 + s_{xy}ab + s_{xz}ac + s_{xy}ab + {s_y}^2b^2 + s_{yz}bc + s_{xz}ac + s_{xy}bc + {s_z}^2c^2 \\
&= \left({s_x}^2a + s_{xy}b + s_{xz}c\right)a + \left(s_{xy}a + {s_y}^2b + s_{yz}c\right)b + (s_{xz}a + s_{xy}b + {s_z}^2c)c \\
&= \begin{pmatrix} {s_x}^2a + s_{xy}b + s_{xz}c & s_{xy}a + {s_y}^2b + s_{yz}c & s_{xz}a + s_{xy}b + {s_z}^2c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{v} = \lambda\,\boldsymbol{v}$， $\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{v}' = \lambda'\boldsymbol{v}'$，

$\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{v}'' = \lambda''\boldsymbol{v}''$

${}^t\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix}$ なので，

${}^t\boldsymbol{v}\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} = \lambda\,\boldsymbol{v}$， ${}^t\boldsymbol{v}'\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} = \lambda'\boldsymbol{v}'$，

${}^t\boldsymbol{v}''\begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} = \lambda''\boldsymbol{v}''$

$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = s\boldsymbol{v} + t\boldsymbol{v}' + u\boldsymbol{v}''$ とする。ただし，$s^2 + t^2 + u^2 = 1$ とする。

$\begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix} = s^t\boldsymbol{v} + t^t\boldsymbol{v}' + u^t\boldsymbol{v}''$

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} {w_k}^2 = \begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$$= \left\{ s^t\boldsymbol{v} \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} + t^t\boldsymbol{v}' \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} + u^t\boldsymbol{v}'' \begin{pmatrix} {s_x}^2 & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{xy} & {s_y}^2 & s_{yz} \\ s_{xz} & s_{xy} & {s_z}^2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$$= \left(s\ \lambda\ ^t\boldsymbol{v} + t\ \lambda\ '^t\boldsymbol{v}' + u\ \lambda\ ''^t\boldsymbol{v}'' \right) \left(s\boldsymbol{v} + t\boldsymbol{v}' + u^t\boldsymbol{v}'' \right)$$

実対称行列の固有ベクトルは直交するので，

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} {w_k}^2 = s^2\,\lambda\ + t^2\,\lambda\ ' + u^2\,\lambda\ ''$$

$\lambda\ >\ \lambda\ ' >\ \lambda\ ''$，$s^2 + t^2 + u^2 = 1$ としたので，

$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} {z_k}^2$ が最大となるのは $s = 1$，すなわち，$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \boldsymbol{v}$ のとき。

Note.

3 次元 (以上) の場合は，固有方程式が重解を持つことがある。その場合，重複度に応じた個数の固有ベクトルを直交するように選べば，同様の議論が成立する。

例

$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ のとき，固有多項式は，$\det \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 & 1 \\ 1 & 2-\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = -\left(\lambda - 4\right)\left(\lambda - 1\right)^2$

$\lambda = 4$ に対応する固有ベクトルは，$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda = 1$ に対応する固有ベクトルとして，$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ の 2 個求まるが，

$k \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \perp \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ となるように k を定めることができる。

$(-k-1)(-1) + k = 0$ より，$k = -\frac{1}{2}$

$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}$，あるいは，$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ は，$\lambda = 1$ に対応し直交する固有ベクトルである。

3.5 研究課題

複素数に言及しないで線形代数を教えることは可能か。

共役複素数

複素数 $\alpha = x + yi$ $(x, y$ は実数$)$ に対し，$\overline{\alpha} = x - yi$。
$\alpha\overline{\alpha} = x^2 + y^2 = |\alpha|^2$，$\overline{\alpha + \beta} = \overline{\alpha} + \overline{\beta}$，$\overline{\alpha\beta} = \overline{\alpha}\,\overline{\beta}$

実対称行列

その成分がすべて実数である対称行列を実対称行列という。一般に，次が成立する。

定理 5 実対称行列の固有値はすべて実数である。

証明. λ を実対称行列 $A = (a_{ij})$ の固有値とし，$\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$ を固有ベクトルとする。

すなわち，$\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$，$A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$

$\overline{\boldsymbol{v}} = \begin{pmatrix} \overline{v_1} \\ \overline{v_2} \\ \vdots \\ \overline{v_n} \end{pmatrix}$ とすると，$A\overline{\boldsymbol{v}} = \overline{\lambda}\overline{\boldsymbol{v}}$ より，${}^t\overline{\boldsymbol{v}}A = \overline{\lambda}\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}$

$A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$ の両辺に左から ${}^t\overline{\boldsymbol{v}}$ をかけて，${}^t\overline{\boldsymbol{v}}A\boldsymbol{v} = \lambda\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}$
${}^t\overline{\boldsymbol{v}}A = \overline{\lambda}\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}$ の両辺に右から $\boldsymbol{v}$ をかけて，${}^t\overline{\boldsymbol{v}}A\boldsymbol{v} = \overline{\lambda}\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}$
${}^t\overline{\boldsymbol{v}}\ \boldsymbol{v} = \overline{v_1}v_1 + \overline{v_2}v_2 + \cdots + \overline{v_n}v_n = |v_1|^2 + |v_2|^2 + \cdots + |v_n|^2$
$\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$ なので，${}^t\overline{\boldsymbol{v}}\ \boldsymbol{v} = |v_1|^2 + |v_2|^2 + \cdots + |v_n|^2$ は正の実数（0 でない）。
だから，$\lambda\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}\ \boldsymbol{v} = \overline{\lambda}\ {}^t\overline{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}$ より $\lambda = \overline{\lambda}$ なので，λ は実数。

問 6 複素数を使用せずに，実対称行列は実数の固有値を持つことを示せないか？

□