

正準相関分析

データ数を n 、第 1 群の変量数を p 、第 2 群の変量数を q とする。

$$\text{第 1 群データを } [X] = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,p} \end{bmatrix},$$

$$\text{第 2 群データを } [Y] = \begin{bmatrix} y_{1,1} & \cdots & y_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{n,1} & \cdots & y_{n,q} \end{bmatrix},$$

とするが、変量の単位が異なるなど、変量間のスケールがバラバラになることを考慮し、各変量ごとに標準化を行い、それを改めて $[X]$ 、 $[Y]$ とする。

目的は、

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,p} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{Bmatrix} \\ \begin{Bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} y_{1,1} & \cdots & y_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{n,1} & \cdots & y_{n,q} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_q \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

とした時の $\{u_i\}_{i=1}^n$ 、 $\{v_i\}_{i=1}^n$ の相関係数 r が最大となる

$$\{a_k\}_{k=1}^p, \{b_k\}_{k=1}^q$$

を求めることである。

$[V]_{xx} = [X]^t[X]$ 、 $[V]_{yy} = [Y]^t[Y]$ 、 $[V]_{xy} = [X]^t[Y]$ 、 $[V]_{yx} = [Y]^t[X]$ とすると

$$r = \frac{\{a\}^t [V]_{xy} \{b\}}{\sqrt{(\{a\}^t [V]_{xx} \{a\})} \sqrt{(\{b\}^t [V]_{yy} \{b\})}}$$

となる。ここで $\{a\}$ 、 $\{b\}$ については、

$$\cdot \{a\}^t [V]_{xx} \{a\} = 1$$

$$\cdot \{b\}^t [V]_{yy} \{b\} = 1$$

という拘束条件を 設定する。従って、上式の分母は 1 となり、

$$r = \{a\}^t [V]_{xy} \{b\}$$

となる。

L a g r a n g e の未定乗数法により、

$$\begin{aligned} h(\{a\}, \{b\}, \lambda, \mu) &= \{a\}^t [V]_{xy} \{b\} \\ &\quad - \frac{\lambda}{2} (\{a\}^t [V]_{xx} \{a\} - 1) \\ &\quad - \frac{\mu}{2} (\{b\}^t [V]_{yy} \{b\} - 1) \end{aligned}$$

を最大化する問題となる。

上式で定義された式を $\{a\}$ 、 $\{b\}$ で微分する。

$$\cdot \frac{\partial h}{\partial \{a\}} = [V]_{xy} \{b\} - \lambda [V]_{xx} \{a\} = \{0\}_p \quad \cdots (1)$$

$$\cdot \frac{\partial h}{\partial \{b\}} = [V]_{yx} \{a\} - \mu [V]_{yy} \{b\} = \{0\}_q \quad \cdots (2)$$

となる。

ここで (1) 式に左から $\{a\}^t$ を、(2) 式に左から $\{b\}^t$ を掛ける。

$$\{a\}^t * (1) \text{式} \quad : \quad \{a\}^t [V]_{xy} \{b\} = \lambda \{a\}^t [V]_{xx} \{a\} = \lambda$$

$$\{b\}^t * (2) \text{式} \quad : \quad \{b\}^t [V]_{yx} \{a\} = \mu \{b\}^t [V]_{yy} \{b\} = \mu$$

従って、結局 $\lambda = \mu$ となる。

$$(2) \text{より、} \{b\} = \frac{1}{\mu} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\} = \frac{1}{\lambda} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\}$$

(1)に代入して、

$$\frac{1}{\lambda} [V]_{xy} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\} = \lambda [V]_{xx} \{a\}$$

$$[V]_{xy} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\} = \lambda^2 [V]_{xx} \{a\}$$

となる。

従って、

$$[V]_{xx}^{-1} [V]_{xy} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\} = \lambda^2 \{a\}$$

と変形できる。これにより、 $\{a\}$ の固有値問題となる。

上記で求めた固有ベクトル $\{a\}$ を $\{a\}^t [V]_{xx} \{a\} = 1$ を持たすように調整する必要がある。

上記の固有値を φ とすると、 $\lambda = \sqrt{\varphi}$ となる。

したがって、 $\{b\} = \frac{1}{\lambda} [V]_{yy}^{-1} [V]_{yx} \{a\}$ となる。