V-3-2. 分散・共分散行列の構造

V-3-1 で学んだように、分散共分散行列と相関行列の関係は、分散行列を使って次のように表せます。

$$\boldsymbol{V^{\frac{1}{2}}\rho V^{\frac{1}{2}} = \Sigma}$$

$$\boldsymbol{V^{-\frac{1}{2}}\Sigma V^{-\frac{1}{2}} = \rho}$$

しかし、これらの関係を空間幾何学的に理解することは難しいかもしれません。それは多次元になると空間の認識が難しいということに加えて、式の計算も複雑になるからです。しかし、２次元空間ならば難しくはありません。

２次の相関行列は次のようになっています。相関は２つのベクトルの角度のコサインだから次のように表せます。

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} 1 & \delta_{12} \\ \delta_{21} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cos\theta \\ \cos\theta & 1 \end{pmatrix}$$

$$\because \sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}\cos\theta = \sigma_{12}$$

$$\delta_{12} = \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}} = \cos\theta$$

$$\theta\text{: ２つのベクトルの角度}$$

固有値と固有ベクトルを求めます。

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & \cos\theta \\ \cos\theta & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(1-\lambda)^2 - \cos^2\theta = 0$$

$$\lambda = 1 \pm \cos\theta$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \cos\theta \\ \cos\theta & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = (1+\cos\theta)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 + x_2\cos\theta = x_1 + x_1\cos\theta$$

$$x_2 + x_1\cos\theta = x_2 + x_2\cos\theta$$

$$x_1 = x_2$$

$$\boldsymbol{e_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \cos\theta \\ \cos\theta & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = (1-\cos\theta)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 + x_2\cos\theta = x_1 - x_1\cos\theta$$

$$x_2 + x_1\cos\theta = x_2 - x_2\cos\theta$$

$$x_1 = -x_2$$

$$\boldsymbol{e_2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

これらを使ってスペクトル分解すると次のようになります。

$$\boldsymbol{\rho} = (1+\cos\theta)\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^{\boldsymbol{T}} + (1-\cos\theta)\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^{\boldsymbol{T}}$$

べき乗の公式を使って、

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1+\cos\theta}\,\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^{\boldsymbol{T}} + \sqrt{1-\cos\theta}\,\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^{\boldsymbol{T}}$$

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1+\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} + \sqrt{1-\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1+\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} + \sqrt{1-\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1+\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \sqrt{1-\cos\theta}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} \\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{x}$$

$$\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}} = \left(\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{x}\right)^{T}$$

$$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} \\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \left(\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}\right)x_1 + \left(\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}\right)x_2 \\ \left(\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}\right)x_1 + \left(\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}\right)x_2 \end{pmatrix}$$

図 61 の左側の円は半径 1 の円です。この半径に長さが一致する水平軸上のベクトル$\boldsymbol{A}$: $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$と

これを$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}$で変換したベクトル $\boldsymbol{\acute{A}} = \boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{A}$について考えます。

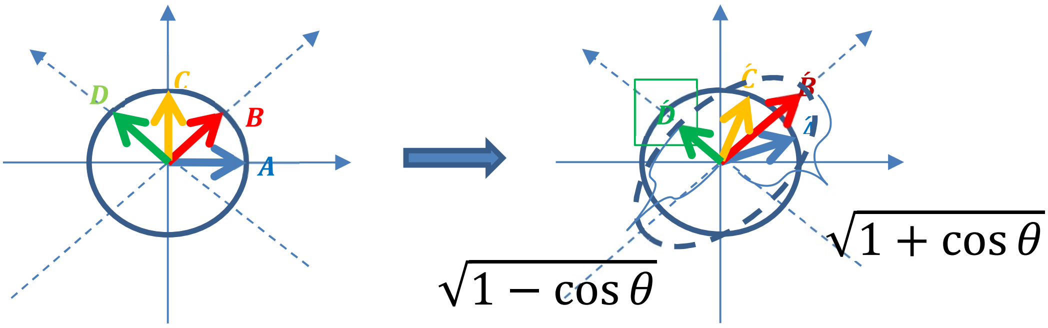

図 61. $\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}$による円の変形

$$\acute{\boldsymbol{A}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} \\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}}{2} \\ \left(\dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$|\acute{\boldsymbol{A}}| = \sqrt{\left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right)^{\mathbf{2}} + \left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right)^{2}} = 1$$

ベクトル$\boldsymbol{A}$ を反時計方向に$\frac{\pi}{4}$回転したベクトル $\boldsymbol{B}$:$\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$とそれを$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}$で変換した行列

$\acute{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{B}$について考えると

$$\acute{\boldsymbol{B}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} \\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{2}} \\ \dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|\acute{\boldsymbol{B}}| = \sqrt{\left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{2}}\right)^{\mathbf{2}} + \left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{2}}\right)^{2}} = \sqrt{1+\cos\theta}$$

垂直軸上のベクトル $\boldsymbol{C}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ と $\acute{\boldsymbol{C}}=\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{C}$については

$$\boldsymbol{C}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}\\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\\ \left(\dfrac{\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right)\end{pmatrix}$$

$$\left|\acute{\boldsymbol{C}}\right|=\sqrt{\left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right)^{\boldsymbol{2}}+\left(\frac{\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}}{2}\right)^{2}}=1$$

さらに反時計方向に$\frac{\pi}{4}$回転したベクトル $\boldsymbol{D}$:$\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$とその変換ベクトル$\acute{\boldsymbol{D}}=\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{D}$については

$$\acute{\boldsymbol{D}}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta}\\ \sqrt{1+\cos\theta}-\sqrt{1-\cos\theta} & \sqrt{1+\cos\theta}+\sqrt{1-\cos\theta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}-\dfrac{\sqrt{1-\cos\theta}}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{\sqrt{1-\cos\theta}}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$\left|\acute{\boldsymbol{D}}\right|=\sqrt{\left(\frac{\sqrt{1-\cos\theta}}{\sqrt{2}}\right)^{\boldsymbol{2}}+\left(-\frac{\sqrt{1-\cos\theta}}{\sqrt{2}}\right)^{2}}=\sqrt{1-\cos\theta}$$

結論を要約すると、相関行列の平方根 $\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}$ は、図 61 の固有ベクトル$\boldsymbol{t}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$上のベクトルの長さを固有値の平方根 $\sqrt{1+\cos\theta}$ 倍の長さに拡大し、それと直交する固有ベクトル$\boldsymbol{t}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$上のベクトルの長さを固有値の平方根$\sqrt{1-\cos\theta}$倍に拡大（実際には縮小）するということです。これは、固有ベクトルと固有値の定義を考えれば当然のことです。多次元になるともう少し複雑ですが、2 次元平面に直交する平面の投影図が楕円になります。
分散行列の行列は対角行列ですから、その平方根を使って次のような変換も可能です。

$$\boldsymbol{X} = \mathbf{V}^{-\frac{1}{2}}\grave{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\sigma_{22}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \acute{X}_1 \\ \acute{X}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}}\acute{X}_1 \\ \frac{1}{\sqrt{\sigma_{22}}}\acute{X}_2 \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\rho}^{\frac{1}{2}}$ や $\mathbf{V}^{-\frac{1}{2}}$を使えば、元のデータを直交する成分（因子）で表すことが出来ます。また、分散によって標準化できます。