

多変量解析代数学的考察
正準相関分析

曾谷勝義

1. 概要

多変量解析学は、その解析法の基礎が関数の条件付き最大（又は最小）問題をラグランジュ乗数法に基づいて、係数を偏微分する事により導かれている。これに対して、ここでは多変量解析の代表的な存在として、正準相関分析を取り上げて、これを線型代数学の立場から基礎式を定義して展開してみたい。

正準相関分析は Hotelling(1935)によって提唱され、計算方法は Anderson(1960)により確立された。この解析手法の特徴は、2 個以上の変数から構成される変数群があり、その中で 2 つの変数群として定義された関数による群間の最大相関を求める所にある。この関数の各対は、それ以前に導き出された全ての線型結合なる関数と、ことごとく直交するという制約条件のもとに、新たな正準変量の群間の最大相関を固有値分のみ次々求める。つまり正準相関としてのモデルは直交性という制約条件のもとで、領域内において共分散が最大の分散を持つ線型関数を選択するものになる。これを幾何学的に考えると、正準相関モデルは、ある個体が一方の測定空間で占めるのと同じその相対的な位置を、他方の測定空間で占められる時、その場の広さの究明を行うと考えられる。この正準相関分析の展開過程で、ラグランジュ乗数法の考えで同じ多変量解析である空間内最大分散を特徴とした主成分分析と、その拡張である回帰主成分分析にふれ、固有値問題に導く。

線型代数としての計算手法は反復型改良法から発展したもので、固有値解法に安定した数値解法として定評のあるハウスホルダー変換付き QR 分解法を考察してみる。このハウスホルダー変換は固有値解法の手順として、その効率性を目指す上での変換であり、QR 法は同時反復法の一つで、行列を直交行列 Q と右上三角行列 R の積に分解し、固有値計算に必要な収束に対して、正確性を伴って加速させることを目的としている。QR 法は、標準的な解法による。

2. 正準相関分析の一般的な導き方

正準相関分析における基礎方程式の一般的な導き方は次の形となる。

$$\begin{aligned} \mathbf{f} = \mathbf{X}\mathbf{a} \quad , \quad \mathbf{g} = \mathbf{Y}\mathbf{b} \quad \text{に関して、} \quad \|\mathbf{X}\mathbf{a}\| = \|\mathbf{Y}\mathbf{b}\| = 1 \quad \text{とし、} \\ (\mathbf{f}, \mathbf{g} \text{ の相関 } \mathbf{f}^t \mathbf{g}) \text{ の条件の下で、} \\ (\mathbf{X}\mathbf{a})^t (\mathbf{Y}\mathbf{b}) = \mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} \end{aligned} \quad (1)$$

(1)式を最大にする様な $\mathbf{f} = \mathbf{X}\mathbf{a}$, $\mathbf{g} = \mathbf{Y}\mathbf{b}$ を求める。

関数 $f(\mathbf{a})$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$ の条件付き最大(小)問題からラグランジュ(Lagrange)乗数法により導く。

ラグランジュ乗数法を使うと、次式を最小にすべく各要素で偏微分することで求められる。

$$F = 2\mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} - \alpha(\mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a} - 1) - \beta(\mathbf{b}^t \mathbf{Y}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} - 1) \quad (2)$$

(2)式の $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ の各係数につき偏微分した式を0とおく。

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} - \alpha \mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{b}} = \mathbf{Y}^t \mathbf{X} \mathbf{a} - \beta \mathbf{Y}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} = 0 \quad (4)$$

(3),(4)式から、(3)式に $\mathbf{a}^t$ (4)式に $\mathbf{b}^t$ を左から掛けて、

$$\mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{b} = \alpha \mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = \alpha \quad (5)$$

$$\mathbf{b}^t \mathbf{Y}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = \beta \mathbf{b}^t \mathbf{Y}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} = \beta \quad (6)$$

(5)、(6)式はともに $\mathbf{X}\mathbf{a}$ と $\mathbf{Y}\mathbf{b}$ の内積で等しいから $\alpha = \beta$ が示された。

(3)式から

$$\mathbf{a} = \alpha^{-1} (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} \quad (7)$$

(7)式を(4)式に代入して α を掛けると、ここで $\alpha = \beta$ であるから

$$\mathbf{Y}^t \mathbf{X} (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{b} = \alpha^2 (\mathbf{Y}^t \mathbf{Y}) \mathbf{b} \quad (8)$$

(8)式から $\mathbf{b}$ を求め、(5)式に代入した後 $\mathbf{a}$ を求める。

(8)式は一般固有値問題となる。(8)式を計算する為に、コレット-分解を必要とする。
これは $Y^t Y = U^t U$ の形へ分解して、
次の標準固有値問題を解く事になる。

$$U^{-t} [Y^t X (X^t X)^{-1} X^t Y] U^{-1} Z = \alpha^2 Z \quad (9)$$

(9)式の計算の為に $X^t X$ をコレット-分解して $V^t V$, $W = (X^t X)^{-1} X^t Y$ として、

$$(V^t V) W = X^t Y \quad (10)$$

を計算することによる。

3 . 正準相関分析代数学的導き方

以下のステップは、正準相関分析に対してラグランジュ乗数法を用いなくて線形代数学の立場から考察してみたい。

n 次元ベクトル空間上で、次のデータを定義する。

$$\begin{aligned} n \times p \quad (n \gg p) \\ X = (x_1, \dots, x_p) \quad , \\ x_j = (x_{1j}, \dots, x_{nj})^t \quad (j=1, \dots, p) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} n \times q \quad (n \gg q) \\ Y = (y_1, \dots, y_p) \quad , \\ y_j = (y_{1j}, \dots, y_{nj})^t \quad (j=1, \dots, p) \end{aligned} \quad (12)$$

ここで

$$\begin{aligned} X^t X &: p \times p \text{ 行列} \\ Y^t Y &: q \times q \text{ 行列} \\ X^t Y &: p \times q \text{ 行列} \end{aligned} \quad \text{とする。}$$

対称行列の対角化

$U^t U = 1$ の条件の下で、 $U^t A U$ の最大値を λ_1 として $U_1^t A U_1 = \lambda_1$
 $U_1^t U_1 = 1$ とする。

一般に $U^t U = 1$, $U_i^t U = 0$ ($i=1, \dots, k-1$) の条件の下で $U^t A U$ の最大値を λ_k として、

$$U_k^t A U_k = \lambda_k \quad , \quad U_k^t U_k = 1 \quad , \quad U_i^t U_k = 0 \quad (i=1, \dots, k-1)$$

となる U_k を固定する。

この操作を $k=m$ まで続けて得られた λ_k , U_k による行列を定義する。

$$V = [U_1, \dots, U_m] \quad , \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \lambda_m \end{bmatrix}$$

この時、 $V^t A V = \Lambda$, $A V = V \Lambda$

$k=1, \dots, m$ についての

$$A u_k = \lambda_k u_k \quad , \quad (u_i^t u_j = \delta_{i,j}) \quad (13)$$

なる λ_k, u_k , A の固有値、固有ベクトルの系があることを示す。

A の固有値 μ ($\forall x$; $Ax = \mu x$) は(13)式の λ_k の何れかと一致する。

代数学として、次の定理が存在する。

[定理]

A は対称行列、 B は対称正定値行列とし、

$$w^t B w = 1 \quad , \quad w_i^t B w = 0 \quad ; \quad i=1, \dots, k-1$$

の条件の下で $w^t A w$ の最大値問題の解 λ_k , w_k ($k=1, \dots, m$) が存在し、これが、一般固有値問題

$$A w = \lambda B w \quad (14)$$

の $w_i^t B w_j = \delta_{i,j}$ の解の系である。

ここで

$n \times m$ 行列 X のQR分解を考える。

X にシュミット(Shmidt)直交化を施して、線型部分空間の中で考える。

$$\text{Span } X = \text{Span } X_r = \text{Span } Q_r \quad ,$$

$$Q_r^t Q = 1$$

$$X_r = Q_r R_r \quad , \quad r = \text{rank } X \quad (15)$$

なる正規直交の Q_r と上三角行列 R_r を選ぶ事が出来る。

特に X の一次独立なベクトルの最大個数 $\text{rank } X = m$ の時、

$$X = Q R \quad , \quad Q^t Q = I \quad , \quad R \text{ は上三角行列となる。}$$

このとき $A = X^t X$ にコレスキー(Cholesky)分解 $A = U^t U$ を施すと $U = R$ となる。

X はハウスホルダー(Householder)上階段化法により (15)式を

満足する $\mathbf{X}_r$, $\mathbf{Q}_r$ を求める事が出来る。

ここで $\mathbf{X}_1^t \mathbf{X}_r = \mathbf{R}_1^t \mathbf{R}_r$ である。

$\mathbf{X}^t \mathbf{X}$ に対角上軸選択 ガウス(Gauss)の消去法を施すことは $\mathbf{X}$ に列選択のシュミットQRを施すことは同じになる。

(11)式のデータは $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^n$ の線型一次結合

$$\mathbf{f} = \mathbf{X}\mathbf{a} \quad (= \sum \mathbf{x}_j \mathbf{a}_j) \quad (16)$$

ここで $\text{Span } Y$ 上の正規直交基底である。

$$\mathbf{Q}_y = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_r) \quad (17)$$

を定義する。

ただし、 Y から一次従属なベクトルを取り除く。

(17)式の $\mathbf{Q}_y$ はQR分解 $\mathbf{Y} = \mathbf{Q}_r \mathbf{R}_r$ による。

ここで正準相関分析のもととなる p 次元空間の最大分散をもたらす主成分分析とその拡張としての回帰主成分分析を考えると、正準相関分析は回帰主成分分析に関連して導く事が可能である。〔参考文献[2]参照〕

同じく n 次元ベクトル空間を定義して、代数的に解釈する。

先ず、データ $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p)$, $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^n$ の線型一次結合として、

(16)式を取り上げる。

これは

$\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1$ の条件の下で各 $\mathbf{x}_j$ から $\mathbf{f}$ への正射影として
ベクトル $\mathbf{p}_f \mathbf{x}_j = (\mathbf{f}^t \mathbf{x}_j) \mathbf{f}$ の長さの二乗和

$$\sum_{j=1}^p \|\mathbf{p}_f \mathbf{x}_j\|^2 = \sum_{j=1}^p (\mathbf{X}_j^t \mathbf{f})^2 \quad (18)$$

を最大にする様な $\mathbf{f}$ つまり $\mathbf{a}$ を求める問題になる。

一般的に $\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1$, $\mathbf{f}_i^t \mathbf{f} = 0$ ($i=1, \dots, k-1$) の条件の下で (18)式を最大にするような $\mathbf{f}$ を (16)式の $\mathbf{f} = \mathbf{X}\mathbf{a}$ と表現し これがデータ $\mathbf{X}$ の第 k 主成分と呼ぶ。

(18)式より

$$\sum_{j=1}^p (\mathbf{x}_j^t \mathbf{f})^2 = \|\mathbf{X}^t \mathbf{f}\|^2 = \|\mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a}^t (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^2 \mathbf{a} \quad (19)$$

であるから、これを $\mathbf{f}^t \mathbf{f} = \mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = 1$ の条件の下での最大固有値を解くという問題になる。

つまり、これを一般固有値問題として

$$(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^2 \mathbf{a} = \lambda (\mathbf{X}^t \mathbf{X}) \mathbf{a} \quad (20)$$

を解く問題になる。

計算上は $\mathbf{X}$ の中から一次従属なベクトルを取り除いて、 $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$ が正則となる様にして解く為、次の標準固有値問題を解けば良いことになる。

従って、

$$\mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a} \quad (21)$$

となる。

ここで、再び $n \times p$, $n \times q$ のデータとして考える。

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p) \quad , \quad \mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_q)$$

に対して、 $\text{Span } \mathbf{X}$ 上の合成データ

$\mathbf{f} = \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{x}_1 \mathbf{a}_1 + \dots + \mathbf{x}_p \mathbf{a}_p$ を定義し、条件 $\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1$ のもとで各 $\mathbf{y}_j$ から $\mathbf{f}$ への正射影の二乗和を導くと、

$$\sum_{j=1}^q \|\mathbf{p}_f \mathbf{y}_j\|^2 = \sum (\mathbf{y}_j^t \mathbf{f})^2 = \|\mathbf{Y}^t \mathbf{f}\|^2 \quad (22)$$

(22)式を最大にする $\mathbf{f}$ を $\mathbf{f}_1 = \mathbf{X} \mathbf{a}_1$ とおき、これは $\text{Span } \mathbf{X}$ 上の第一回帰主成分である。

これの一般展開として、

$$\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1 \quad , \quad \mathbf{f}_i^t \mathbf{f} = 0 \quad (i=1, \dots, k-1) \quad \text{の条件の下で(22)}$$

式を最大にする $\mathbf{f} = \mathbf{f}_k = \mathbf{X} \mathbf{a}_k$ とおき $\text{Span } \mathbf{X}$ 上の第 k 回帰主成分と定義出来る。

(22)式は

$$\|\mathbf{Y}^t \mathbf{f}\|^2 = \|\mathbf{Y}^t \mathbf{X} \mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a}^t \mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{Y}^t \mathbf{X} \mathbf{a} \quad (23)$$

であるから、一般固有値問題を解くことに帰着される。

$$\mathbf{X}^t \mathbf{Y} \mathbf{Y}^t \mathbf{X} \mathbf{a} = \lambda (\mathbf{X}^t \mathbf{X} \mathbf{a}) \quad (24)$$

(24)式は $\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1$ のもとで最大値問題を解く事となり、つまり

次の一般固有値問題

$$(X^t X)^2 \mathbf{a} = \lambda (X^t X) \mathbf{a} \quad (25)$$

を解くのと同じになる。

実際には X の中から一次従属なベクトルは取り除いて、 $X^t X$ が正則となる様にした後に解くから、次の標準固有値問題

$$X^t X \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a} \quad (26)$$

を解けば良い事になる。

ここで(17)式の Q_y に対して、(26)式の X 上の回帰主成分分析を当てはめるのが正準相関分析の考え方となる。

(24)式に対して、(17)式の Q_y より、一般固有値問題

$$X^t Q_y Q_y^t X \mathbf{a} = \lambda (X^t X \mathbf{a}) \quad (27)$$

となる。

(27)式を解いて

$$\mathbf{f}_k = X \mathbf{a}_k, \quad k=1, \dots, n \text{ を } X \text{ 上の第 } k \text{ 正準主成分という。}$$

ここで X のほうも QR 分解して、 $X = Q_x R_x$ とおけば、(27)式は

$$Q_x^t Q_y Q_y^t Q_x \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z}, \quad (\mathbf{z} = R_x \mathbf{a}) \quad (28)$$

となる。

ここで、 $\mathbf{f} = X\mathbf{a}$ を $\text{Span } X$ に正射影したベクトル $P_y \mathbf{f}$ を考える。

$\mathbf{f}^t \mathbf{f} = 1$ であるならば、 $\text{Span } Y$ 上の正規直交基底

$$Q = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_y)$$

を使用して、

$$\begin{aligned} P_y \mathbf{f} &= \mathbf{q}_1(\mathbf{q}_1^t \mathbf{f}) + \dots + \mathbf{q}_y(\mathbf{q}_y^t \mathbf{f}) \\ &= Q_y Q_y^t \mathbf{f} \end{aligned} \quad (29)$$

従って、

$$\|P_y \mathbf{f}\|^2 = \mathbf{f}^t Q_y Q_y^t Q_y Q_y^t \mathbf{f} = \mathbf{f}^t Q_y Q_y^t \mathbf{f} = \mathbf{a}^t X^t Q_y Q_y^t X \mathbf{a} \quad (30)$$

これを $\mathbf{a}^t X^t X \mathbf{a} = 1$ の条件の下で最大にすることから、(27)式の固有値問題が導かれる。

次に X と Y の役割を入れ替えると、 $\text{Span } Y$ 上の正準主成分

$$\mathbf{g}_k = \mathbf{Y}\mathbf{b}_k \quad \text{を固有値問題として}$$

$$\mathbf{Y}^t \mathbf{Q}_x \mathbf{Q}_x^t \mathbf{Y} \mathbf{b} = \mu (\mathbf{Y}^t \mathbf{Y}) \mathbf{b} \quad (31)$$

を解いて求める事が出来る。

つまり(27)式の固有値と(31)式の固有値はおなじである。

(31)式を、いま

$$\begin{aligned} \mathbf{z}' &= \mathbf{R}_y \mathbf{b} \quad \text{とおくことによって} \\ \mathbf{Q}_y^t \mathbf{Q}_x \mathbf{Q}_x^t \mathbf{Q}_y \mathbf{z}' &= \mu \mathbf{z}' \end{aligned} \quad (32)$$

とおき、

$$\mathbf{G} = \mathbf{Q}_x^t \mathbf{Q}_y \quad \text{とおくことで、(28)式、(32)式は次の形となる。}$$

$$\mathbf{G} \mathbf{G}^t \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z} \quad (33)$$

$$\mathbf{G}^t \mathbf{G} \mathbf{z}' = \mu \mathbf{z}' \quad (34)$$

となる。

$$\mathbf{G} \mathbf{G}^t \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z} \quad \text{より} \quad \mathbf{G}^t \mathbf{G} (\mathbf{G}^t \mathbf{z}) = \lambda (\mathbf{G}^t) \mathbf{z} \quad \text{から求められる。}$$

これを計算手順から考えると、回帰主成分分析は正準相関分析の計算ステップの中に含まれる。

QR分解の方法はハウスホルダー法を使用する。

Y にハウスホルダー法のQR

$$\mathbf{Q}_y^t \mathbf{Y} = \mathbf{R}_r$$

で定義出来、

$$\text{ここで} \quad \mathbf{Q}_y^t = (\mathbf{I} - \alpha_r \mathbf{w}_r \mathbf{w}_r^t) \cdots (\mathbf{I} - \alpha_1 \mathbf{w}_1 \mathbf{w}_1^t) \quad (35)$$

である。

$$\mathbf{Q}_y = (\mathbf{I} - \alpha_1 \mathbf{w}_1 \mathbf{w}_1^t) \cdots (\mathbf{I} - \alpha_r \mathbf{w}_r \mathbf{w}_r^t) \quad (36)$$

を作る。

$n \times (p + r)$ 行列、 (X, Q_y) に p 段までのハウスホルダーQRを施し、
直接に

$$\mathbf{G} = \mathbf{Q}_x^t \mathbf{Q}_y \quad \text{を} \quad \mathbf{Q}_y \quad \text{の上部に作る。}$$

[ハウスホルダー]

ここで計算上 G の二重の対角化を H 及び K とおく。

$H^t G K^t = B$ としてから、次の三重対角行列を作る。

$$T = B B^T \quad (37)$$

(37)式の T の固有値、固有ベクトルを求める。

$$T U = U \Lambda, \quad (\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p))$$

$$Z = H^t U, \quad A = R_x^{-1} Z$$

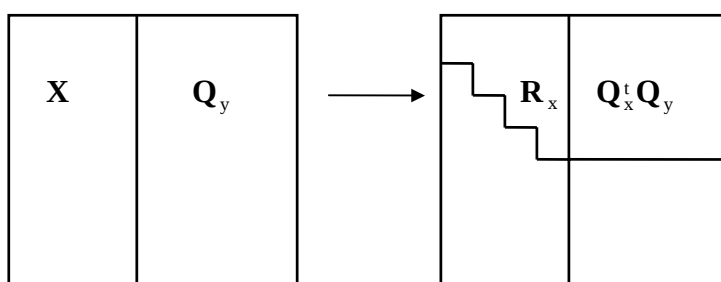
$$Z' = G^t Z, \quad B = R_y^{-1} Z'$$

$$\text{ここで} \quad G G^t Z = \Lambda Z$$

$$G^t G Z' = \Lambda Z'$$

である。

以上、計算対象を図に示すと以下の形となる。



(図 1)

計算手順にハウスホルダー法を用いることにより相対誤差が小さくなり、
実用面で比較的有益となると考えられる。

4 . ハウスホルダー変換とQR法

行列の固有値問題を解くとき、任意のベクトルに行列 A を何度も乗じて行くと、その結果は、次第に A の絶対値最大の固有値に属する固有ベクトルに近づいて行く性質がある。古典的反復法であるヤコビ法あたりは、次元が大きくなるに従って計算量が格段に大きくなり計算時間がかかる。このため消去法の考えで、計算出来る所迄計算を進め、その後反復により固有値を求める方法が提唱された。これがハウスホルダー変換付きQR法である。ハウスホルダー法は、行列を一定の手順により、固有値が同じ中継ぎ点の行列（三重対角行列）に変換する方法である。この変換後の行列の固有値を反復法で求める。この中継ぎ点の行列の性質をうまく利用する事で、反復法だけで計算する方法に比べて、固有値を高速に求める

ことが出来る。行列 A に対して、ここで任意の正則行列を Q とおくと、 $B = Q^{-1}AQ$ の形を相似変換といい、行列 B は行列 A と同じ固有値を持つ。

更に Q が直交行列であれば、この相似変換は直交変換と呼ばれ、固有値の誤差が計算途中で拡大することがない安定変換となる。

ハウスホルダー変換は n 次元ベクトル空間に $ノルム$ を定義し、 Q に直交行列の考えを取り入れている。幾何学的には鏡像変換の考えである。実対称行列に鏡像変換を作用させる事により、実対称 3 重対角行列に相似変換する方法である。

QR法は行列 A が正則行列であると、直交行列 Q ($Q^t = Q^{-1}$) と右上三角行列 R とに分解出来る。この時 Q と R で随時構成されて行く行列 A_k に対して、反復を繰り返す事により行列 A_k の対角線上に収束した成分が A の固有値となる。更に、 Q の反復行列から構成される行列の各列ベクトルは、行列 A_k の固有値に対応した固有ベクトルとなる。

この時、行列が 3 重対角行列、又はハッセバルグ行列であれば、その計算時間が少なくてすむ。つまりハウスホルダー変換によって、もとの行列を 3 重対角行列等に変換して、その後 QR法を適用することで計算効果が発揮出来る。

5 . プログラミング例

ハウスホルダー変換付き QR法 倍精度計算 (部分)

[y に列選択付きハウスホルダー変換で Q y を作り、列選択付き QR 分解を行う。]

```
.
Do 10 j=1,m
  Do 10 i=1,n
    y(i,j)=x(i,l+j)
10 continue
Do 70 j=1,m
  Do 20 i=1,n
    Qy(i)=0.0
20 continue
    Qy(i)=1.0
Do 50 k=j,1, - 1
  S=0.0
Do 30 i=k,n
  S=S+y(i,k)* Qy(i)
30 continue
  rj=af(k)* S
Do 40 i=k,n
  Qy(i)=Qy(i) - rj* y(i,k)
```

```

40 continue
50 continue
    Do 60 i=1,n
        x(i,l+j)=Qy(i)
60 continue
70 continue
    Do 90 j=1,m
        Do 80 i=1,l
            g(i,j)=x(i,l+j)
80 continue
90 continue
    .

```

6．計算結果の表は別紙に示す。

7．検討

ハウスホルダー変換付きQR分解法においては、計算結果、打ち切り誤差 $\text{eps}=10^{-4}$ 程度で十分実用的な精度が得られると判断出来る。固有値計算の部分では、相対誤差に関して、厳密解に近いとして定評のあるガウスの消去法と比較して、最大誤差は 0.4×10^{-3} 程度であった。テストケースとしてのサンプル数 $n=180$ 、正準変数1番目4変数、正準変数2番目3変数の場合、計算時間はガウスの消去法に比べて、約73%であった。ハウスホルダー変換の後のQR法は、ランソスとグラハムス加のよる標準的な解法による。

8．まとめ

正準相関分析を始めとする幾つかの多変量解析では、解析学の考え方から成り立っており、これは堅実な方法である。その場合、解析法の基礎が関数の条件付き最大（又は最小）問題をラグランジュ乗数法に基づいて、導かれている。このラグランジュ乗数法だけでは、一意の「停留解」が得られ、これが最大解であるには別途説明を必要とする。ここでは線型代数学の立場から基礎式を定義し、代数的表現と固有値問題の立場から考えをまとめて論じた。代数的表現による正準相関分析の数値計算手法には、その解法によっていろいろな特徴が見つかる。一般的な計算機を対象とした場合、数値計算の基本として、その解法の収束性、正確性、安定性が重要である。このうち収束性と正確性については、ほぼ実証可能である。3つ目の安定性の成立には、鏡像変換を主とするハウスホルダー変換の後、QR法に導く点は、正準相関分析の固有値計算にとってこの方法の後、元の行列をグラムシュミット直交化による方法

等でQR法を適用することにより、更に安定性のある解法として効果がある事が予想される。このことは今後の課題としたい。

〔参考文献〕

- [1] 奥野忠一 他、多変量解析法、日科技連、(1971)
- [2] 奥野忠一 他、続多変量解析法、日科技連、(1976)
- [3] 森正武、数値解析法、朝倉書店、(1984)
- [4] M.G.ケントール、浦昭二、竹並輝之共訳、多変量解析の基礎、サイエンス社、(1972)
- [5] 斉藤正彦、基礎数学 1、線型代数入門、東京大学出版会、(1978)
- [6] Bartlett,M.S.,The general canonical correlation distribution,Ann. Math. Statist.,vol.18,pp.1. (1967)
- [7] Maxwell,A.E. Canonical variates analysis when the variable are dichotomous. Educ. Psych. Meas. vol.21, No2.(1976)