更新　2024/08/21; 2024/03/12; 2017/10/29; 2017/10/13

統計学 One Point 3

「最小二乗法・交互最小二乗法」

正　誤　表

第 1 章　最小二乗法

【21 ページ】

下から 4 行目

（誤）　任意の $p \times 1$ ベクトル $\mathbf{u}$ を用いて

（正）　任意の $p \times 1$ ベクトル $\mathbf{u}$ $(\neq \mathbf{0})$ を用いて

【31 ページ】

上から 3 行目

（誤）　$z = 62.06$

（正）　$z = 62.01$

【32 ページ】

上から 11 行目

（誤）　の重心は $(\bar{x}, \bar{y})$ なので

（正）　の重心は $a_1\bar{x} + a_2\bar{y}$ なので

【33 ページ】

上から 8 行目　と　下から 6 行目

（誤）　$\lambda = \dfrac{(s_x^2 + s_y^2) \pm \sqrt{(s_x^2 - s_y^2)^2 - 4s_{xy}^2}}{2}$

（正）　$\lambda = \dfrac{(s_x^2 + s_y^2) \pm \sqrt{(s_x^2 - s_y^2)^2 + 4s_{xy}^2}}{2}$

下から 2 行目〜34 ページの上から 2 行目

（誤） $s_{xy} = 12.143$ より，$\lambda_1 = 28.974$ となり，$a_1 = 0.8359$，$a_2 = 0.5489$ となる．したがって，主成分得点は，$z_i = 0.8359x_i + 0.5489y_i$ で求められる．また，x-y 平面上の直線の方程式は，$0.5489x - 0.8359y + 2.269 = 0$，すなわち，$y = 0.6567x + 2.715$ となり，

（正） $s_{xy} = 10.625$ より，$\lambda_1 = 27.597$ となり，$a_1 = 0.8496$，$a_2 = 0.5275$ となる．したがって，主成分得点は，$z_i = 0.8496x_i + 0.5275y_i$ で求められる．また，x-y 平面上の直線の方程式は，$0.5275x - 0.8496y + 2.580 = 0$，すなわち，$y = 0.6209x + 3.037$ となり，

（s_x^2 と s_y^2 には標本分散（分母がサンプルサイズ）として求めた値を使い，s_{xy} には不偏分散（分母がサンプルサイズ -1）として求めた値を使っていました。どちらかに統一されていれば問題なかったのですが，この不整合のために，λ_1 以降の値が違っていました。なお，図 1.11〜図 1.13 は正しく描けています。）

第 2 章　交互最小二乗法

【39 ページ】

下から 1 行目

（誤） $\beta_1 = \beta_1^*$，$c = c^*$ と固定し，

（正） $\beta_0 = \beta_0^*$，$\beta_1 = \beta_1^*$ と固定し，

【41 ページ】

図 2.1

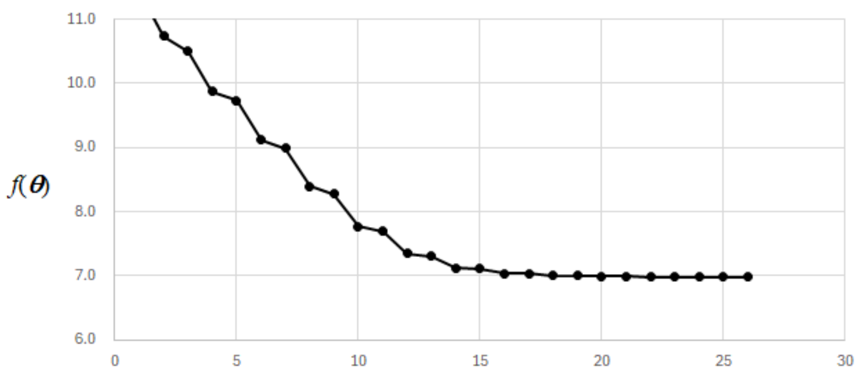

図 2.1 の縦軸の目盛が正しくありませんでした。

図 2.1 のキャプション

（誤） 横軸の偶数はステップ [S2] の終了時，奇数は [S3] の終了時に対応

（正） 横軸の奇数はステップ [S2] の終了時，偶数はステップ [S3] の終了時に対応

下から 2 行目

（誤） ステップ 25 で反復を打ち切ると，$\beta_0^* = 3.255$

（正） ステップ 26 で反復を打ち切ると，$\beta_0^* = 3.256$

【42 ページ】

上から 2 行目

（誤） と表し，$\boldsymbol{\theta}_r^{[t]} = [\boldsymbol{\theta}_1^{[t]\top}, \ldots,$

（正） と表し，$\boldsymbol{\theta}^{[t]} = [\boldsymbol{\theta}_1^{[t]\top}, \ldots,$
（添え字の r が不要でした。）

【48〜50 ページ】

2.2.3 節全部と 2.2.4 節の最初の 8 行目まで

（誤） 一部，説明におかしなところがありましたので,（正）のようにあらためたいと思います。

（正） 6〜8 ページに掲載した差し替え文でご確認ください。

【53 ページ】

下から 4 行目

（誤） および，0 以上 1 以下の

（正） および，$0 < \alpha < 1$ の

【60 ページ】

上から 13 行目

（誤） 2.2.2 項に記した

（正） 2.3.2 項に記した

【61 ページ】

図 2.6 の (A) の C の表

（誤）

	C	
$\mathbf{c}_1$	-1.00	0.80
$\mathbf{c}_2$	1.14	0.20
$\mathbf{c}_3$	-1.10	-0.75

（正）

	C	
$\mathbf{c}_1$	-1.00	0.80
$\mathbf{c}_2$	1.14	0.20
$\mathbf{c}_3$	-0.10	-0.75

【63 ページ】

上から 2 行目〜3 行目

（誤） $g_k(0) < 0, \quad \lim_{\lambda_l \to \infty} g_k(\lambda_k) = \infty, \quad \lim_{\lambda_l \to -\infty} g_k(\lambda_k) = \infty$

（正） $g_l(0) < 0, \quad \lim_{\lambda_l \to \infty} g_l(\lambda_l) = \infty, \quad \lim_{\lambda_l \to -\infty} g_l(\lambda_l) = \infty$

上から 7 行目

（誤） $\lambda_l = \arg \min_{1 \le u \le 4} g_l(\lambda^*_{lu})$

（正） $\lambda_l = \arg \min_{1 \le u \le 4} \eta_l(\lambda^*_{lu})$

【64 ページ】

図 2.7 の［S3］

（誤） 関数 (2.36) を求める．

（正） 行列 (2.45) を求める．

【69 ページ】

下から 5 行目

（誤） $(p \times (p+m))$ であり，

（正） $((p+m) \times (p+m))$ であり，

【71 ページ】

上から 11 行目

（誤） $\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + n\mathrm{tr}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Lambda}^\top + n\mathrm{tr}\mathbf{\Psi}^2 - 2\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{F}\mathbf{\Lambda} - 2\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{U}\mathbf{\Psi}$

（正） $\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + n\mathrm{tr}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Lambda}^\top + n\mathrm{tr}\mathbf{\Psi}^2 - 2\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{F}\mathbf{\Lambda}^\top - 2\mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{U}\mathbf{\Psi}$

【72 ページ】

下から 4 行目

（誤） 降順

（正） 昇順

第 3 章　関連する研究と計算環境

【82 ページ】

上から 7 行目〜9 行目

（誤）　当然,

$$\|\dot{\boldsymbol{\theta}}^{[T']} - \boldsymbol{\theta}^{\sigma[T]}\|^2 < \delta$$

である.

（正）　ここで,

$$\|\dot{\boldsymbol{\theta}}^{[T']} - \boldsymbol{\theta}^{\sigma[T]}\|^2 < 2\delta$$

となっているはずである.

（「当然」という表現を使いましたが，厳密な数学的議論に基づくものではありませんので，このように言い回しを変えたいと思います。）

【85 ページ】

下から 11 行目

（誤）

$$\mathrm{vec}\mathbf{X}(\mathbf{Q}) = \left[\mathbf{G}_1\mathbf{q}_1^\top, \ldots, \mathbf{G}_p\mathbf{q}_p^\top\right]^\top$$

（正）

$$\mathrm{vec}\mathbf{X}(\mathbf{Q}) = \left[(\mathbf{G}_1\mathbf{q}_1)^\top, \ldots, (\mathbf{G}_p\mathbf{q}_p)^\top\right]^\top$$

【87 ページ】

下から 5 行目

（誤）　2 桁も一致していない

（正）　小数点以下 2 桁も一致していない

【48〜50 ページの差し替え】

2.2.3 最適尺度法

非計量 ALS 法の提案者は，カテゴリーに得点を与える Q ステップを指して，特に**最適尺度法**（optimal scaling）とよんでいるが (例えば，**?**)，この呼称には,「離散変数のカテゴリカルなデータの背後には連続的な尺度が潜在し，データから，背後の尺度上の値 q_{jk} を同定する行為が Q ステップである」という意味合いがある．なお，**?**，**?**らは，Q ステップを**最適得点化**（optimal scoring）とよんでいる．

さて，NCA の Q ステップで求めるべきパラメータは $\mathbf{q}_j$ $(j = 1, \ldots, p)$ であるが，式 (2.10) からわかるように，$\mathbf{q}_j$ が現れるのは，式 (2.10) の右辺から加算記号を除いた $f_j(\mathbf{q}_j) = ||\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j - \mathbf{Fa}_j||^2$ だけである．このことは，最適な $\mathbf{q}_j$ を求めるためには，$f_j(\mathbf{q}_j)$ だけを考慮すればよいことを表す．さらに,

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{D}_j^{-1}\mathbf{G}_j^\top\mathbf{Fa}_j \tag{2.15}$$

を用いて，$f_j(\mathbf{q}_j)$ は $||\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j - \mathbf{Fa}_j||^2 = ||\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j - \mathbf{Fa}_j||^2 + (\mathbf{q}_j - \mathbf{r}_j)^\top\mathbf{D}_j(\mathbf{q}_j - \mathbf{r}_j)$ のように分割され，右辺で $\mathbf{q}_j$ に関係するのは，簡潔な関数

$$g_j(\mathbf{q}_j) = (\mathbf{q}_j - \mathbf{r}_j)^\top\mathbf{D}_j(\mathbf{q}_j - \mathbf{r}_j) \tag{2.16}$$

だけである．以上より，Q ステップでは，$j = 1, \ldots, p$ のそれぞれについて，$\mathbf{q}_j$ に課される制約条件のもとで関数 (2.16) を最小にする $\mathbf{q}_j$ を求めればよい．

$\mathbf{J} = \mathbf{I}_n - n^{-1}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^\top$ とおくと，上記の最小化が，ベクトル $\mathbf{JG}_j\mathbf{q}_j$ と $\mathbf{JG}_j\mathbf{r}_j$ の余弦

$$\cos_j(\mathbf{q}_j) = \frac{\mathbf{r}_j^\top\mathbf{G}_j^\top\mathbf{J}^\top\mathbf{JG}_j\mathbf{q}_j}{\sqrt{\mathbf{r}_j^\top\mathbf{G}_j^\top\mathbf{J}^\top\mathbf{JG}_j\mathbf{r}_j}\sqrt{\mathbf{q}_j^\top\mathbf{G}_j^\top\mathbf{J}^\top\mathbf{JG}_j\mathbf{q}_j}} \tag{2.17}$$

の最大化と同等であることが，次のように示される．条件 (2.12) の右の式 $\mathbf{q}_j^\top\mathbf{D}_j\mathbf{q}_j = n$ を考慮すると，関数 (2.16) は $g_j(\mathbf{q}_j) = n - 2\mathbf{r}_j^\top\mathbf{D}_j\mathbf{q}_j + \mathbf{r}_j^\top\mathbf{D}_j\mathbf{r}_j$ と書き換えられ，条件 (2.12) のもとでの関数 (2.16) の最小化と $g_j^\#(\mathbf{q}_j) = \mathbf{r}_j^\top\mathbf{D}_j\mathbf{q}_j = \mathbf{r}_j^\top\mathbf{G}_j^\top\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j$ の最大化の同等性が示される．さらに,

条件 (2.12) の左の $\mathbf{1}_n^\top \mathbf{G}_j \mathbf{q}_j = 0$ と同等である $\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j = \mathbf{G}_j\mathbf{q}_j$ を用いて，$g_j^{\#}(\mathbf{q}_j) = \mathbf{r}_j^\top \mathbf{G}_j^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j$ と表せるとともに，条件 (2.12) の右の式は $\mathbf{q}_j^\top \mathbf{G}_j^\top \mathbf{G}_j\mathbf{q}_j = \mathbf{q}_j^\top \mathbf{G}_j^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j = n$ と書き換えられ，これは，ベクトル $\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j$ の長さが一定であることを示す．以上に加えて $\mathbf{r}_j^\top \mathbf{G}_j^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j$ は $\mathbf{q}_j$ に関係ない定数であるので，関数 (2.16) の最小化と関数 (2.17) の最大化の同等性が示される．ここで，関数 (2.17) は，ベクトル $\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j$ が $\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j$ と同じ方向に伸びるとき，つまり，$\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j = \alpha_j \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j$，ただし，$\alpha_j > 0$ のときに最大化される．ここで，

$$\alpha_j = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{\mathbf{r}_j^\top \mathbf{G}_j^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j}} \tag{2.18}$$

とおけば，条件 (2.12) の右の式は満たされる．変数 j が名義尺度の場合には，カテゴリー得点に課されるべき条件は，(2.12) 以外にはなく，(2.12) の左の式と $\mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{q}_j = \alpha_j \mathbf{J}\mathbf{G}_j\mathbf{r}_j$ を満たす $\mathbf{q}_j$ が解となる．これは，

$$\mathbf{q}_j = \alpha_j \left[\mathbf{r}_j - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{K_j}\mathbf{1}_n^\top \mathbf{G}_j\mathbf{r}_j \right] \tag{2.19}$$

によって与えられる．変数 j のカテゴリーが順序変数で，番号が $1, \ldots, K_j$ の昇順で大きな値に対応するというときには，

$$q_{j1} \leq \ldots \leq q_{jK_j} \tag{2.20}$$

という制約条件が付加される．これと条件 (2.12) のもとで関数 (2.16) を最小にする $\mathbf{q}_j$ は，**単調回帰法**とよばれる方法によって，$\mathbf{r}_j$ を $\mathbf{r}_j^{\#}$ $(K_j \times 1)$ に変換し，$\mathbf{r}_j^{\#}$ を式 (2.18)，(2.19) の $\mathbf{r}_j$ に代入することによって求められる．単調回帰の理論は紙面の制約から引用文献の??，?に譲り，$\mathbf{r}_j$ を $\mathbf{r}_j^{\#}$ に変換するアルゴリズムだけを図 2.2 に記す．このアルゴリズムは，?にならったものである．

2.2.4 非計量主成分分析の適用例

まず，2.2.2 節と前節の結果をまとめた NCA のアルゴリズムを次にリストしておく．

[S1] $\mathbf{F}$，$\mathbf{A}$ の初期値を求める．

単調回帰法

ベクトル (2.15) の第 k 要素を r_{jk}，求めるべき $\mathbf{r}_j^{\#}$ の第 k 要素を $r_{jk}^{\#}$，$\mathbf{D}_j$ の第 k 対角要素を d_{jk} と表すと，r_{jk} の $r_{jk}^{\#}$ への変換は，次のステップを通して達成できる．

[S1] $r_{j1}^{\#} = r_{j1}$ とおく．

[S2] $r_{j1}^{\#}, \ldots, r_{j,k-1}^{\#}$ が求められたとする．$r_{jk}^{\#}$ に仮の値 r_{jk} を与える．

[S3] $r_{jk}^{\#} \geq r_{j,k-1}^{\#}$ のとき，$r_{jk}^{\#} = r_{jk}$ と定め，$k := k+1$ として [S2] に移る．

[S4] $r_{jk}^{\#} < r_{j,k-1}^{\#}$ のとき，

$$\bar{r}_{jk} = \frac{1}{d_{jk} + \displaystyle\sum_{l=1}^{L} d_{j,k-l}} \left(d_{jk} r_{jk} + \sum_{l=1}^{L} d_{j,k-l} r_{j,k-l} \right) \geq r_{j,k-L-1}^{\#}$$

を満たす最小の $L\ (= 1, \ldots, k-2)$ が見つかれば，$r_{j,k-L}^{\#} = \ldots = r_{jk}^{\#} = \bar{r}_{jk}$ とおき，見つからなければ，$r_{j1}^{\#} = \ldots = r_{jk}^{\#} = \bar{r}_{jk}$ とおく．

[S5] $k = K_j$ であれば，終了する．

（求めた $\mathbf{r}_j^{\#}$ を式 (2.18)，(2.19) の $\mathbf{r}_j$ に代入して $\mathbf{q}_j$ を求める．）

Figure 2.2: 単調回帰法のアルゴリズム

[S2] $j = 1, \ldots, p$ のそれぞれについて，以下のことを行う．変数 j が名義変数のときは，$\mathbf{q}_j$ を式 (2.19) で求め，順序変数のときは，図 2.2 のように $\mathbf{r}_j^{\#}$ を求めた後，式 (2.18)，(2.19) の $\mathbf{r}_j$ に代入して $\mathbf{q}_j$ を求める．

[S3] 式 (2.14) より $\mathbf{F}$，$\mathbf{A}$ を求める．

[S4] 収束していれば終了し，収束していなければ [S2] に戻る．