

数量化Ⅲ類

データが以下の表のように与えられている。
表の列方向（横方向）に K 個のカテゴリが与えられており、
表の行方向（縦方向）に、 M 個のパターンが与えられている。

パターンの添え字を i 、カテゴリの添え字を j とする。
つまり $i = 1 \sim M$ 、 $j = 1 \sim K$ である。
各パターンには、複数のサンプルがあり、その個数を $n_1 \sim n_m$ とする。

パターン i がカテゴリ j に反応する時、 $x_{i,j} = 1$ 、そうでないとき $x_{i,j} = 0$ とする。
またカテゴリ j に対応する重みを u_j 、パターン i に対応する重みを v_i とする。

重み ↓	重み ⇒			u ₁	u ₂	u ₃	u ₄	...	U _K	
	NO.	パターン ID	パターン 個数	カテゴリ1	カテゴリ2	カテゴリ3	カテゴリ4	...	カテゴリK	
				無口	真面目・ 頑固	空想好き	活発	...	粘り強い	計
v ₁	1	1	n ₁		1	1	1	...		m ₁
v ₂	2	2	n ₂			1		...		m ₂
v ₃	3	3	n ₃					...		m ₃
...									
V _M	M	M	n _M				1	...		m _M

$$m_i = \sum_{j=1}^K x_{i,j} \quad \text{とする。}$$

$$T = \sum_{i=1}^M n_i \cdot m_i = \sum_{i=1}^M n_i \left(\sum_{j=1}^K x_{i,j} \right) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K n_i x_{i,j}$$

$$U_{total} = \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M u_j n_i x_{i,j} = \sum_{j=1}^K u_j \left(\sum_{i=1}^M n_i x_{i,j} \right)$$

$$V_{total} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K v_i n_i x_{i,j} = \sum_{i=1}^M v_i n_i \left(\sum_{j=1}^K x_{i,j} \right) = \sum_{i=1}^M v_i n_i m_i$$

$$\bar{u} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M u_j n_i x_{i,j}$$

$$\bar{v} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M v_i n_i x_{i,j}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_u^2 &= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i (u_j - \bar{u})^2 \\
&= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i (u_j - \bar{u})^2 \\
&= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i (u_j^2 - 2u_j \bar{u} + \bar{u}^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_v^2 &= \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M n_i \cdot m_i \cdot (v_i - \bar{v})^2 \\
&= \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M n_i \left(\sum_{j=1}^K x_{i,j} \right) (v_i - \bar{v})^2
\end{aligned}$$

$$\sigma_{u,v} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i (u_j - \bar{u})(v_i - \bar{v})$$

目的は $\rho = \frac{\sigma_{u,v}}{\sigma_u \sigma_v}$ を最大にする $\{u_j\}$ 、 $\{v_i\}$ を求めること。

但し $\bar{u} = \bar{v} = 0$ とする。

したがって、

$$\begin{aligned}
&\bullet \quad j = 1 \sim K \text{ について } \frac{\partial \rho}{\partial u_j} = 0 \\
&\bullet \quad i = 1 \sim M \text{ について } \frac{\partial \rho}{\partial v_i} = 0
\end{aligned}$$

となる $\{u_j\}$ 、 $\{v_i\}$ を求める。

$j = 1 \sim K$ について

$$\frac{\partial \rho}{\partial u_j} = \frac{\partial}{\partial u_j} \left(\frac{\sigma_{u,v}}{\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}} \right) = \frac{\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}) - \sigma_{u,v} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial u_j}}{\sigma_u^2 \sigma_v^2} = 0$$

$$\text{つまり} \quad \frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}) = \sigma_{u,v} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial u_j}$$

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} = \frac{\sigma_{u,v}}{(\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial u_j}$$

となる。

$$\frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial u_j} = \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2})}{\partial u_j} \sqrt{\sigma_v^2} + \sqrt{\sigma_u^2} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_v^2})}{\partial u_j}$$

$$= \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\sigma_u^2}} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} \right) \sqrt{\sigma_v^2} + \sqrt{\sigma_u^2} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\sigma_v^2}} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial u_j} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} + \frac{1}{2} \frac{\sigma_u}{\sigma_v} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial u_j}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} \quad \left(\because \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial u_j} = 0 \right)$$

従って、

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} = \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} \quad (j = 1 \sim K)$$

となる。

同様に $i = 1 \sim M$ について

$$\frac{\partial \rho}{\partial v_i} = \frac{\partial}{\partial v_i} \left(\frac{\sigma_{u,v}}{\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}} \right) = \frac{\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_i} (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}) - \sigma_{u,v} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial v_i}}{\sigma_u^2 \sigma_v^2} = 0$$

$$\text{つまり} \quad \frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_i} (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2}) = \sigma_{u,v} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial v_i}$$

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_i} = \frac{\sigma_{u,v}}{(\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial v_i}$$

となる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2} \sqrt{\sigma_v^2})}{\partial v_i} &= \frac{\partial (\sqrt{\sigma_u^2})}{\partial v_i} \sqrt{\sigma_v^2} + \sqrt{\sigma_u^2} \frac{\partial (\sqrt{\sigma_v^2})}{\partial v_i} \\ &= \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\sigma_u^2}} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial v_i} \right) \sqrt{\sigma_v^2} + \sqrt{\sigma_u^2} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\sigma_v^2}} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_i} \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \frac{\sigma_u}{\sigma_v} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_i} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\sigma_u}{\sigma_v} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_i} \quad \left(\because \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial v_i} = 0 \right) \end{aligned}$$

従って、

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_i} = \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_i} \quad (i = 1 \sim M)$$

となる。

$$\begin{aligned}
\sigma_u^2 &= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i (u_j - \bar{u})^2 \\
&= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i u_j^2 \quad (\because \bar{u} = 0)
\end{aligned}$$

なので、 $j' = 1 \sim K$ について

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_{j'}} &= \frac{\partial}{\partial u_{j'}} \left(\frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i u_j^2 \right) \\
&= \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial u_{j'}} \left(\sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i u_j^2 \right) \\
&= \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial u_{j'}} \left(\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j^2 \right) \\
&= \frac{1}{T} \left(\sum_{i=1}^M n_i \sum_{j=1}^K x_{i,j} \frac{\partial u_j^2}{\partial u_{j'}} \right) \\
&= \frac{1}{T} \left(2u_{j'} \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j'} \right)
\end{aligned}$$

改めて

$$\frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} = \frac{1}{T} \left(2u_j \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j} \right)$$

となる。

まず $\partial \sigma_{u,v} / \partial u_j$ ($j = 1 \sim K$) を変形する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} &= \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \frac{\partial \sigma_u^2}{\partial u_j} \\ &= \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(\frac{1}{T} 2u_j \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j} \right) \\ &= \frac{1}{T} \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(u_j \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j} \right) \end{aligned}$$

一方

$$\sigma_{u,v} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i u_j v_i$$

であるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_{j'}} &= \frac{\partial}{\partial u_{j'}} \left(\frac{1}{T} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j v_i \right) \\ &= \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K \frac{\partial}{\partial u_{j'}} (x_{i,j} n_i u_j v_i) \\ &= \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M x_{i,j'} n_i v_i \end{aligned}$$

となり、改めて

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial u_j} = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i v_i$$

したがって、 $j = 1 \sim K$ について

$$\sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i v_i = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(u_j \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j} \right)$$

となる。

次に $\partial\sigma_{u,v}/\partial v_i$ ($i = 1 \sim M$) を変形する。

$$\sigma_{u,v} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i u_j v_i \quad \text{であった。}$$

$$\sigma_v^2 = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M n_i m_i (v_i - \bar{v})^2 = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^M n_i m_i v_i^2 \quad (\because \bar{v} = 0)$$

なので、

$$\frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_{i'}} = \frac{\partial}{\partial v_{i'}} \left(\frac{1}{T} \sum_{i=1}^M n_i m_i v_i^2 \right) = \frac{1}{T} n_{i'} m_{i'} 2v_{i'}$$

となり、改めて

$$\frac{\partial \sigma_v^2}{\partial v_i} = \frac{2}{T} n_i m_i v_i$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_{i'}} &= \frac{\partial}{\partial v_{i'}} \left(\frac{1}{T} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j v_i \right) \\ &= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial v_{i'}} (x_{i,j} n_i u_j v_i) \\ &= \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K x_{i',j} n_{i'} u_j \end{aligned}$$

となり、改めて

$$\frac{\partial \sigma_{u,v}}{\partial v_i} = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j$$

$$\frac{1}{T} \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j = \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} \frac{2}{T} n_i m_i v_i = \frac{1}{T} \rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} n_i m_i v_i$$

したがって、 $i = 1 \sim M$ について

$$\sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j = \rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} (v_i n_i m_i)$$

となる。

改めてまとめると、

$$\bullet j = 1 \sim K \quad \sum_{i=1}^M x_{i,j} n_i v_i = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} (u_j \sum_{i=1}^M n_i x_{i,j}) \quad (1)$$

$$\bullet i = 1 \sim M \quad \sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j = \rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} (v_i n_i m_i) \quad (2)$$

となる。

(2) より $i = 1 \sim M$ について、

$$v_i = \frac{\sum_{j=1}^K x_{i,j} n_i u_j}{\rho \frac{\sigma_u}{\sigma_v} n_i m_i} = \frac{\sigma_v \sum_{j=1}^K x_{i,j} u_j}{\rho \sigma_u m_i}$$

この v_i を(1)に代入する。

$k = 1 \sim K$ について

$$\sum_{i=1}^M x_{i,k} n_i v_i = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(u_k \sum_{i=1}^M n_i x_{i,k} \right)$$

$$\sum_{i=1}^M x_{i,k} n_i \frac{\sigma_v \sum_{j=1}^K x_{i,j} u_j}{\rho \sigma_u m_i} = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(u_k \sum_{i=1}^M n_i x_{i,k} \right)$$

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K x_{i,k} n_i \frac{\sigma_v x_{i,j} u_j}{\rho \sigma_u m_i} = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_u} \left(u_k \sum_{i=1}^M n_i x_{i,k} \right)$$

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K \frac{n_i}{m_i} x_{i,k} x_{i,j} u_j = \rho^2 u_k \left(\sum_{i=1}^M n_i x_{i,k} \right) \quad (3)$$

ここで

$$b_k \equiv \sum_{i=1}^M n_i x_{i,k}, \quad z_k \equiv \sqrt{b_k} u_k \quad (z_j \equiv \sqrt{b_j} u_j)$$

$$c_{k,j} \equiv \frac{1}{\sqrt{b_k} \sqrt{b_j}} \sum_{i=1}^M \frac{n_i}{m_i} x_{i,k} x_{i,j}$$

と置くと (3) は 以下のようにになる。

$k = 1 \sim K$ について

(3) の左辺 :

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^K \frac{n_i}{m_i} x_{i,k} x_{i,j} u_j \\
&= \sum_{j=1}^K \left(\sum_{i=1}^M \frac{n_i}{m_i} x_{i,k} x_{i,j} \right) u_j \\
&= \sum_{j=1}^K \left(\sqrt{b_k} \sqrt{b_j} c_{k,j} \right) u_j \\
&= \sum_{j=1}^K \sqrt{b_k} c_{k,j} \left(\sqrt{b_j} u_j \right) \\
&= \sqrt{b_k} \sum_{j=1}^K c_{k,j} z_j
\end{aligned}$$

(3) の右辺 :

$$\begin{aligned}
&= \rho^2 u_k \left(\sum_{i=1}^M n_i x_{i,k} \right) \\
&= \rho^2 \frac{1}{\sqrt{b_k}} z_k b_k \\
&= \sqrt{b_k} \rho^2 z_k
\end{aligned}$$

結局以下の式になる。 $k = 1 \sim K$ について、以下となる。

$$\sum_{j=1}^K c_{k,j} z_j = \rho^2 z_k$$

すなわち、以下の固有値問題を解くことになる。

$$\begin{bmatrix} c_{1,1} & \cdots & c_{1,K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{K,1} & \cdots & c_{K,K} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_K \end{pmatrix} = \rho^2 \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_K \end{pmatrix}$$

求めるものは、1 以外で最大の固有値と固有ベクトル $\{z_k\}$ を計算する。

目的の $\{u_j\} (j = 1 \sim K)$ は $u_j = \frac{1}{\sqrt{b_j}} z_j$ で求まる。

また、 $\{v_i\} (i = 1 \sim M)$ は $v_i = \frac{\sigma_v \sum_{j=1}^K x_{i,j} u_j}{\rho \sigma_u m_i}$ で求められるが、

$\{v_i\}$ のスケールは一意でなく相対的なものなので、 $\frac{\sigma_v}{\rho \sigma_u} = 1$ としても

問題ない。従って、 $v_i = \frac{\sum_{j=1}^K x_{i,j} u_j}{m_i}$ とする。

上記で求めた 1 次元の数量化では、データの説明が十分でない場合、2 次元の数量化を行う。これを解くには、上記の固有値問題の 2 番目に大きい固有値の固有ベクトルを求めれば良い。それでも、十分でなければ、3 番目に大きい固有値の固有ベクトルというように計算する。