ベクトル、行列演算と CAの数理 (その1)

ver1.5 2025/09/04 ver1.0 2023/09/06

kazuo.fujimoto2007@gmail.com 藤本一男

履歴

- ・2025/09/04 ver1.5 計量分析セミナー2025夏用に補足
- ・2023/09/06 ver1.0 計量分析セミナー2023夏用に作成

CA/MCAの数理のコアにあるもの

- ・2元表の残差行列を特異値分解(SVD)
- そこから得られた3つの行列と元のデータ行列の周辺度数割合 (質量)の平方根を組み合わせて、基本的な統計量が得られます。
 - ・生成される空間の座標軸とそれが体現する分散(慣性)。
 - ・その空間内に位置する行変数、列変数の座標。
- ・こうして、もともとのデータがもっていた行や列の変数カテゴリ(プロファイル・ベクトル)は、生成された座標軸を「変数」とした空間に配置されます(数量化)。

標準化残差行列の特異値分解SVD

対応分析の核! 期待値 $\mathbf{S} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{P} - \mathbf{r} \mathbf{c}^\mathsf{T})$ 残差 列周辺度数の平方根 行周辺度数の平方根 を要素とした対角行列 を要素とした対角行列 標準化

2 x 2 行列を例にやって みるとわかります。

Rのコードで書くのもほぼ 同じです。

自分用のCA functionを 作 れます!

行列演算の基本パターン

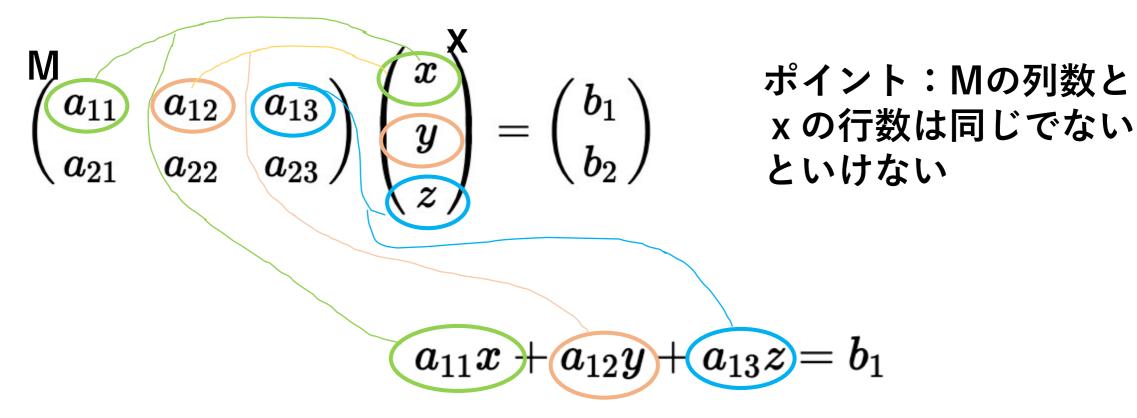
$$egin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} egin{pmatrix} x \ y \ z \end{pmatrix} = egin{pmatrix} b_1 \ b_2 \end{pmatrix}$$
 . In stance z in z

$$egin{aligned} a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z &= b_1 \ a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z &= b_2 \end{aligned}$$

を行列表示したもの。

$$M \times X = b$$

行列の計算ルール 1行目



二行目も同様に計算できる。

Mの行を増やしていっても列数がXの列数と同じなら行が増えるだけ。

$$egin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \ a_{21} & a_{22} & a_{23} \ a_{31} & a_{32} & a_{33} \ a_{41} & \ldots & \ldots \ a_{51} & \ldots & \ldots \ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} \ \end{pmatrix} egin{pmatrix} x \ a_{21}x + a_{12}y + a_{13}z = b_1 \ a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z = b_2 \ a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z = b_3 \ a_{41}x + a_{42}y + a_{43}z = b_4 \ a_{51}x + a_{52}y + a_{53}z = b_5 \ \ldots & \ldots \ a_{n1}x + a_{n2}y + a_{n3}z = b_n \ \end{pmatrix}$$

練習問題:平方和、総和

$$(x,y,z) \left(egin{array}{c} x \ y \ z \end{array}
ight) = x^2 + y^2 + z^2$$

$$(1,1,1) \left(egin{array}{c} x \ y \ z \end{array}
ight) = x+y+z$$

Xを要素、x,y,zのベクトルとすると (X^t はXの転置)

$$X^tX = x^2 + y^2 + z^2$$

要素(x,y,z)の平方 和

$$1^t X = x + y + z$$

要素(x,y,z)の総 和

対角行列を右から/左からかける

対角行列: 対角部分にだけ値がある正方 行列 行数と列数が同じ。正方 形)

$$egin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \ 0 & a_2 & 0 \ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}$$

再掲:標準化残差行列の特異値分解SVD _{期待値} インドの核!

期待値 $\mathbf{S} = \mathbf{D}_r^{-rac{1}{2}} (\mathbf{P} -$ 残差 列周辺度数の平方根 行周辺度数の平方根 を要素とした対角行列 を要素とした対角行列 標準化

れます!

作

同じです。

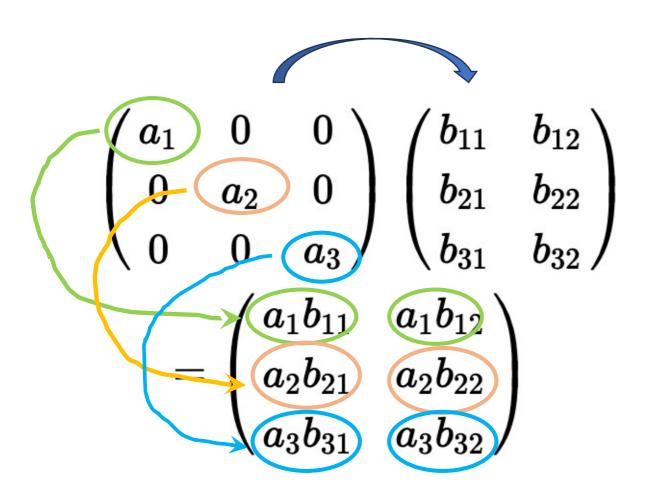
2 x 2行列を例にやって

Rのコードで書くのもほぼ

自分用のCA functionを

みるとわかります。

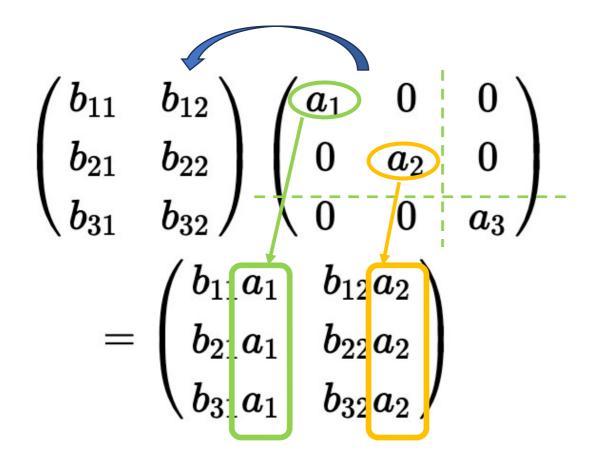
行列bに対角行列aを左からかける



これは、bの<u>行ごと</u>に a_1 , a_2 , a_3 をかける処理

ある行列(ここではb) の<u>行ごとにある値をか</u> けるときは、かける要 素をもった対角行列を 左からかける。

対角行列を右からかける



行列bの列ごとにある 値をかける演算。 ただし、左にある行列 (b) の列数とかける 対角行列の列数が同じ であること。この例で は、a₁とa₂しか使わ れてない。計算するときは、 2x2行列にしておかないとエラー。

表記のルール

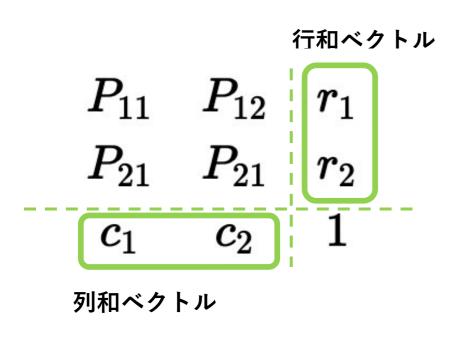
- 対角行列は D で表します。
- 対角要素が α_1 、 α_2 、… α_n のときは、 D_{α}
- 対角要素が、 $\frac{1}{\sqrt{\alpha_1}}$, $\frac{1}{\sqrt{\alpha_2}}$, \cdots $\frac{1}{\sqrt{\alpha_n}}$, の時は、 $D_{\alpha}^{\frac{1}{2}}$
- $A^{\frac{1}{2}}$ tt, \sqrt{A}
- • A^{-1} $lt, \frac{1}{A}$

ここまでくれば!

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{P} - \mathbf{r} \mathbf{c}^\mathsf{T}) \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}}$$

- ・Sが標準化残差行列になることがわかるようになります。あと少し。
- Pは、入力行列Mを総数Nで除した行列(対応行列)
- ・rはPの行和、cはPの列和
- ・rcTはPの期待値
- $\cdot D_r^{-1/2}$ は 行和ベクトルの平方根を要素とした対角行列
- $\cdot D_c^{-1/2}$ は 列和ベクトルの平方根を要素とした対角行列

Mを2x2の行列Pとして確認します



$$egin{align} D_r &= diag(r) = egin{pmatrix} r_1 & 0 \ 0 & r_2 \end{pmatrix} \ D_c &= diag(c) = egin{pmatrix} c_1 & 0 \ 0 & c_2 \end{pmatrix} \ D_r^{-rac{1}{2}} &= egin{pmatrix} \sqrt{rac{1}{r_1}} & 0 \ 0 & \sqrt{rac{1}{r_2}} \end{pmatrix} \ D_c^{-rac{1}{2}} &= egin{pmatrix} \sqrt{rac{1}{c_1}} & 0 \ 0 & \sqrt{rac{1}{c_2}} \end{pmatrix} \end{array}$$

まず期待値「CT

- これをPから引いて、左からと右から対角行列をかけます。
- Pからこの期待値要素を引いたて、それを Z_{11} , Z_{12} , Z_{21} , Z_{22} に置き換えておきます。
- P_{11} - r_1c_1 ,,,, P_{22} - r_2c_2 と書いてもいいですが、ごちゃごちゃするので。

2x2行列で展開

7.1.1 期待值 rc^t

$$\begin{aligned} &rc^{t} \\ &= \begin{pmatrix} r_{1} \\ r_{2} \end{pmatrix} (c_{1}, c_{2}) \\ &= \begin{pmatrix} r_{1}c_{1} & , r_{1}c_{2} \\ r_{2}c_{1} & , r_{2}c_{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

7.1.2 残差(O_{ij} - O_{ij})

$$p - rc^{t}$$

$$\begin{split} & D_r^{-1/2}(p-rc^t) \ D_c^{-1/2} \\ & = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{r_1}}, 0, \\ 0, \frac{1}{\sqrt{r_2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_{11}, z_{12} \\ z_{21}, z_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{c_1}}, 0 \\ 0, \frac{1}{\sqrt{c_2}} \end{pmatrix} \\ & = \begin{pmatrix} \frac{z_{11}}{\sqrt{r_1 c_1}} & , \frac{z_{12}}{\sqrt{r_1 c_2}} \\ \frac{z_{21}}{\sqrt{r_2 c_1}} & , \frac{z_{22}}{\sqrt{r_2 c_2}} \end{pmatrix} \end{split}$$

さきのSは以下のようになります

$$S=D_r^{-rac{1}{2}}(P-rc^t)D_c^{-rac{1}{2}}$$
ここで、 $(P-rc^t)=egin{pmatrix} z_{11} & z_{12} \ z_{21} & z_{22} \end{pmatrix}$ とおいて $=egin{pmatrix} \sqrt{rac{1}{r_1}} & 0 \ 0 & \sqrt{rac{1}{r_2}} \end{pmatrix}egin{pmatrix} z_{11} & z_{12} \ z_{21} & z_{22} \end{pmatrix}egin{pmatrix} \sqrt{rac{1}{c_1}} & 0 \ 0 & \sqrt{rac{1}{c_2}} \end{pmatrix}$

 $= \left(egin{array}{ccc} rac{z_{11}}{\sqrt{r_1c_1}} & rac{z_{12}}{\sqrt{r_1c_2}} \ rac{z_{21}}{\sqrt{r_2c_1}} & rac{z_{22}}{\sqrt{r_2c_2}} \end{array}
ight)$

標準化残差Sは、 (観測値-期待値)/√期待 値 です。

カイ2乗値、t-値との関係

- すべてのセルの標準化残差を2乗して合計したものが、カイ2 錠値。
- このセルの標準化残差($\frac{\mathbf{p_{ij}}-r_ic_j}{\sqrt{r_ic_j}}$)の形は、

t 検定の点低統計量である $\frac{x_i-\mu}{\sigma}$ の形。

(平均μとxの差を、標準偏差(分散の平方根)で割ってる)

標準化残差の分母:期待値の平方根

- •標準化残差
 - (観測値-期待値)/標準偏差(=分散の平方根)
 - ・ポアソン分布で考えている。 分散=期待値

プロファイルは同じ相対的な度数尺度のものであるが、PCA での状況と同様 に、それぞれ分散を補正する必要がある。より高い平均を有する度数の集合がよ り低い平均のものよりも高い分散を有するという現象は、度数変数のための標準 的な統計的分布の1つであるポ**アソン分布**として具体化される。ポアソン分布の 特徴は、その分散がその平均と等しいことである。したがって、平均の平方根が 標準偏差の代わりであるため、期待(平均)度数の平方根で除算して度数を変換 することが、データを標準化する1つの方法になる。しかし、それは標準化する 唯一の方法というわけではない。では、どのような理由で χ^2 距離が特別なのだ ろうか? 分布の同等性原理(the principle of distributional equivalence)に 従うことと、CAに行と列の処理の間の対称性の特性を与えること以外にも、 χ^2 距離を用いることには多くの利点がある。 χ^2 距離を用いることのより専門的な 理由を、多項分布と呼ばれる度数データの多変量統計分布の特性に見出すことが できるのだが、この件については、エピローグ、付録E(309~310ページ)で再 び議論しよう。

> Greenacre2017=2020:39での解説 「χ²距離の正当性」

次は、Sを特異値分解SVDします

- ・特異値分解SVDの説明をします。
- ・ある行列(正方でなくてもOK)を特異値分解すると三つの行列にわけられます。左行列(U)対角行列(D)右行列(V)
- $S = u \mathfrak{D}_a v^{\jmath}$
 - ・ \mathfrak{D}_{α} は、特異値 α_1 、 α_2 、 α_3 、 …を要素とした対角行列。
 - uは行成分、vは列成分。
- 固有値 λ (慣性=分散) =特異値 α^2
- ・この特異値分解がCA/MCA計算の核に位置します。
 - CA/MCAだけでなく、前処理+SVD+後処理の形で多変量解析の「一般解」とも呼べるような説明がGreenacre 1984のAppendix Aにあります。 (小野滋さんの翻訳あり: http://elsur.jpn.org/reading_notes/Greenacre1984.p

SVDによる次元縮減

SVD:特異値分解の絵解き

- ・SVDによって行列Xは以下のように三つの部分に分解される
- U 左行列、Dα基本構造(特異値の対角行列)、V 右行列

$$X_{(n\times m)} = U_{(n\times m)}d_{(m\times m)}V_{(m\times m)}^T = UdV_{(n\times m)}^T$$

```
\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & \dots & U_{1m} \\ U_{21} & U_{22} & \dots & U_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{n1} & U_{n2} & \dots & U_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1m} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n1} & V_{n2} & \cdots & V_{mm} \end{bmatrix}
```

具体的にどうなるか

元の行列を特異値分解(SVD)してみる。

$$\begin{bmatrix} 2 & 8 & 10 \\ 5 & 3 & 1 \\ 4 & 9 & 15 \\ 20 & 10 & 5 \\ 15 & 18 & 9 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} .287 & -.477 & -.066 \\ .144 & .152 & .029 \\ .398 & -.641 & .454 \\ .557 & .577 & .535 \\ .654 & .075 & -.709 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 37.948 & 0 & 0 \\ 0 & 14.700 & 0 \\ 0 & 0 & 4.888 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} .628 & .674 & .389 \\ .623 & -.137 & -.770 \\ .465 & -.726 & .506 \end{bmatrix}$$

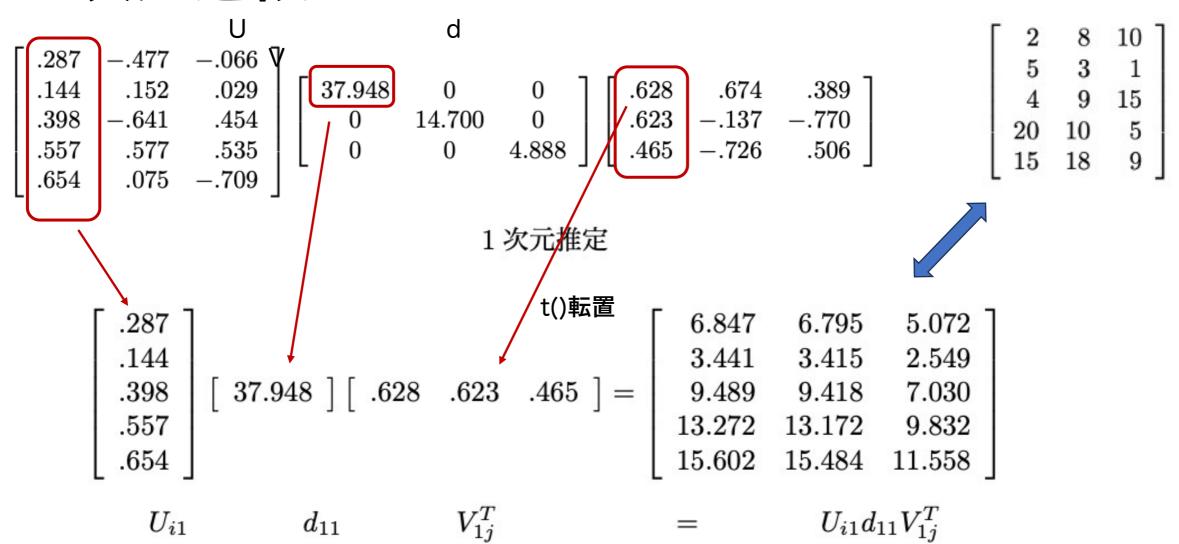
$$\begin{bmatrix} 37.948 & 0 & 0 \\ 0 & 14.700 & 0 \\ 0 & 0 & 4.888 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} .628 & .674 & .389 \\ .623 & -.137 & -.770 \\ .465 & -.726 & .506 \end{bmatrix}$$

この対角に並んでいる数値が特異値lpha。 これが、元の行列の「情報」 (構造)を表現 している。

事例は、"Metric Scaling"SAGEか b

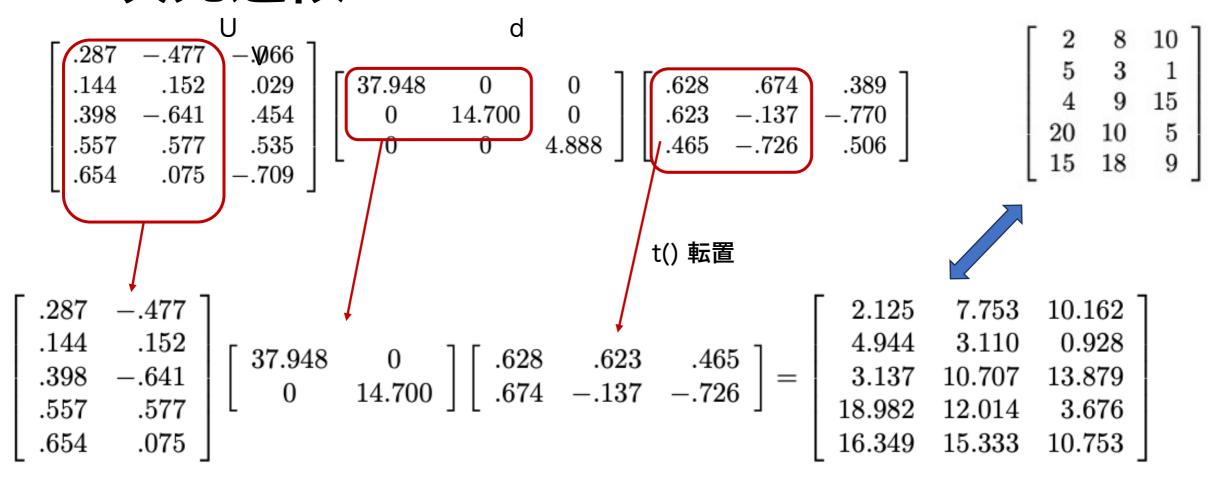
次元縮減とは、体現している情報を その大きな順に採用していくこと。 体現している情報が小さい次元は捨てる。

1次元近似



2025/9/4

2次元近似



 U_2

 d_2

 V_2^T

 $r_{2}^{T} =$

 $U_2 d_2 V_2^T$

2025/9/4

ベクトル、行列演算とCAの数理

次元縮減からの復元した行列の比較

元のデータ

 $\begin{bmatrix} 2 & 8 & 10 \\ 5 & 3 & 1 \\ 4 & 9 & 15 \\ 20 & 10 & 5 \\ 15 & 18 & 9 \end{bmatrix}$

1次元近似

 6.847
 6.795
 5.072

 3.441
 3.415
 2.549

 9.489
 9.418
 7.030

 13.272
 13.172
 9.832

 15.602
 15.484
 11.558

2次元近似

$\begin{bmatrix} 2.125 \end{bmatrix}$	7.753	10.162
4.944	3.110	0.928
3.137	10.707	13.879
18.982	12.014	3.676
16.349	15.333	10.753

CAは、元行列をSVDするわけではない

- ・詳しくは、Greenacre2017=2020の付録AとBにある。
- ・標準化残差行列Sをつくり、それをSVDする。

● CA Step 1 — 標準化残差行列Sを計算する:

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{P} - \mathbf{r} \mathbf{c}^\mathsf{T}) \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}} \tag{A.4}$$

● CA Step 2 — SのSVDを計算する:

$$\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{D}_{\alpha}\mathbf{V}^{\mathsf{T}} \quad \mathsf{ZZT} \quad \mathbf{U}^{\mathsf{T}}\mathbf{U} = \mathbf{V}^{\mathsf{T}}\mathbf{V} = \mathbf{I} \tag{A.5}$$

ここで、 \mathbf{D}_{α} は、(正の) 特異値の降順 $(\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \cdots)$ の対角行列である。

CA Step 3 — 行の標準座標Φ:

$$\mathbf{\Phi} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U} \tag{A.6}$$

CA Step 4 — 列の標準座標 Γ:

$$\Gamma = \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}} \mathbf{V} \tag{A.7}$$

● CA Step 5 — 行の主座標 F:

● CA Step 6 — 列の主座標 G:

$$\mathbf{G} = \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}} \mathbf{V} \mathbf{D}_{\alpha} = \mathbf{\Gamma} \mathbf{D}_{\alpha} \tag{A.9}$$

• CA Step 7 — 主慣性 λ_k :

$$\lambda_k = \alpha_k^2, \quad k = 1, 2, \dots, K$$
 $22\% \quad K = \min\{I - 1, J - 1\}$ (A.10)

付録A:対応分析の理論 p244-245 Rによる実際の計算は、付録B p262

$$\mathbf{F} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U} \mathbf{D}_{\alpha} = \mathbf{\Phi} \mathbf{D}_{\alpha}$$

ベクトル・行列表記でCAを実行

• 対応行列:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{n}\mathbf{N} \tag{A.1}$$

以下の表記が使われる (第4章の末尾も参照)。

行と列の質量:

$$r_i = \sum_{j=1}^J p_{ij}$$
 $c_i = \sum_{i=1}^I p_{ij}$ (A.2) すなわち、 $\mathbf{r} = \mathbf{P1}$ $\mathbf{c} = \mathbf{P}^\mathsf{T} \mathbf{1}$

● 行と列の質量の対角行列:

$$\mathbf{D}_r = \operatorname{diag}(\mathbf{r})$$
 および $\mathbf{D}_c = \operatorname{diag}(\mathbf{c})$ (A.3)

2025/9/4

特異値分解(singular value decompression: SVD)を使用した行と列プロファイルの座標を得るための計算アルゴリズムは以下のとおりである。

● CA Step 1 — 標準化残差行列Sを計算する:

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{P} - \mathbf{r} \mathbf{c}^\mathsf{T}) \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}}$$
(A.4)

● CA Step 2 — SのSVDを計算する:

$$\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{D}_{\alpha}\mathbf{V}^{\mathsf{T}} \quad \mathsf{ZZC} \quad \mathbf{U}^{\mathsf{T}}\mathbf{U} = \mathbf{V}^{\mathsf{T}}\mathbf{V} = \mathbf{I} \tag{A.5}$$

ここで、 \mathbf{D}_{α} は、(正の) 特異値の降順 $(\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \cdots)$ の対角行列である。

CA Step 3 — 行の標準座標 Φ:

$$\mathbf{\Phi} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U} \tag{A.6}$$

CA Step 4 — 列の標準座標 Γ:

$$\Gamma = \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}} \mathbf{V} \tag{A.7}$$

● CA Step 5 — 行の主座標 F:

$$\mathbf{F} = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U} \mathbf{D}_{\alpha} = \mathbf{\Phi} \mathbf{D}_{\alpha} \tag{A.8}$$

● CA Step 6 — 列の主座標 G:

$$\mathbf{G} = \mathbf{D}_c^{-\frac{1}{2}} \mathbf{V} \mathbf{D}_{\alpha} = \mathbf{\Gamma} \mathbf{D}_{\alpha} \tag{A.9}$$

• CA Step 7 — 主慣性 λ_k :

$$\lambda_k = \alpha_k^2, \quad k = 1, 2, \dots, K$$
 $22\% \quad K = \min\{I - 1, J - 1\}$ (A.10)

式 (A.6) ~ (A.9) の座標行列の行は、場合に応じてもとの表の行または列に対応し、これらの行列の列は主軸、つまり次元に対応している。その次元は $\min\{I-1,J-1\}$ 、すなわち、行または列の数のうちの小さいほうより 1 少ない数である。主座標と標準の座標がどのようにスケーリングされているかに注目してほしい。

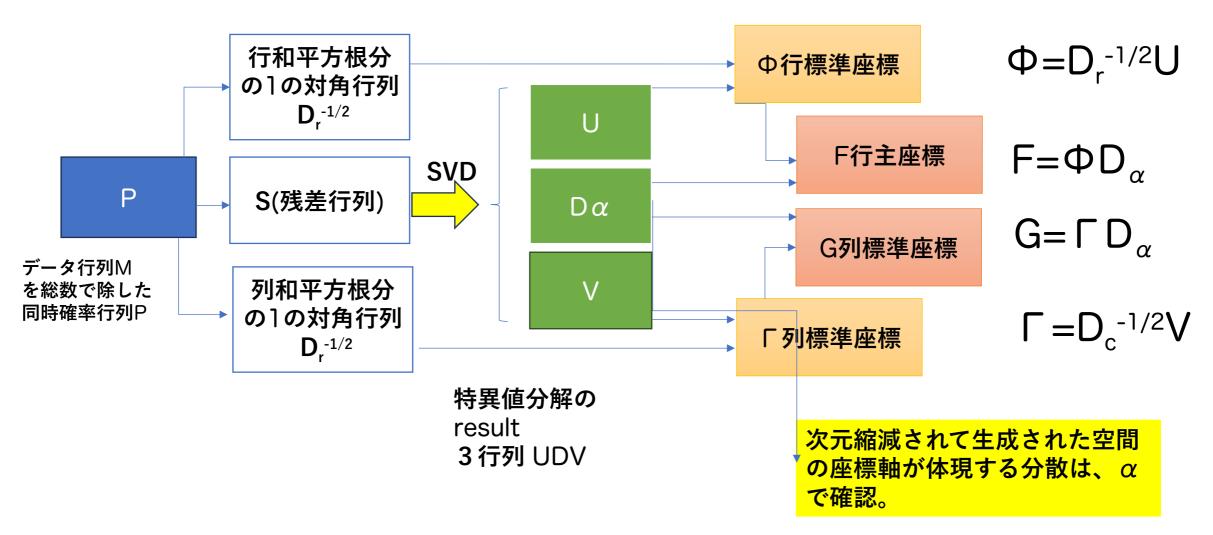
$$\mathbf{F}\mathbf{D}_r\mathbf{F}^\mathsf{T} = \mathbf{G}\mathbf{D}_c\mathbf{G}^\mathsf{T} = \mathbf{D}_\lambda \tag{A.11}$$

$$\mathbf{\Phi} \mathbf{D}_r \mathbf{\Phi}^\mathsf{T} = \mathbf{\Gamma} \mathbf{D}_c \mathbf{\Gamma}^\mathsf{T} = \mathbf{I} \tag{A.12}$$

実は、こういう表記、あまり見ない

- ・東工大 前川真一先生、「ベクトルと行列の演算について」
- ・現在、ネットにはない。
 - http://mayekawa.in.coocan.jp/titech/docs/matll.pdf
- ・これは包括的な解説書。
- ・もしくは、これが(英語圏での)基本教科書?
 - Carrol, Green, 1997, "Mathematical Tools for Applied Multivariate Analysis", Academic Press.

SVDのresultからなにが得られるか



SVDの結果得られるもの

- ・生成される空間の座標軸が体現する慣性(分散)の大きさ
- ・行変数、列変数のその生成された空間の中での位置(座標)
- ・この値をもとに、CA/MCAに関する統計量は計算されます。
 - ・寄与率CTR(軸に対する寄与)
 - ・平方相関COS2(あるポイントとある軸の相関)

もっと単純化すると…

- ・標準化残差行列SをSVDすることで
 - ・行空間と列空間という二つの空間が生成される。
- CAの場合
 - ・行変数のカテゴリポイントの座標(主座標、標準座標)
 - ・列変数のカテゴリポイントの空間(主座標、標準座標)
- MCAの場合
 - ・個体ポイントの空間(主座標、標準座標)
 - ・列変数カテゴリポイントの空間(主座標、標準座標)
- ・縮減された座標軸が体現する分散
 - ・慣性率として確認できる。

CA/MCAを使うためにここを押さえる

- ・もちろん、毎回数式を追う必要はないです。
- ・元の2元表がCA/MCA処理によってなにが生成されたのか、を理解すれば 結果の解釈はできます。
- ・生成された空間(行空間/列空間、個体空間/変数空間)の座標軸。
 - ・これから何軸まで見る必要があるか、という判定ができます。
- 各空間における、元のデータ(行ポイント、列ポイントと呼びます)の座標。
 - 空間内に、各ポイントが配置され、似たものは近くに、似てないものは遠くに、位 置します。
 - ・原点〇は、データの平均ポイント、つまり期待値の位置になります。
- ・新たな軸を「変数」として命名できます。
- ・これがresult解釈の基礎です。

この先は、実際にCAやMCAをやってresultをみてみます。

- ・参照するのは、PDFとして保存したhtmlファイルを使います。
- これを生成したデータファイル、Rmarkdownは配布してあります。