

分散共分散行列の階数について

変量数 P 、データ数 n のデータの分散共分散行列について説明する。
得られた標本データを以下のように表現する。

$$[X] = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,P} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,P} \end{bmatrix}$$

変量ごとの平均ベクトルを以下のように表現する。

$$[\mu] = \begin{Bmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_P \end{Bmatrix} = \frac{1}{n} \begin{Bmatrix} \sum_{i=1}^n x_{i,1} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_{i,p} \end{Bmatrix}$$

変量ごとに平均ベクトルを引いた行列 Y を以下のように表現する。

$$[Y] = \begin{bmatrix} x_{1,1} - \mu_1 & \cdots & x_{1,P} - \mu_P \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n,1} - \mu_1 & \cdots & x_{n,P} - \mu_P \end{bmatrix}$$

分散共分散行列 V は以下のように表現できる。

$$[V] = \frac{1}{n} [Y]^t [Y] \quad \text{or} \quad \frac{1}{n-1} [Y]^t [Y]$$

一般に、次が成り立っている。

行列 A を $m \times n$ 行列、 B を $n \times p$ 行列 とすると、

$$\text{rank}(A) \leq \min(m, n)$$

$$\text{rank}(AB) \leq \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B))$$

$$\text{rank}(A) = \text{rank}(A^t)$$

なので、

$$\begin{aligned} \text{rank}(V) &= \text{rank}(Y^t Y) \leq \min(\text{rank}(Y^t), \text{rank}(Y)) \\ &= \text{rank}(Y) \end{aligned}$$

となり $\text{rank}(Y) < p$ ならば、 $\text{rank}(V) < p$ となる。

したがって、 $n < p$ ならば、分散共分散行列 V は特異となる。