VI-2-2.　多次元尺度構成法（MDS）

VI-2-2-1. 多次元尺度構成法とは何か

多次元尺度構成法（Multi-dimensional Scaling Method:MDS）の目的は主成分分析（PCA）と同じです。多次元尺度構成法も主成分分析も、データ間の関係を観察するために、多次元空間にデータを配置します。しかし、与えられるデータの形が違います。主成分分析では、一つのデータは２つ以上の測定項目で構成されています。主成分分析で、それぞれの項目の平均ベクトルを考えると、ベクトルの長さが標準偏差で、ベクター間の角度がアークコサインになって、データは、多次元空間上の線形結合によって表されます。多次元尺度構成法で与えられるデータは、調べようとするデータの転換の距離です。言葉の上では、この距離というのは、ユークリッド空間（直交空間）上の距離だけを意味しません。距離の定義を満たしていれば、すべての違いは距離として認識できます。その定義は次の通りです。

1. A から B の距離が B から A の距離と異ならないこと。
2. A から C の距離が、A から B の距離と B から C の距離の合計よりも長くないこと

ここでは、単純化のために、ユークリッド空間を前提にして説明を進めます。私たちは中学校で三角形の合同を習いました。二次元平面上に３点があった時、その三点からの距離がすべてわかっていれば、三次元空間上にもう一つの点を決めることが出来ます。この時、４つの点は三角錐を形成します。もちろん、特殊な場合には平面上にプロットされることもあります。同様に、5 つの点は４次元空間に置けます。理論的にはｎ個の点は、4-n-1 次元以下の空間に配置できます。実際に得られるデータは、限られた数の構成要素からなり、多くの次元は、誤差によって構成されていて、その方向の次元は押しつぶされています。そのような次元を無視すれば、限られた次元、理想的には２次元か３次元空間にデータを配置できます。これが、多次元尺度法の最も簡単な説明です。主成分分析では、沢山の測定項目があって、それぞれの測定項目のベクトルの間の角度を相関係数から求めます。そして、ベクトルの長さ（標準偏差）とベクトルの角度によって空間を構成します。これは、三角形の合同の証明を、二辺の長さとその間の角度で証明することに相当します。したがって、最大の次元数は測定項目の数pです。これに対して多次元尺度法では、距離だけで多次元空間を構成します。これは、三角形の合同を３辺の長さで証明することに相当します。データの形と計算過程が異なりますが、多次元尺度構成法と主成分分析の目的は同じです。

多次元尺度構成法は、生態学の分野で使われることが多いようです。それは、様々な違いが距離の条件を満たしていれば、データの構造がわかるからです。もちろん他の分野でも、多次元尺度構成法は使えます。

VI-2-2-1. 多次元尺度構成法の計算

VI-2-2-1-1. 多次元尺度法の問題設定

生物の分布生態の研究で良くやられるのは、２次元ないし３次元の空間にデータをプロットして、採集地点の違い、あるいは、種の違いを見ようとするものです。これらは、しばしば、採集地点や種の類型化に使われます。

表 41. 各採集地点の種組成(元データ).

	種 1	種 2	$\cdots$	種 m
採取地点 1	x_{11}	x_{12}	$\cdots$	x_{1m}
採集地点 2	x_{21}	x_{22}	$\cdots$	x_{2m}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
採集地点 n	x_{n1}	x_{n2}	$\cdots$	x_{nm}

私たちが作りたいのは、表 42 のような、二次元上の座標の表です。

表 42. 採集定点の座標の表

	Y_1(axis 1)	Y_2(axis 2)
地点 1	y_{11}	y_{12}
地点 2	y_{21}	y_{22}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
地点 n	y_{n1}	y_{n2}

すでにこれらは行列になっています。

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \\ \vdots & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} \end{pmatrix}$$

私たちは$\boldsymbol{A}$による変換でX からYを作りたいのです。

$$\boldsymbol{XA} = \boldsymbol{Y}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} \end{pmatrix}$$

つまり、正則でない連立方程式の最適解を求めるということです。理論的には、$\boldsymbol{Y}$を知っていれば、$\boldsymbol{A}$を求めることが出来ます。しかし、私たちは$\boldsymbol{Y}$を知りません。

たとえば、$\boldsymbol{Y}$が本当の 2 次元平面上の座標、たとえば、緯度経度のようなものだとします。そこで、2 点間の距離を計算しろと言われれば、中学生でもピタゴラスの定理を使って教理を計算します(ここでは、近似的な話をしています。地球の表面上の点間の正確な距離をピタガラスの定理で直接計算することはできません。地球の表面は曲率を持っていますから。ここでは地球の表面が平面だと仮定して最短距離を求めています。)。

表 43. 総当たり距離表

	Site 1	Site 2	$\cdots$	Site n
Site1	d_{11}	d_{12}	$\cdots$	d_{1n}
Site 2	d_{21}	d_{22}	$\cdots$	d_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
Site n	d_{n1}	d_{n2}	$\cdots$	d_{nn}

$d_{ii}=0$, （d_{ii}は同じ採集地点間の距離）$d_{ij}=d_{ji}$（距離の定義２）
これを総当たり距離行列で表すと次の通りです。

$$\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix} 0 & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & 0 & \cdots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

行列$\boldsymbol{D}$は対称行列で対角因子が０です。古典的な計量多次元尺度構成法は、この逆計算で与えられた$\boldsymbol{D}$から$\boldsymbol{Y}$を推定します。そんな計算は簡単だと考える人もいるかもしれません。まず、二つの点を結ぶ線分を引きます。その片方の点からある点までの距離を半径とする円を描きます。もう片方の点からその点までの距離を半径とする円をもう片方の点を中心にして描きます。その円周の交点が３番目の点の位置になります。次に４番目の点までの距離の球を３点それぞれから描き、３つの球が交差する点を４番目の点の位置とします。これを繰り返せば、最終的に(n-1)辞典空間にすべての点を位置づけることが出来ます。確かにそれで正しいのですが、それをやるためには、(n-1)次元までのコンパスを作らなくてはなりません。そんな便利な道具は世の中にありません。数学的な計算で描いてみるしかないでしょう。また、距離のデータが測定誤差を含んでいた場合、各点を正確に位置付けられませんから、最終的にはとても大きな誤差が出来てしまいます。そのため、誤差範囲を論ずることが出来ません。それでも、考え方としては悪くありません。この無邪気な発想を試してみます。

VI-2-2-1-2. 無邪気な発想の実行（余計な回り道）

理屈から言えば、そんな無邪気なことをやってみる必要はありませんが、多次元尺度構成法の各ステップが何をしているか意味がわかります。
一番有名なピタガラスの定理の具体例は次の式だと思います。

$$3^2+4^2=5^2$$

これを例に使います。
これは直角三角形です。これを座標上に位置づけろと言われると、何故か、すべての人が直角部分を座標の原点にして、他の角を水平軸と垂直軸に位置付けます。

$$\alpha(0,0),\qquad \beta(4,0),\qquad \gamma(3,0)$$

これらを行列で書くと次のようになります。

$$\boldsymbol{Y}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 4 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

この答えを見つけるのに頭は使いません。しかし、これは唯一解ではありません。これは、一つの可能解にすぎません。この解を解１とします。

$$\alpha'(-2,-1),\qquad \beta'(2,-1),\qquad \gamma'(-2.\ 2)$$

これも可能解の一つです。
確かめるために距離を計算しておきます。

$$d_{\alpha'\beta'}=(2-(-2),-1-(-1)=(4,0)$$
$$d_{\beta'\gamma'}=(-2-2,2-(-1)=(-4,3)$$

$$d_{\gamma'\alpha'} = (-2-(-2), -1-2) = (0, -3)$$
$$d_{\alpha'\beta'}{}^2 = 4^2$$
$$d_{\beta'\gamma'}{}^2 = (-4)^2 + 3^2 = 25 = 5^2$$
$$d_{\gamma'\alpha'}{}^2 = (-3)^2 = 3^2$$

これを解 2 とします。
次はどうでしょうか。

$$\alpha''\left(\frac{1}{2}-\sqrt{3}, -1-\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \qquad \beta''\left(\sqrt{3}+\frac{1}{2}, 1-\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \qquad \gamma''\left(-\sqrt{3}-1, -1+\sqrt{3}\ \right)$$

確かめてみます

$$d_{\alpha'\beta'}{}^2 = \left(\frac{1}{2}-\sqrt{3}-\left(\sqrt{3}+\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(-1-\frac{\sqrt{3}}{2}-\left(1-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\right)^2 = 12+4 = 4^2$$

$$d_{\beta'\gamma'}{}^2 = \left(\sqrt{3}+\frac{1}{2}-\left(-\sqrt{3}-1\right)\right)^2 + \left(1-\frac{\sqrt{3}}{2}-\left(-1+\sqrt{3}\right)\right)^2 = \left(2\sqrt{3}+\frac{3}{2}\right)^2 + \left(2-\frac{3\sqrt{3}}{2}\right)^2$$

$$= 4\times 3 + 2\times 3\sqrt{3} + \frac{9}{4} + 4 - 2\times 3\sqrt{3} + \frac{9\times 3}{4} = 12 + \frac{9}{4} + 4 + \frac{9\times 3}{4} = 25 = 5^2$$

$$d_{\gamma'\alpha'}{}^2 = \left(-\sqrt{3}-1-\left(\frac{1}{2}-\sqrt{3}\right)\right)^2 + \left(-1+\sqrt{3}-\left(-1-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\right)^2 = \left(-\frac{3}{2}\right)^2 + \left(\frac{3\sqrt{3}}{2}\right)^2$$

$$= \frac{9}{4} + \frac{9\times 3}{4} = 9 = 3^2$$

これも可能解で解 3 とします。つまり無限の可能解があります。
解 2 の三角形$\alpha'\beta'\gamma'$は解 1 の三角形$\alpha\beta\gamma$を左に 2 下に 1 移動したものです。解 3 の三角形$\alpha''\beta''\gamma''$は、反時計回りに$\frac{\pi}{6}$回転したものです。
確かめてみます。反時計回りの回転の行列は次の行列です。

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{6} & \sin\frac{\pi}{6} \\ -\sin\frac{\pi}{6} & \cos\frac{\pi}{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -2 & -1 \\ 2 & -1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}-\sqrt{3} & -1-\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \sqrt{3}+\frac{1}{2} & 1-\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\sqrt{3}-1 & -1+\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

平行移動や回転が三角形の形、相対的な位置関係を変えないことは分かり切ったことです。馬鹿げたことをしましたが、それによって分かったことは、三角形の大きさと形は３点間の距離情報があれば決まり、私たちはその位置と角度を決めればよいということです。
三角形の形と大きさを決めるのは、正弦定理・余弦定理という基礎的な幾何学の問題です。
理論的にこの問題は、図 80 に示したように、三角形の外接円を決める問題で

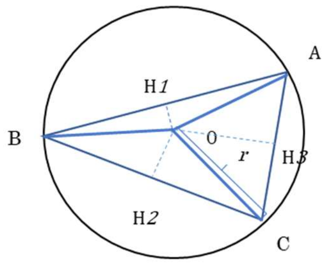

図 80. 三角形の外接円

O は外接円の中心で、変形の長さは r です。それぞれの辺の長さを次のように決めます。

$$\lceil \mathrm{AB} \rceil = a, \qquad \lceil \mathrm{BC} \rceil = b, \qquad \lceil \mathrm{CA} \rceil = c$$

点$\mathrm{H_1}$、$\mathrm{H_2}$、 $\mathrm{H_3}$ 中心から辺に引いた法線の脚です。

$$\angle \mathrm{OHA} = \angle \mathrm{OHB} = \angle \mathrm{OHC} = \frac{\pi}{2}$$

$\varDelta\mathrm{OAB}, \varDelta\mathrm{OBC}$ and $\varDelta\mathrm{OCA}$ は二等辺三角形ですから、

$$\varDelta\mathrm{OH_1A} \equiv \varDelta\mathrm{OH_1B}、\varDelta\mathrm{OH_2B} \equiv \varDelta\mathrm{OH_2C}、\varDelta\mathrm{OH_3C} \equiv \varDelta\mathrm{OH_3A}$$

最も簡単な正弦定理と余弦定理の証明は次の通りです。

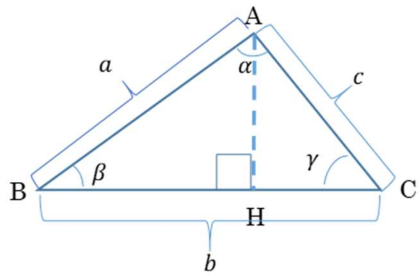

図 81. 正弦定理 1.

H は A から辺 BC に引いた法線

$$\lceil \mathrm{AH} \rceil = a \sin\beta = c \sin\gamma$$

H’はＣから辺 AB に引いた法線

$$c \sin\alpha = b \sin\beta$$

H”は B から AC に引いた法線

$$b \sin\gamma = a \sin\alpha$$

これが、正弦定理に一つの形です
余弦定理については,

$$[\mathrm{BH}] = a\cos\beta$$
$$[\mathrm{HC}] = c\cos\gamma$$
$$[\mathrm{BH}] + [\mathrm{HC}] = [\mathrm{BH}] = b$$
⊿AHCは直角三角形、ピタゴラスの定理を使って、
$$[\mathrm{AH}]^2 + [\mathrm{HC}]^2 = [\mathrm{AC}]^2$$
$$a^2\sin^2\beta + (b - a\cos\beta)^2 = c^2$$
$$a^2\sin^2\beta + b^2 - 2ab\cos\beta + a^2\cos^2\beta = c^2$$
$$a^2\sin^2\beta + a^2\cos^2\beta + b^2 - 2ab\cos\beta = c^2$$
$$a^2(\sin^2\beta + \cos^2\beta) + b^2 - 2ab\cos\beta = c^2$$
$$a^2 + b^2 - c^2 = 2ab\cos\beta$$
$$\cos\beta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}$$
同様に
$$\cos\alpha = \frac{a^2 + c^2 - b^2}{2ac}$$
$$\cos\gamma = \frac{b^2 + c^2 - a^2}{2bc}$$
証明としてはこれで十分なのですが、これでは外接円の半径と辺の長さの関係がわかりません。そこで、正弦定理の形を書き換えます。

半径rと各頂点の角度の関係は次の通り

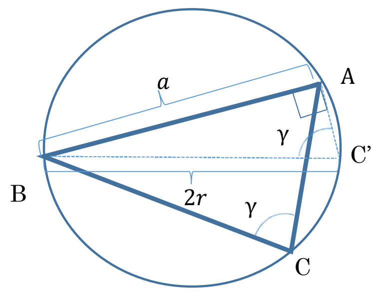

図 82．正弦弦定理 2

円周に沿って、C を C′ まで移動します。BC′は直径です。
$$[\mathrm{BC'}] = 2r$$
∠ACB と∠AC′Bは弦 AB を共有しているので
$$\angle\mathrm{ACB} = \angle\mathrm{AC'B} = \gamma$$
線分BC′は外接円の直径

$$\angle \mathrm{C'AB} = \frac{\pi}{2}$$

したがって

$$\frac{a}{2r} = \sin\gamma$$

同様に

$$\frac{b}{2r} = \sin\alpha$$

$$\frac{c}{2r} = \sin\beta$$

これが正弦定理のもう一つの形です。こちらの方が数学的にきれいです。

$$\frac{a}{\sin\gamma} = \frac{b}{\sin\alpha} = \frac{c}{\sin\beta} = 2r$$

この式から半径 r を求めます。

$$\sin\gamma = \sqrt{1-\cos^2\gamma} = \sqrt{1-\left(\frac{b^2+c^2-a^2}{2bc}\right)^2} = \frac{1}{2bc}\sqrt{(4b^2c^2-(b^2+c^2-a^2)^2)}$$

$$\begin{aligned}(b^2+c^2-a^2)^2 &= (b^2+c^2)^2 - 2(b^2+c^2)a^2 + a^4 \\ &= b^4 + 2b^2c^2 + c^4 - 2a^2b^2 - 2c^2a^2 + a^4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}4b^2c^2-(b^2+c^2-a^2)^2 &= 4b^2c^2 - b^4 - 2b^2c^2 - c^4 + 2a^2b^2 + 2c^2a^2 - a^4 \\ &= -a^4 - b^4 - c^4 + 2b^2c^2 + 2a^2b^2 + 2c^2a^2 - a^4\end{aligned}$$

$$= a^2b^2 - \frac{1}{2}(a^2-b^2)^2 + b^2c^2 - \frac{1}{2}(b^2-c^2)^2 + c^2a^2 - \frac{1}{2}(c^2-a^2)^2$$

$$\sin\gamma == \frac{1}{2bc}\sqrt{a^2b^2 - \frac{1}{2}(a^2-b^2)^2 + b^2c^2 - \frac{1}{2}(b^2-c^2)^2 + c^2a^2 - \frac{1}{2}(c^2-a^2)^2}$$

$$2r = \frac{a}{\sin\gamma} = \frac{2abc}{\sqrt{a^2b^2 - \frac{1}{2}(a^2-b^2)^2 + b^2c^2 - \frac{1}{2}(b^2-c^2)^2 + c^2a^2 - \frac{1}{2}(c^2-a^2)^2}}$$

$$r = \frac{abc}{\sqrt{a^2b^2 - \frac{1}{2}(a^2-b^2)^2 + b^2c^2 - \frac{1}{2}(b^2-c^2)^2 + c^2a^2 - \frac{1}{2}(c^2-a^2)^2}}$$

正弦定理と余弦定理を使って、三角形の形と大きさを求めることが出来ます。大きさは外接円の半径で表現すれば良いでしょう。そこで、外接円に話を戻します（図 80)。

中心核∠AOB は円周角∠ACBと同じ弦 AB を共有しています。中心角は円周角の２倍です。

したがって

$$\angle \mathrm{AOB} = 2\gamma$$

同様に

$$\angle \mathrm{BOC} = 2\alpha$$

$$\angle \mathrm{COA} = 2\beta$$

三角形の向きを決めなくてはいけませんが、できるだけ計算が簡単な方が良いでしょう。まず、ベクトル$\overrightarrow{\mathrm{OA}}$を水平軸に置きます。次にベクトル$\overrightarrow{\mathrm{OB}}$ はベクトル$\overrightarrow{\mathrm{OA}}$を 2γ 反時計方向に回転して得られます。ベクトル$\overrightarrow{\mathrm{OC}}$はベクトル$\overrightarrow{\mathrm{OA}}$を時計方向に 2β回転させて得られます。

反時計方向の回転行列は次の通りです。

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

結論として

$$\mathrm{OB} = (r \quad 0)\begin{pmatrix} \cos 2\gamma & \sin 2\gamma \\ -\sin 2\gamma & \cos 2\gamma \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{OB} = (r \quad 0)\begin{pmatrix} \cos 2\gamma & \sin 2\gamma \\ -\sin 2\gamma & \cos 2\gamma \end{pmatrix}$$

$$= (r\cos 2\gamma \quad r\sin 2\gamma) = (r(1 - 2\sin^2\gamma) \quad 2r\sin\gamma\cos\gamma)$$

$$= \left(r(1 - 2\left(\frac{a}{2}\right)^2) \quad 2r\left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{b^2 + c^2 - a^2}{2bc}\right) \right)$$

$$= \left(r(1 - \frac{a^2}{2}) \quad ra\left(\frac{b^2 + c^2 - a^2}{2bc}\right) \right)$$

$$\mathrm{OC} = (r \quad 0)\begin{pmatrix} \cos -2\beta & \sin -2\beta \\ -\sin -2\beta & \cos -2\beta \end{pmatrix} = (r \quad 0)\begin{pmatrix} \cos 2\beta & -\sin 2\beta \\ \sin 2\beta & \cos 2\beta \end{pmatrix} = (r\cos 2\beta \quad -\mathrm{r}\sin 2\beta)$$

$$= \left(r(1 - \frac{c^2}{2}) \quad ra\left(\frac{b^2 + a^2 - c^2}{2ab}\right) \right)$$

著者はこの計算を中学校卒業以来 50 年ぶりにやりました。この方法をそのまま多次元に拡張することはできません。だから、無駄なことをしたと言えるのですが、私たちは三角形を平面として作れます。三角形を立体的につなぎ合わせることによって、多次元空間上に、多次元多面体を作ることが出来ます。

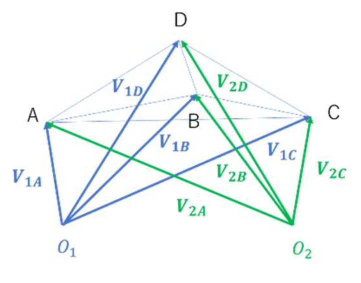

図 83.4 点と原点の空間配置

図 83 に示したように、 A と B、A と C、A と D、B と C、B と D、D と C の距離が正しく与えられれば、4 面体が作れることが分かります。この空間に原点を定めると、各点間の距離は次のように書けます。

$$\overline{\mathrm{AB}} = \lceil V_A - V_B \rceil$$
$$\overline{\mathrm{AC}} = \lceil V_A - V_C \rceil$$
$$\overline{\mathrm{AD}} = \lceil V_A - V_D \rceil$$
$$\overline{\mathrm{BC}} = \lceil V_B - V_C \rceil$$
$$\overline{\mathrm{BD}} = \lceil V_B - V_D \rceil$$
$$\overline{\mathrm{CD}} = \lceil V_C - V_D \rceil$$

この関係は、原点を他の点に移動しても変わりません。

もし、5 の点があって、3 次元空間のデータだったとしても、距離が正確に測定されていれば、三次元空間中の複雑な多面体になるだけです。図 83 に示したように、その空間中のどこへでも原点は移動できるのです。

VI-2-2-1-3. *古典的多次元尺度構成法(計量 MDS)*

次の距離行列が与えられているとします。

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 0 & D_{12} & \cdots & D_{1n} \\ D_{21} & 0 & \cdots & D_{2n} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ D_{n1} & D_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

距離の二乗行列を次のように定義します。

$$\boldsymbol{D^2} = \begin{pmatrix} 0 & {D_{12}}^2 & \cdots & {D_{1n}}^3 \\ {D_{21}}^2 & 0 & \cdots & {D_{2n}}^2 \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ {D_{n1}}^2 & {D_{n2}}^2 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

ここでは$\boldsymbol{D^2}$は$\boldsymbol{D}$の二乗ではありません。

私たちが知りたいのは、原点から各データへのベクトルです。それらのベクトルの行列を次のように書きます。

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{V}_1 \\ \boldsymbol{V}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{V_n} \end{pmatrix}$$

$$D_{ij2} = \lceil \boldsymbol{V}_i - \boldsymbol{V}_j \rceil$$

ベクトルが m 次ならば、次のようになります。

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1m} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nm} \end{pmatrix}$$

無邪気な発想から出発して、多次元尺度構成法の操作を明確にすることが出来ました。そして、原点を私たち自身で視覚的効果を考えて私たち自身で作らなければならないことがわ

かりました。これは重要なことです。座標系と現象をどこから見るかは、私たちの現象の認識に強く影響するからです。原点のおき方の一般的な考え方は、全体を代表するデータの中間点に置くという考え方です。原点を全体の中間点（平均）に置くということは、すべてのデータの重心を計算することで、それによって統計計算を単純化できます。
二つのベクトルが作る三角形の頂点を捕まえて,底辺を与えられた距離とする。3 つの三角形で三角錐を作る。空間の全方向にこれらの三角形を敷き詰める。これが、多次元尺度構成法の作業イメージです。そのために、中心化行列というのを使います。普通は平行移動の変換が多いので、この作業を中心化行列を使って式で表してみます。
大変長くてわずらわしいのですが、単純の平行移動から、一段階ずつ説明をしていきます。
中間点への座標軸の平行移動は、それぞれの座標から平均の座標を差し引いて行います。
以下の式の通りです。

$$v_{ij}-\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}v_{kj}$$

第二項の意味は平均です。これが中間点の座標の値です。
総和の記号を外すと次のようになります。

$$v_{ij}-\frac{1}{n}v_{1j}-\frac{1}{n}v_{2j}-\cdots\frac{1}{n}v_{2j}$$

この式を次のように書き換えるのです。

$$-\frac{1}{n}v_{1j}-\frac{1}{n}v_{2j}-\cdots+\left(1-\frac{1}{n}\right)v_{ij}-\cdots-\frac{1}{n}v_{nj}$$

これを、以下のように二つのベクトルの内積の式に書き換えます。

$$\left(-\frac{1}{n}v_{1j}-\frac{1}{n}v_{2j}-\cdots+\left(1-\frac{1}{n}\right)v_{ij}-\cdots-\frac{1}{n}v_{nj}\right)=\left(-\frac{1}{n}\ -\frac{1}{n}\quad\cdots 1-\frac{1}{n}\cdots-\frac{1}{n}\quad\right)\begin{pmatrix}v_{1j}\\v_{2j}\\\vdots\\v_{ij}\\\vdots\\v_{nj}\end{pmatrix}$$

すると、すべての移動が次の行列の掛け算で表せます。

$$\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}v_{11}&v_{12}&\cdots&v_{1m}\\v_{21}&v_{22}&\cdots&v_{2m}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\v_{n1}&v_{n2}&\cdots&v_{nm}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{V'}=\begin{pmatrix}1-\frac{1}{n}&-\frac{1}{n}&\cdots&-\frac{1}{n}\\-\frac{1}{n}&1-\frac{1}{n}&\cdots&-\frac{1}{n}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\-\frac{1}{n}&-\frac{1}{n}&\cdots&1-\frac{1}{n}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_{11}&v_{12}&\cdots&v_{1m}\\v_{21}&v_{22}&\cdots&v_{2m}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\v_{n1}&v_{n2}&\cdots&v_{nm}\end{pmatrix}$$

次の行列を中心化行列と呼びます。

$$
\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} 1-\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1-\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & 1-\frac{1}{n} \end{pmatrix}
$$

式 76

一般化して記述すると以下の通りです。

$$
\boldsymbol{G}_n = \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}
$$

$\boldsymbol{I}_n$は $\boldsymbol{n} \times \mathrm{n}$単位行列です。また、

$$
\boldsymbol{1_n} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{1_n}^{\mathrm{T}} = (1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1)
$$

とします。すると、

$$
\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}
$$

$$
\left(\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}\right)^{\boldsymbol{2}} = \begin{pmatrix} n & n & \cdots & n \\ n & n & \cdots & n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ n & n & \cdots & n \end{pmatrix} = n\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}
$$

となります。

中心化行列は$\boldsymbol{G_n}$独特で便利な性質を持っています。

第一に

$$
\boldsymbol{G}_n{}^{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{G}_n
$$

です。確かめます。

$$
\boldsymbol{G}_n{}^{\boldsymbol{2}} = \left(\boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}\right)
$$

$$
= \boldsymbol{I}_n\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{2}\boldsymbol{I}_n\frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}} + \frac{1}{n^2}\left(\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}\right)^{\boldsymbol{2}}
$$

$$
= \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{G}_n
$$

$$
\because \boldsymbol{I}_n\boldsymbol{I}_n = \boldsymbol{I}_n,\ \boldsymbol{I}_n\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}, \left(\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}\right)^{\boldsymbol{2}} = n\boldsymbol{1_n}\boldsymbol{1}_n{}^{\mathrm{T}}
$$

中心は一つで、一度中心化したら、もうそれ以上中心化できないのだから、論理的に当たり前と言えば当たり前です。しかし、計算するときにはこの性質は重要です。

例として $\mathbf{A}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\\d\end{pmatrix}$を$\boldsymbol{G}_n$で中心化してみます。

これは、中心化行列を作った時の逆計算ですね。

$$\boldsymbol{G}_4\boldsymbol{A}=\left(\boldsymbol{I}_4-\frac{1}{4}\mathbf{1}_4\mathbf{1}_4{}^{\mathrm{T}}\right)\begin{pmatrix}a\\b\\c\\d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\\d\end{pmatrix}-\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&1&1&1\\1&1&1&1\\1&1&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\\d\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}a\\b\\c\\d\end{pmatrix}-\frac{1}{4}\begin{pmatrix}a+b+c+d\\a+b+c+d\\a+b+c+d\\a+b+c+d\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}a-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\b-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\c-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\d-\dfrac{a+b+c+d}{4}\end{pmatrix}$$

行列の因子の 2 項目は分子の形で、平均を意味します。これをさらに中心化します。

$$\boldsymbol{G}_4(\boldsymbol{G}_4\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\b-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\c-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\d-\dfrac{a+b+c+d}{4}\end{pmatrix}-\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&1&1&1\\1&1&1&1\\1&1&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\b-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\c-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\d-\dfrac{a+b+c+d}{4}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}a-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\b-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\c-\dfrac{a+b+c+d}{4}\\d-\dfrac{a+b+c+d}{4}\end{pmatrix}-\frac{1}{4}\begin{pmatrix}a+b+c+d-(a+b+c+d)\\a+b+c+d-(a+b+c+d)\\a+b+c+d-(a+b+c+d)\\a+b+c+d-(a+b+c+d)\end{pmatrix}$$

$$
=\begin{pmatrix} a-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ b-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ c-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ d-\dfrac{a+b+c+d}{4} \end{pmatrix}-0=\begin{pmatrix} a-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ b-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ c-\dfrac{a+b+c+d}{4} \\ d-\dfrac{a+b+c+d}{4} \end{pmatrix}=\boldsymbol{G}_4\boldsymbol{A}
$$

これで次のことが確認できました。

$$
\boldsymbol{G}_n(\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{G}_n)^2\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{A}
$$

次に中心化行列$\boldsymbol{G}_n$は次の性質も持っています。

$$
\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{1_n}={\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_n=0
$$

確かめてみます

$$
\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{1_n}=\left(\boldsymbol{I}_n-\frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}{\boldsymbol{1}_n}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{1_n}=\boldsymbol{I}_n\boldsymbol{1_n}-\frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}\left({\boldsymbol{1}_n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1_n}\right)=\boldsymbol{1_n}-\frac{1}{n}n\boldsymbol{1_n}=0
$$

$$
\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{1_n}={\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{I}_n-\frac{1}{n}\boldsymbol{1_n}{\boldsymbol{1}_n}^{\mathrm{T}}\right)={\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I}_n-\frac{1}{n}\left({\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1_n}\right){\boldsymbol{1}_n}^{\mathrm{T}}={\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}-\frac{1}{n}n{\boldsymbol{1_n}}^{\mathrm{T}}=0
$$

これらを確認したうえで、行列$\boldsymbol{V}$に戻ります。

この行列は、以下に示すように、行ベクトルを縦に並べたものです。

$$
\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{V}_1\\ \boldsymbol{V}_2\\ \vdots\\ \boldsymbol{V_n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1m} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nm} \end{pmatrix}
$$

$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$について考えます。この行列を著者は個人的に、内積の行列と呼んでいます。$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}$を分散共分散行列と呼ぶからです。$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$の各因子は内積です。だからこう呼んでいるのですが、この呼び方は一般的ではないし、混乱を招きます。行列はベクトルを並べたものでもあって、$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$は行列同士の内積です。これはスカラーで、行列の内積と呼ぶのは一般的です。これとの混同を避けるために、ほかのところで、内積の行列という呼び方は使わない方が良いでしょう。しかし、ここでは内積の行列と呼びます。

$$
\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\neq\ \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}
$$

であることは、しっかり確認してください。

$$
\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{V_1}\\ \boldsymbol{V_2}\\ \vdots\\ \boldsymbol{V_n}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{V_1} & \boldsymbol{V_2} & \cdots & \boldsymbol{V_n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{V_1}\cdot{\boldsymbol{V_1}}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{V_1}\cdot{\boldsymbol{V_2}}^{\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{V_1}\cdot{\boldsymbol{V_n}}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{V_2}\cdot{\boldsymbol{V_1}}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{V_2}\cdot{\boldsymbol{V_2}}^{\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{V_2}\cdot{\boldsymbol{V_n}}^{\mathrm{T}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V_n}{\boldsymbol{V_1}}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{V_n}{\boldsymbol{V_2}}^{\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{V_n}{\boldsymbol{V_n}}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}
$$

$\boldsymbol{V_i}\cdot{\boldsymbol{V_j}}^{\mathrm{T}}$ は $\boldsymbol{V_i}$ と $\boldsymbol{V_j}$の内積、

$$
\boldsymbol{V_i}\cdot{\boldsymbol{V_j}}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix} v_{i1} & \cdots & v_{in}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_{j1}\\ \vdots \\ v_{jn}\end{pmatrix}
$$

次に中心化された行列の内積の行列を考えます。

$$\boldsymbol{V}' = \boldsymbol{G_m V}$$

ここで余弦定理を思い出します。すると次のように２つのベクトルの長さの関係を書き表せます。

$$\boldsymbol{2V'_i \cdot V'_j} = \lceil \boldsymbol{V'_i} \rceil^{\boldsymbol{2}} + \lceil \boldsymbol{V'_j} \rceil^{\boldsymbol{2}} - \lceil \boldsymbol{V'_i - V'_j} \rceil^{\boldsymbol{2}}$$

最後の項が、二つのベクトルの矢印の先端の距離の２乗になっています

$$\lceil \boldsymbol{V'_i - V'_j} \rceil^{\boldsymbol{2}} = {d_{ij}}^2$$

$$\boldsymbol{2V'_i \cdot V'_j} = \lceil \boldsymbol{V'_i} \rceil^{\boldsymbol{2}} + \lceil \boldsymbol{V'_j} \rceil^{\boldsymbol{2}} - {d_{ij}}^2$$

この式は二つのベクトルの関係を表していますが、次のように行列の計算で表せます。

$$\boldsymbol{2V'V'^T} = \boldsymbol{1}n\boldsymbol{1}n^{\mathrm{T}} diag(\boldsymbol{V'V'^T}) + diag\boldsymbol{V'V'^T}\boldsymbol{1}n\boldsymbol{1}n^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{D^2}$$

ここで、$diag\boldsymbol{A}$は行列$\boldsymbol{A}$の対角成分で出来た行列です。

つまり、具体的に例示すると、次のようになります。

$$\boldsymbol{2V'V'^T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} - \boldsymbol{D^2}$$

左辺を以下の様に書き換えます。

$$\boldsymbol{V'V'^T} = \boldsymbol{G_n V}(\boldsymbol{G_n V})^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{G_n V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{G_n V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n}$$

$$\boldsymbol{2G_n V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_1}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_1}^2 \\ \boldsymbol{V'_2}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_2}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V'_n}^2 & \boldsymbol{V'_n}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} - \boldsymbol{D^2}$$

両辺に$\boldsymbol{G_n}$を掛けます。

$$\boldsymbol{2G_n}^2 \boldsymbol{V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n}^2 = \boldsymbol{G_n} \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{G_n} + \boldsymbol{G_n} \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_1}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_1}^2 \\ \boldsymbol{V'_2}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_2}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V'_n}^2 & \boldsymbol{V'_n}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{G_n} - \boldsymbol{G_n D^2 G_n}$$

中心化行列の性質を使って

$$\boldsymbol{G_n}^2 = \boldsymbol{G_n}$$

ですから左辺は

$$\boldsymbol{G_n}^2 \boldsymbol{V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n}^2 = \boldsymbol{G_n V V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G_n}$$

右辺については、これも中心化行列の性質で、第１項と第２項が０です。確かめます。

$$\boldsymbol{G_n} \begin{pmatrix} \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{V'_1}^2 & \boldsymbol{V'_2}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'_n}^2 \end{pmatrix}$$

二つ目の行列の第一列について注目すると、同じベクトルの二乗が並んでいます。ということは、計算の結果得られる行列の１行目１列の因子は次の通りになります。

$$\boldsymbol{G_n}\begin{pmatrix}\boldsymbol{V'}_1{}^2\\ \boldsymbol{V'}_1{}^2\\ \vdots\\ \boldsymbol{V'}_1{}^2\end{pmatrix}=\boldsymbol{V'}_1{}^2\boldsymbol{G_n}\begin{pmatrix}1\\1\\ \vdots\\1\end{pmatrix}=\boldsymbol{0}$$

$$\because \boldsymbol{G_n}\begin{pmatrix}1\\1\\ \vdots\\1\end{pmatrix}=0\quad \text{中心化行列の性質}$$

得られる行列の他の要素についても同様ですから

$$\boldsymbol{G_n}\begin{pmatrix}\boldsymbol{V'}_1{}^2 & \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_n{}^2\\ \boldsymbol{V'}_1{}^2 & \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_n{}^2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{V'}_1{}^2 & \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_n{}^2\end{pmatrix}=0$$

二つ目の項についても同じように

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{V'}_1{}^2 & \boldsymbol{V'}_1{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_1{}^2\\ \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_2{}^2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{V'}_{1n}{}^2 & \boldsymbol{V'}_n{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_n{}^2\end{pmatrix}\boldsymbol{G_n}$$

前の行列の第一列が同じベクトルの２乗だから

$$\left(\boldsymbol{V}_1{}^2\quad \boldsymbol{V}_1{}^2\quad \cdots\quad \boldsymbol{V}_1{}^2\right)\boldsymbol{G_n}=\boldsymbol{V}_1{}^2(1\quad 1\quad \cdots\quad 1)\boldsymbol{G_n}=0$$

となって、得られる行列の他の要素についても同じなので

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{V'}_1{}^2 & \boldsymbol{V'}_1{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_1{}^2\\ \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \boldsymbol{V'}_2{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_2{}^2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{V'}_n{}^2 & \boldsymbol{V'}_n{}^2 & \cdots & \boldsymbol{V'}_n{}^2\end{pmatrix}\boldsymbol{G_n}=0$$

つまり、結論として、内積の行列と距離の二乗行列の関係は次のようになります。

$$\boldsymbol{2G_nVV^{\mathrm{T}}G_n=-G_nD^2G_n}$$

私たちは、$\boldsymbol{G_n}$で優しく包み込むことによって、$\boldsymbol{D^2}$ に空間上の位置を与えることが出来ました。さまよえるヘブライ人に安住の地を与えることが出来て、さわやかな気分です。

私たちが知りたかったのは$\boldsymbol{G_nV}$でした。

$$\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{G_nV}$$

$$\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{G_nV})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G_n}$$

$$\boldsymbol{YY}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{G_nVV}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G_n}=-\frac{1}{2}\boldsymbol{G_nD^2G_n}$$

まず、中心化行列で挟み込んで、次の行列を作ります

$$\boldsymbol{Z}=-\frac{1}{2}\boldsymbol{G_nD^2G_n}$$

続いて$\boldsymbol{Z}$を対角化します。

$$Z = P\Lambda P^{-1} = P\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}P^{-1} = P\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}P^{\mathrm{T}} = P\Lambda^{\frac{1}{2}}\left(P\Lambda^{\frac{1}{2}}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$-\frac{1}{2}G_nD^2G_n = P\Lambda^{\frac{1}{2}}\left(P\Lambda^{\frac{1}{2}}\right)^{\mathrm{T}}$$

以上によって、次の結論を得ます。

$$Y = P\Lambda^{\frac{1}{2}}$$

式 77

VI-2-2-2. *古典的多次元尺度構成法に関する理論的考察*

観察によって得られた次のようなデータセットがあったとします。$\boldsymbol{X}$ の個々のデータは m 個の要素から構成されて、サンプルサイズはn個です。

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}$$

測定項目の数が多い場合、ここから、データがどのように分布しているのか構造を理解したり、測定値間の関係を直接理解したりするのは難しいでしょう。そのような場合、私たちは、いくつかの項目を結合して、要素の数をm個からl個 $(l < m)$に減らそうとします。これが 多次元尺度構成法や主成分分析をする動機です。極端な場合には、一にまとめてしまいたい $(l = 1)$。

$$\tilde{y}_1 = a_1x_{11} + a_2x_{12} + \cdots + a_nx_{1n}$$

こうしたいのですが、これを行列で書くと次の通りです。

$$\widetilde{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

さすがにそれはうまくいかない場合が多いので、$l < 1$にすると,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{l1} & a_{l2} & & a_{ln} \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \tilde{y}_{11} & \cdots & \tilde{y}_{1l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{y}_{n1} & \cdots & \tilde{y}_{nl} \end{pmatrix}$$

となります。

データの数nが項目の数pより多い時（普通はそうです。)、連立方程式は正則でなくなります。また、普通データには誤差が含まれます。そこで、期待値と実測値の違いを最小化するために、$\boldsymbol{A}$を最適化します。

$$\left\|\boldsymbol{Y} - \widetilde{\boldsymbol{Y}}\right\|$$

$\left\|\boldsymbol{Y} - \widetilde{\boldsymbol{Y}}\right\|$ は二つのベクトルの違いの大きさのノームです。普通は、直交空間のユークリッド・ノームを考えます。

$$\left\|\boldsymbol{Y}-\widetilde{\boldsymbol{Y}}\right\|^2=\left(\left[\boldsymbol{Y}-\widetilde{\boldsymbol{Y}}\right]\right)^2$$

２次元平面にデータを投影する多次元尺度構成法では、データを二つの要素に集約することになります。そういう意味で、多次元尺度構成法も、最小二乗法による近似とも考えられます。ただ、データが個々の構成要素間差として表現されているのです。そのため、内積の行列を次の式を使って作らなければなりません。

$$\boldsymbol{Z}=-\frac{1}{2}\boldsymbol{G_n}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{G_n}$$

そして、直交化して$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$を作ります。

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\right)\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$$

右辺は内積の行列の形$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$になっていますね。
特異値分解では、分散共分散行列$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ と内積の行列$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$を作って、その両方を対角化します。

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{U}$$
$$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{V}$$
$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

多次元尺度構成法では、方向を持ったベクトル・データが与えられないので、分散・共分散行列も内積の行列も直接作れません。
けれども、中心化することによって方向性を与えて、$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{G_n}\boldsymbol{D}$と考えて、$\boldsymbol{G_n}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{G_n}$を、

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$$

のように対角化できます。
内積の行列を分散共分散行列の裏返しだと考えると、多次元尺度構成法は主成分分析の裏返しだと言えるかもしれません。私たちは、主成分分析でも多次元尺度構成法でも、２次元か３次元にデータの分布を集約するため、高い寄与率の要素は２つか３つの方向に集約できれば良いと期待します。しかし、データの要素が、いつでも数少ない方向に集約されるわけではありません。多次元尺度構成法が直交軸の中からいくつかの代表的な軸を選んでいるのだと知っている賢明な分析者は、累積寄与率を確認する重要性を理解しています。著者は、個人的には、あまり重要でない軸を使って分布図を作ることに興味を覚えます。あまり重要でない関係から、新しい発見があることを期待するからです。主成分分析も多次元尺度構成法も、様々な角度から現象を見る方法です。多次元尺度構成法の数学的な意味を知るこ

とによって、この方法を独特で面白い発見のための道具として使うことが出来ます。

VI-2-2-3. 多次元尺度構成法の計算例

計算法と多次元尺度構成法と主成分分分析の意味を深く理解するために、いくつかの多次元尺度構成法の計算例を示します。

例１(正三角形)

一辺の長さが１の正三角形の頂点を空間に置くことを考えます。三点は自然に空間上に平面を作りますから、どの角度から見ているのか視点の方向がわかりやすいからです。距離データから、二次元平面が出来ることを確かめます。

総当たりの距離行列の二乗行列は次のようになります。

$$\boldsymbol{D^2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

中心化します。

$$\boldsymbol{GnD^2Gn} = \begin{pmatrix} 1-\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1-\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1-\frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1-\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1-\frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{6}{9} & \frac{3}{9} & \frac{3}{9} \\ \frac{3}{9} & -\frac{6}{9} & \frac{3}{9} \\ \frac{3}{9} & \frac{3}{9} & -\frac{6}{9} \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$を対角化します。

まず、固有値を求めるために固有方程式を解きます。

$$\begin{vmatrix} -2-\lambda & 1 & 1 \\ 1 & -2-\lambda & 1 \\ 1 & 1 & -2-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$-(2+\lambda)^3 + 2 + 3(2+\lambda)$$

$$-(\lambda^2 + 4\lambda + 4)(2+\lambda) + 2 + 3(2+\lambda)$$

$$-\lambda^3 - 4\lambda^2 - 4\lambda - 2\lambda^2 - 8\lambda - 8 + 2 + 6 + 3\lambda$$

$$-\lambda^3 - 6\lambda^2 - 12\lambda - 8 + 2 + 6 + 3\lambda = 0$$

$$-\lambda^3 - 6\lambda^2 - 9\lambda = 0$$

$$\lambda(\lambda+3)^2 = 0$$

$$\lambda = 0, \lambda = -3$$

固有値$\lambda = 0$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$2x_1 - x_2 - x_3 = 0$$

$$-x_1 + 2x_2 - x_3 = 0$$

$$-x_1 - x_2 + 2x_3 = 0$$

全ての等式から

$$x_1 = x_2 = x_3$$

もっとも単純な固有ベクトルとして以下のベクトルを選択します。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

固有値$\lambda = -3$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = -3\lambda = 0$$

$$-2x_1 + x_2 + x_3 = -3x_1$$

$$x_1 - 2x_2 + x_3 = -3x_2$$

$$x_1 + x_2 - 3x_3 = -3x_3$$

全ての等式から

$$x_1 + x_2 + x_3 = 0$$

分かりやすいベクトルとして、次の固有ベクトルを選択します。

$$\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

固有値$\lambda = -3$に属する固有ベクトルは、直交性を利用して求めます。

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$(x_1 \quad x_2 \quad x_3)\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 0$$

$$2x_1 - x_2 - x_3 = 0$$

これを解くと

$$x_1 = 0, x_2 = -x_3$$

分かりやすい固有ベクトルとして、次のベクトルを選択します。

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

これらの固有ベクトルを使って $\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$の対角化行列は次のようになります。

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

必ずしもその必要はないのですが、単位ベクトルにしておいた方が何かと便利です。

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{P}$ は対称行列の対角化行列ですから

$$\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$$

これを使って、次のように $\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}$を対角化します。

$$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn} = \boldsymbol{P\Lambda P}^{\mathrm{T}}$$

$$\frac{1}{3}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-3 & 0 & 0\\ 0 & -3 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Z}=\frac{\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}}{\boldsymbol{-2}}$$

$$=\frac{1}{-2}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

これを$\boldsymbol{P\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}P}^{\mathrm{T}}$の形に書き換えます。

$$\boldsymbol{P\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}P}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

この結果は固有ベクトル$\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$がその方向に広がりを持っていないということです。したがって、この軸を無視して

$$
\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & 0\\ -\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}
$$

以上の結果、三角形の頂点の位置は次のように決まります。

$$
\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & 0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}
$$

これを二次元平面にプロットします。

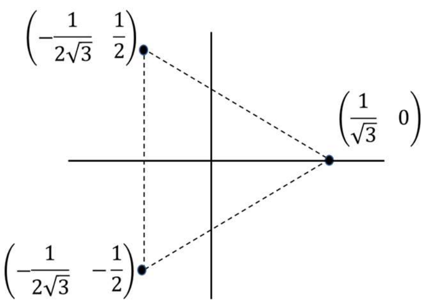

図 84. 二次元空間上の 3 頂点のプロット

念のために、頂点間の距離を求めておきます。

$$
\left|\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & 0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\right|=\sqrt{\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2+\left(-\frac{1}{2}\right)^2}=1
$$

$$
\left|\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & 0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\right|=\sqrt{\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2}=1
$$

$$
\left|\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\right|=\sqrt{(0)^2+(1)^2}=1
$$

全く情報を失くことなく、正三角形を描くことが出来ました。

$\begin{pmatrix}2\\-1\\-1\end{pmatrix}$を固有ベクトルとして選択したときに、一つの頂点が水平軸に来ることが決まります。

また、固有値の一つが 0 だったことから一つのベクトルに広がりがなく、平面が形成される

ことが分かります。

例２(正方形)

皮肉屋からは、３点が平面を形成することは当然だと言われそうです。そこで、一辺が１の正方形について考えます。

総当たり距離行列は次のようになります。

$$\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 1 & 0 & 1 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

距離の２乗行列は次の通りです。

$$\boldsymbol{D^2}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

中心化します。

$$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}=\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

固有方程式から固有値を求めます。

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

$$(\lambda+1)^4-2(\lambda+1)^2+1=0$$

$$((\lambda+1)^2-1)^2=0$$

$$\left(\lambda(\lambda+2)\right)^2=0$$

$$\lambda=0\ (\text{重根}),\lambda=-2\ (\text{重根})$$

固有値$\lambda=0$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}=0\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}$$

$$-x_1+x_3=0$$

$$x_2-x_4=0$$

ここから、

$$x_1=x_3,x_2=x_4$$

もっとも簡単な固有ベクトルとして、次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$$

固有値$\lambda=-2$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}=-2\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}$$

$$x_1+x_3=0$$

$$x_2+x_4=0$$

ここから

$$x_1=-x_3,x_2=-x_4$$

分かりやすい固有ベクトルとして、次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix}1\\1\\-1\\-1\end{pmatrix}$$

固有値$\lambda=0$に属するもう一つの固有ベクトルを求めます。直交条件（内積が０）を使います。

$$\begin{pmatrix}x_1 & x_2 & x_3 & x_4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}=0$$

$$\begin{pmatrix}x_1 & x_2 & x_3 & x_4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\\-1\\-1\end{pmatrix}=0$$

$$x_1+x_2+x_3+x_4=0$$

$$x_1+x_2-x_3-x_4=0$$

$$x_1 = -x_2, x_3 = -x_4$$

分かりやすい固有ベクトルとして次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

固有値$\lambda = -2$に属するもう一つの固有ベクトルを求めます。他の３つの固有ベクトルとの直交条件を使います。

$$(x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad x_4)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$(x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad x_4)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

$$(x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad x_4)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0$$

$$x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 0$$

$$x_1 - x_2 + x_3 - x_4 = 0$$

$$x_1 = -x_2, x_3 = -x_4, x_1 = x_4, x_2 = x_3$$

分かりやすい固有ベクトルとして、次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

以上で、$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}$の対角化行列が次のように作れました。

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

例によって、必ずしも必要ではありませんが、何かと便利なので、他飲位ベクトルに書き換えます。

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{\Lambda}=\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

対角化します。

$$\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{pmatrix}=\boldsymbol{P\Lambda P}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{GnD}^{2}\boldsymbol{Gn}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Z}=\frac{\boldsymbol{GnD}^{2}\boldsymbol{Gn}}{-2}$$

$$=\frac{1}{-2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

平方根の形に変形します $\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$.

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

私たちが必要とするのは$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$です。

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

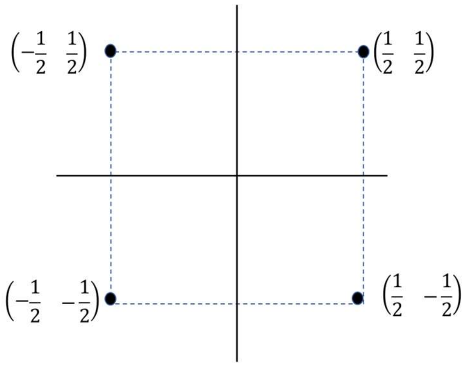

図 85. 正方形の 4 頂点の二次元平面へのプロット

原点を中心とする、一辺が 1 の正方形が描けました。二次元平面になることは、4 つの固有値の内、二つが 0 であった時点で予測できます。

例 3 (三角錐)

3 次元に分布するデータセットの例として、一辺が 1 の三角錐をとりあげます。距離行列は次の通りです。

$$\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&1\\1&1&0&1\\1&1&1&0\end{pmatrix}$$

距離の二乗行列も同じです。

$$\boldsymbol{D^2}=\begin{pmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&1\\1&1&0&1\\1&1&1&0\end{pmatrix}$$

中心化します。

$$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}=\begin{pmatrix}\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&1\\1&1&0&1\\1&1&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}-\frac{3}{4}&\frac{1}{4}&\frac{1}{4}&\frac{1}{4}\\\frac{1}{4}&-\frac{3}{4}&\frac{1}{4}&\frac{1}{4}\\\frac{1}{4}&\frac{1}{4}&-\frac{3}{4}&\frac{1}{4}\\\frac{1}{4}&\frac{1}{4}&\frac{1}{4}&-\frac{3}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}\\-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{3}{4}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{3}{4} \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}$$

行列$\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}$について固有値を求めます。

$$\begin{vmatrix} -3-\lambda & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -3-\lambda & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -3-\lambda & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -3-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(\lambda+3)^4 - 2(\lambda+3)^2 + 1 = 0$$

$$((\lambda+3)^2 - 1)^2 = 0$$

$$(\lambda+3)^2 = 1$$

$$(\lambda+3) = \pm 1$$

$$\lambda = -4\ (\text{重根}), \lambda = -2\ (\text{重根})$$

固有値$\lambda = -4$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = -4\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

$$-3x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = -4x_1$$

$$x_1 - 3x_2 + x_3 + x_4 = -4x_2$$

$$x_1 + x_2 - 3x_3 + x_4 = -4x_3$$

$$x_1 + x_2 + x_3 - 3x_4 = -4x_4$$

全ての等式から

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0$$

最も簡単な固有ベクトルとして、次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

このベクトルに直交するもう一つの固有ベクトルとして、次のベクトルを選びます。

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

固有ベクトルに名前を付けておきます。

$$\boldsymbol{V}_1=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{V}_2=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\-1\end{pmatrix}$$

固有値$\boldsymbol{\lambda}=-2$に属する固有ベクトルを求めます。

$$\begin{pmatrix}-3&1&1&1\\1&-3&1&1\\1&1&-3&1\\1&1&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}=-2\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}$$

$$-3x_1+x_2+x_3+x_4=-2x_1$$

$$x_1-3x_2+x_3+x_4=-2x_2$$

$$x_1+x_2-3x_3+x_4=-2x_3$$

$$x_1+x_2+x_3-3x_4=-2x_4$$

$$x_1=x_2+x_3+x_4 \quad \mathrm{i}$$

$$x_2=x_1+x_3+x_4 \quad \mathrm{ii}$$

$$x_3=x_1+x_2+x_4 \quad \mathrm{iii}$$

$$x_4=x_1+x_2+x_3 \quad \mathrm{iv}$$

i − ii $\qquad x_1-x_2=x_2-x_1$

$$x_1=x_2$$

同様に iii—iv

$$x_3=x_4$$

ii+iii

$$x_1=-x_4$$

同様に i+iv から

$$x_2=-x_3$$

分かりやすいベクトルとして次の二つのベクトルが得べます。

$$V_3=\begin{pmatrix}1\\1\\-1\\-1\end{pmatrix},V_3'=\begin{pmatrix}-1\\-1\\1\\1\end{pmatrix}$$

しかし、$\boldsymbol{V}_1$,- $\boldsymbol{V}_2$- $\boldsymbol{V}_3$が作る空間と$\boldsymbol{V}_1$,- $\boldsymbol{V}_2$- $\boldsymbol{V}_3{}'$が作る空間は鏡像の関係にあって、$\boldsymbol{V}_3$と$\boldsymbol{V}_3{}'$は同じ直線上の逆向きのベクトルです。ですから、これは度面化のベクトルにまとめることが出来ます。 したがって、次のベクトルを固有ベクトルとして選びます。

$$\boldsymbol{V}_1=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{V}_2=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\-1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{V}_3=\begin{pmatrix}1\\1\\-1\\-1\end{pmatrix}$$

例によって、単位ベクトルにします。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

以上より、$\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}$を対角化する行列は次の通りです。

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

3 番目の固有ベクトルの固有値は、$(-2) + (-2) = -4$です。以上より対角化した行列は次の通りです。

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{P\Lambda P^T}$$

これを使って

$$\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^T$$

$$
=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{Z}=\frac{\boldsymbol{GnD}^2\boldsymbol{Gn}}{-2}
$$

$$
=\frac{1}{-2}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

$$
=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

これを$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$の形に書き換えます。

$$
=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

これから次のように$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$が得られます。

$$\boldsymbol{P\Lambda^{\frac{1}{2}}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

これで、三角錐の頂点が、３次元空間上にあって、それぞれの頂点の座標が次のように表せることが分かりました。

$$\mathrm{A}: \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{B}: \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{C}: \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{D}: \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

各頂点間の距離を確かめます。

$$|\mathrm{A}-\mathrm{B}| = \sqrt{\left(\left(\frac{1}{2}\right)-\left(-\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left((0)-(0)\right)^2 + \left(\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\left((1)\right)^2 + 0 + 0} = 1$$

$$|\mathrm{A}-\mathrm{C}| = \sqrt{\left(\left(\frac{1}{2}\right)-(0)\right)^2 + \left((0)-\left(\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{2}} = 1$$

$$|\mathrm{A}-\mathrm{D}| = \sqrt{\left(\left(\frac{1}{2}\right)-(0)\right)^2 + \left((0)-\left(-\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{2}} = 1$$

$$|B-C| = \sqrt{\left(\left(-\frac{1}{2}\right)-(0)\right)^2 + \left((0)-\left(\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{2}} = 1$$

$$|B-D| = \sqrt{\left(\left(-\frac{1}{2}\right)-(0)\right)^2 + \left((0)-\left(-\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{2}} = 1$$

$$|C-D| = \sqrt{((0)-(0))^2 + \left(\left(\frac{1}{2}\right)-\left(-\frac{1}{2}\right)\right)^2 + \left(\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)-\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)\right)^2}$$

$$= \sqrt{0^2+(1)^2+0^2} = 1$$

これを$x_1 - x_2$平面に描くと図 86 のようになります。

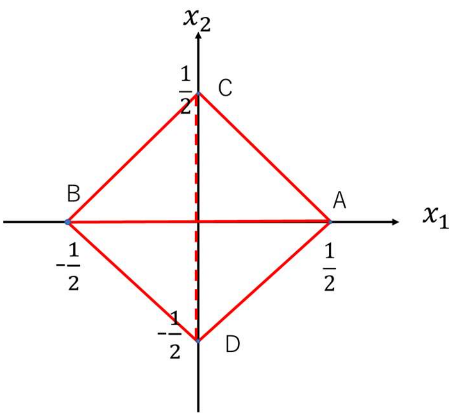

図 86. 三角錐の 2 次元平面上の投影

この二次元上の平面図から、三角錐の投影図だとわかる人はいないでしょう。立体的に書くと図 87 のようになります。

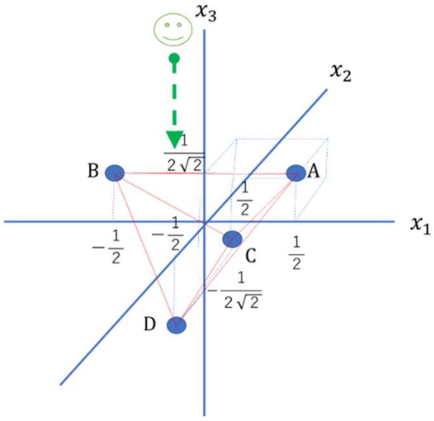

図 87. 三角錐の立体的像と二次元平面の投影児が見ている方向

二次元平面の平面図はx_3軸の方向から見ているのです。 第一の軸と第二の軸の累積寄与率は、対角化した行列の固有値から計算できます。

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

第一と第二の軸の累積寄与率は以下の通りです。

$$\frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} = \frac{2}{3}$$

平面図は全体の$\frac{2}{3}$しか説明していないのです。しかし、対角線を除けば、各ポイントの間隔は等しく、必要な情報を提供していると考える人もいるでしょう。投影図の適切性・有用性は分析の目的によって異なります。最も大切なことは、累積寄与率を見ながら、様々な角度から投影図を作ることです。私たちは、一つの投影図だけでは、四角なのか三角錐なのか判断できないのです。多次元尺度構成法の目的は、多次元のデータの分布をみることで、平面図を書くことではありません。

VI-2-2-4. 多次元尺度構成法と主成分分析の関係に関する付加的考察

正三角錐を空間に描くことが出来ました。各頂点の座標は表 43 に示す通りです。もし、この表が最初に与えられていたとしたら、多次元空間のデータ分布を調べるために主成分分析を行ったでしょう。この場合、すでに 3 次元空間的に図形がとらえられているので、実際上、主成分分析をすることに何の意味もありません。しかし、多次元尺度構成法と主成分分析の関係を理解するために、主成分分析をやってみます。

表 43 各頂点の座標

	x_1	x_2	x_3
A	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$
B	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$
C	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$
D	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$

まず、分散共分散行列を作ります。

x_1*の分散*：　$\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(-\frac{1}{2}\right)^2+(0)^2+(0)^2=\frac{1}{2}$

x_2の分散：　$(0)^2+(0)^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(-\frac{1}{2}\right)^2=\frac{1}{2}$

x_3の分散：　$\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2+\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2+\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2+\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$

x_1とx_2の共分散：　$\left(\frac{1}{2}\right)(0)+\left(-\frac{1}{2}\right)(0)+(0)\left(\frac{1}{2}\right)+(0)\left(-\frac{1}{2}\right)=0$

x_1とx_3の共分散：　$\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+(0)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+(0)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)=0$

x_2とx_3の共分散　$(0)\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+(0)\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)+\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)=0$

分散共分散行列は以下の行列になります。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

これはすでに対角化されています。これを単位行列にすると次の行列になり、

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

行列は単位行列になります。これを、座標にかけると、元のデータを形を変えずに $\frac{1}{2}$ に縮小することになります。

$$\mathrm{A}':\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{B}': \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{C}': \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{D}': \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

つまり、x_1成分、x_2成分、x_3成分という名前が、第一主成分、第二主成分、第三主成分に名前が変わっただけです。主成分分析では、固有値の小さい主成分は誤差として、固有値を０と考えます。この例では、固有値は皆同じですから、どの成分も無視できますが、たとえば、次の計算によって、第一主成分と第二主成分の平面上に頂点を置くことが出来ます。

$$\mathrm{A}' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

多次元尺度構成法と主成分分析の間の違いが、データの与えられ方の違いであることを確認しましたが、これは当然の帰結です。多次元尺度構成法の利点は、総当たりの距離データだけから、データの構造を見ることが出来ることです。多次元尺度構成法が、単に、２次元あるいは 3 次元の投影図を使って、データをカテゴリーに分ける方法だと思っている科学者は、多次元尺度計算法がもたらす重要かつ有用な情報を捨ててしまうことになります。

多次元尺度構成法と主成分分析の違いは、データセットの与え方の違いで、同じような答えが得られます。このことは、様々な測定項目で測定されたデータ間の類似度を主成分分析の結果から、多次元空間の距離を計算して評価できるということです。このことは、多次元尺度構成法が、完全に主成分分析の逆計算だということです。主成分分析は多次元尺度構成法に比べて長所があります。第一に、主成分分析の結果を使ってデータを類型化できるということです。たとえば、方形枠の中の各生物種の個体数を記録しておけば、これを使って主成分分析が出来ます。これで、生物種を類型化できますし、採集地点も類型化できます。次に、主成分分析の結果から、種や採集地点と、その背景にある、環境因子、季節性、社会的な背景などの関係を、もしそれらが記録されていれば、論ずることが出来るかもしれません。多次元尺度構成法にも、主成分分析にはない独自の機能があります。その機能を使って考えてもいなかった新発見をすることがあります。多次元尺度構成法は事前情報が不必要ですし、違いだけからデータの構造を明らかにすることができます。

例えば、沿岸生態の調査では、各測定地点の各生物種の出現個体数を記録しておけば、そのまま分散共分散行列あるいは相関分析からから主成分分析が行えます。もう一つのやり方は、データから総当たりの非類似度つくって、多次元尺度構成法を行うことです。 類似度には、Jaccard 指数、Simpson 指数、Dice 指数など様々なものがありますが、よく使われる距離は非類似度指数（1 – 類似度）です。最終場所間あるいは種間で、類似度から、距離を作れば、多次元尺度構成法を行えます。そのような場合、多次元尺度構成法を行うか主成分分析を行うかは悩ましい問題です。著者には、この問題について、数学的にどちらかを推

薦するということはできません。普通、主成分分析では、どの種も同じ重さを持っていると考えます。それらが持つ関係性を角度（相関）と捉えて、そこから距離を計算します。反対に、お互いの距離から出発して、相対的な位置を決めて、それぞれの関係性・相関（角度）が決まるのが多次元尺度構成法です。生態的な調査では、そもそもそれぞれの種を同じ重さで扱ってよいのかと言いう根本的な疑問があります。それぞれの種にそれぞれの分布特性があります。いくつかの種は希少種で、そのような種が存在することの生態的な意味は大きいでしょう。ある種は、狭い範囲でパッチを作ります。そのようなパッチの中は、その種の個体数はとても大きいでしょう。そういう種があると、他の種の相対的な出現頻度は、無視できるほど小さくなってしまいます。それは、分析の適切性と信頼性を低下させるでしょう。この問題の解決法はいくつかあって、たとえば、存在するかしないかの２値的データにするとか、出現数の対数をとるなどの工夫があります。これらは、すべての場合に有効ではありません。標準偏差でデータを標準化するとか、相関行列で主成分分析をするという方法もありますが、これらもまたいつでも有効とは限りません。筆者の印象では、生態学系の研究者は多次元尺度構成法を好むようです。要は、様々なケースを学んで経験を積むことによって、適切で使いやすい方法が考えられるということだと思います。筆者は多次元尺度構成法も主成分分析も使った経験があまりありません。それぞれの研究分野で、様々な具体的な研究例に触れて、何をどのように使えばよいか感覚を養ってください。

VI-2-2-4. 非計量的多次元尺度構成法

上記の説明は古典的な計量的多次元尺度構成法の説明です。最近、コンピューターの計算力を使って、多次元尺度構成法は進化しています。現在では様々な多次元尺度構成法があって、その典型的な物は非線形の多次元尺度構成法です。多次元尺度構成法の面白さは、それぞれのデータの構成要素を知らなくても、違いに着目することによって、多次元空間上にデータを位置づけることが出来るところにあります。著者は、多次元尺度構成法には、質的なデータや名義変数的なデータの解析に大きな可能性を持っていると思っています。著者は、すべての違いを表しているデータに、多次元尺度構成法を試してみたいと思っています。その条件は、違いが距離として表現できることです。ＡからＢの距離とＢから A への距離が同じであること（例えば､川を上り下りする船の時間距離は､A からＢと B からＡで違います。）と、A から B とＢから C の距離の合計が A から C の距離よりも短くないことです。違いをこのような条件を満たす「距離」として表現する工夫が必要なのです。すべての多次元尺度構成法について説明することは著者の能力を超えています。非計量的な多次元尺度構成法について知りたい読者は、その分野の教科書や既往の文献を参照してください。