PLS における回帰係数

明治大学 理工学部 応用化学科
データ化学工学研究室　金子 弘昌

前提

- ✓部分的最小二乗回帰 (Partial Least Squares Regression, PLS) の以下の記事を読んでいることが前提です

  https://datachemeng.com/partialleastsquares/

PLS の基本式 (yは 1 変数)

X、**y** はオートスケーリング後 (平均 0、標準偏差 1)

オートスケーリングについては こちら

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^{A} \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^{\mathrm{T}} + \mathbf{E} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{y} = \sum_{a=1}^{A} \mathbf{t}_a q_a + \mathbf{f} = \mathbf{T}\mathbf{q} + \mathbf{f}$$

- ✓ A : PLS の成分数
- ✓ $\mathbf{t}_{\mathrm{a}}$: a 番目の主成分
- ✓ $\mathbf{p}_{\mathrm{a}}$: a 番目のローディング
- ✓ **E** : **X** の残差

- ✓ q_{a} : a 番目の係数
- ✓ **f** : **y** の残差

行列の表し方やローディングについては こちら

PLS における回帰係数

PLS でも最小二乗法による線形重回帰分析
https://datachemeng.com/ordinaryleastsquares/

と同様にして、以下のように表すことができる

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{f}$$

回帰係数 **b** は、以下のように計算される

$$\mathbf{b} = \mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

✓ **W** : ウェイトベクトル $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots$ を横に並べた行列

なぜこのように表されるのか、証明します

1 成分モデル 基本式と証明したいこと

基本式 $\mathbf{X} = \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}$ $\mathbf{y} = \mathbf{t}_1 q_1 + \mathbf{f}$

$\mathbf{E}\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$ を証明します

1 成分モデル 式変形 $\mathbf{Ew}_1=0$ の証明

$$\mathbf{X}=\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}+\mathbf{E}$$

両辺に右から $\mathbf{w}_1$ をかけると、 $\mathbf{Xw}_1=\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1+\mathbf{Ew}_1$

$\mathbf{t}_1=\mathbf{Xw}_1$ より、 $\mathbf{t}_1=\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1+\mathbf{Ew}_1$

ここで、

$$\mathbf{p}_1=\frac{\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_1}=\frac{\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xw}_1}{\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xw}_1}$$

$$\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1=\frac{\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xw}_1}{\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xw}_1}=1$$

(同様にして、任意の
a 成分において $\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_a=1$)

・・・あとで使います

よって、

$$\mathbf{t}_1=\mathbf{t}_1+\mathbf{Ew}_1$$

$$\mathbf{Ew}_1=\mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

2 成分モデル 基本式と証明したいこと

基本式 $\mathbf{X} = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_2$ $\mathbf{y} = \mathbf{t}_1 q_1 + \mathbf{t}_2 q_2 + \mathbf{f}_2$

$$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$$

を証明します

2 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = 0$ の証明 1/2

$$\mathbf{X} = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_2$$

1 成分モデルの基本式より、

$$\mathbf{E} = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_2$$

両辺に右から $\mathbf{w}_1$ をかけると、

$$\mathbf{E}\mathbf{w}_1 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_1$$

$\mathbf{E}\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$　より、

$$\mathbf{0} = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_1$$

次のページで使います

$$\mathbf{p}_2 = \frac{\mathbf{X}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2}$$

$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X} - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}$　より、

$$\mathbf{p}_2 = \frac{\left(\mathbf{X} - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2}$$

2 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1=0$ の証明 2/2

$$\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = \frac{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}-\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{w}_1}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2} = \frac{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}\mathbf{w}_1-\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1\right)}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2} = \frac{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{t}_1-\mathbf{t}_1\right)}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2}$$

$$= 0$$

よって、

$$\mathbf{0} = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_1$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_1$$

$$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

2 成分モデル 式変形

$\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = 0$ より、 $\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = \dfrac{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1}{\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_2} = 0$

よって、 $\mathbf{t}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1 = 0$

$\mathbf{T}$ の各成分は互いに無相関なので、どの成分 $\mathbf{t}_a$ も $\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1$ と直交する

よって、 $\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1 = 0$ ・・・あとで使います

2 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_2\mathbf{w}_2=0$ の証明

$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_2$$

両辺に右から $\mathbf{w}_2$ をかけると、

$$\mathbf{X}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_2$$

$\mathbf{t}_2 = \mathbf{X}_2\mathbf{w}_2 \quad \mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 = 1$ より、

$$\mathbf{t}_2 = \mathbf{t}_2 + \mathbf{E}_2\mathbf{w}_2$$

$$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

2 成分モデル 回帰係数

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_2$$

両辺に右から $\mathbf{W}$ (=[$\mathbf{w}_1$ $\mathbf{w}_2$]) をかけると、

$$\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W} + \mathbf{E}_2\mathbf{W}$$

$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = \mathbf{0} \quad \mathbf{E}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$ より、

$$\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$$

両辺に右から $\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$ の逆行列をかけると、

$$\mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1} = \mathbf{T}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}\mathbf{q} + \mathbf{f}_2$$

より、$\mathbf{y}$ の計算値 (誤差以外) を $\mathbf{y}_2$ とすると、

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{T}\mathbf{q}$$

$$= \mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

よって、

$$\mathbf{b} = \mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

3 成分モデル 基本式と証明したいこと

基本式

$$\mathbf{X} = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_3$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{t}_1 q_1 + \mathbf{t}_2 q_2 + \mathbf{t}_3 q_3 + \mathbf{f}_3$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_3 = \mathbf{0}$$

を証明します

3 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_3\mathbf{w}_1=0$ の証明 1/2

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_3$$

両辺に右から $\mathbf{w}_1$ をかけると、 $\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_1$

$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$ より、 $\mathbf{0} = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_1$

次のページで使います

$$\mathbf{p}_3 = \frac{\mathbf{X}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$$

$\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}$ より、 $\mathbf{p}_3 = \dfrac{\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$

3 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_3\mathbf{w}_1 = 0$ の証明 2/2

$$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = \frac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{w}_1}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = \frac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1\right)}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = \frac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$$

$$= 0$$

(2 成分モデルの結果 $\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2\mathbf{w}_1 = 0$ より)

よって、

$$\mathbf{0} = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_1$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_1$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

3 成分モデル 式変形

$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = 0$　より、　$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_1 = \dfrac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_1}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = 0$

よって、$\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_1 = 0$

$\mathbf{T}$ の各成分は互いに無相関なので、どの成分 $\mathbf{t}_a$ も $\mathbf{X}_3\mathbf{w}_1$ と直交する

よって、　$\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_1 = 0$　・・・あとで使います

3 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_3\mathbf{w}_2=0$ の証明 1/2

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_3$$

両辺に右から $\mathbf{w}_2$ をかけると、 $$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_2$$

$\mathbf{E}_2\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$ より、 $$\mathbf{0} = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_2$$

次のページで使います

$$\mathbf{p}_3 = \frac{\mathbf{X}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$$

$\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}$ より、 $$\mathbf{p}_3 = \frac{\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$$

3 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_3\mathbf{w}_2=0$ の証明 2/2

$$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 = \frac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{w}_2}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = \frac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}_2\mathbf{w}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2\right)}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = \frac{\left(\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_2\right)}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3}$$

$$= 0$$

(1 成分モデルの結果 $\mathbf{p}_a{}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_a=1$ より)

よって、

$$\mathbf{0} = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_2$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_2$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_2 = \mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

3 成分モデル 式変形

$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 = 0$　より、　$\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_2 = \dfrac{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_2}{\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_3} = 0$

よって、$\mathbf{t}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_2 = 0$

$\mathbf{T}$ の各成分は互いに無相関なので、どの成分 $\mathbf{t}_a$ も $\mathbf{X}_3\mathbf{w}_2$ と直交する

よって、　$\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_3\mathbf{w}_2 = 0$　・・・あとで使います

3 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_3\mathbf{w}_3=0$ の証明

$$\mathbf{X}_3 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_3$$

両辺に右から $\mathbf{w}_3$ をかけると、

$$\mathbf{X}_3\mathbf{w}_3 = \mathbf{t}_3\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_3 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_3$$

$\mathbf{t}_3 = \mathbf{X}_3\mathbf{w}_3$ 　 $\mathbf{p}_3^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_3 = 1$ 　より、

$$\mathbf{t}_3 = \mathbf{t}_3 + \mathbf{E}_3\mathbf{w}_3$$

$$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_3 = \mathbf{0}$$ ・・・あとで使います

3 成分モデル 回帰係数

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_3$$

両辺に右から $\mathbf{W}$ (=[$\mathbf{w}_1$ $\mathbf{w}_2$ $\mathbf{w}_3$]) をかけると、

$$\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W} + \mathbf{E}_3\mathbf{W}$$

$\mathbf{E}_3\mathbf{w}_1 = \mathbf{E}_3\mathbf{w}_2 = \mathbf{E}_3\mathbf{w}_3 = \mathbf{0}$ より、

$$\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$$

両辺に右から $\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$ の逆行列をかけると、

$$\mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1} = \mathbf{T}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}\mathbf{q} + \mathbf{f}_3$$

より、$\mathbf{y}$ の計算値 (誤差以外) を $\mathbf{y}_3$ とすると、

$$\mathbf{y}_3 = \mathbf{T}\mathbf{q}$$

$$= \mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

よって、

$$\mathbf{b} = \mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

a 成分モデル 基本式と証明したいこと

基本式

$$\mathbf{X} = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \mathbf{t}_a\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_a$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{t}_1 q_1 + \mathbf{t}_2 q_2 + \cdots + \mathbf{t}_a q_a + \mathbf{f}_a$$

$$\begin{gathered} \mathbf{E}_a\mathbf{w}_1 = \mathbf{0} \\ \mathbf{E}_a\mathbf{w}_2 = \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{E}_a\mathbf{w}_a = \mathbf{0} \end{gathered}$$

を証明します

a 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_a\mathbf{w}_i$=0 の証明 1/4

$$\mathbf{E}_{a-1} = \mathbf{t}_a\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_a$$

両辺に右から $\mathbf{w}_i$ $(1 \le i \le a)$ をかけると、 $\mathbf{E}_{a-1}\mathbf{w}_i = \mathbf{t}_a\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i + \mathbf{E}_a\mathbf{w}_i$

後で使います

$$\mathbf{p}_a = \frac{\mathbf{X}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}$$

$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_{a-1} - \mathbf{t}_{a-1}\mathbf{p}_{a-1}^{\mathrm{T}}$ より、

$$\mathbf{p}_a = \frac{\left(\mathbf{X}_{a-1} - \mathbf{t}_{a-1}\mathbf{p}_{a-1}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}$$

両辺に右から $\mathbf{w}_i$ $(1 \le i \le a)$ をかけると、 $\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = \dfrac{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}_{a-1} - \mathbf{t}_{a-1}\mathbf{p}_{a-1}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{w}_i}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}$

a 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_a\mathbf{w}_i=0$ の証明 2/4

$$\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = \frac{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{a-1}\mathbf{w}_i - \mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_{a-1}\mathbf{p}_{a-1}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}$$

$\mathbf{t}_{\mathrm{a}}$ と $\mathbf{t}_{\mathrm{a-1}}$ は無相関より、

$$= \frac{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{a-1}\mathbf{w}_i}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a}$$

a 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_a\mathbf{w}_i=0$ の証明 3/4

$j=1, 2, ..., a-1$ で、 $\mathbf{p}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = 0$ と仮定すると、

$$\mathbf{p}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = \frac{\mathbf{t}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_j\mathbf{w}_i}{\mathbf{t}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_j} = 0 \quad \text{より} \quad \mathbf{t}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_j\mathbf{w}_i = 0$$

$\mathbf{T}$ の各成分は互いに無相関なので、どの成分 $\mathbf{t}_j$ も $\mathbf{X}_j\mathbf{w}_i$ と直交する

つまり、 $\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{a-1}\mathbf{w}_p = 0$

よって、 $$\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = \frac{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{a-1}\mathbf{w}_p}{\mathbf{t}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{t}_a} = 0$$

$a = 3$ のときはすでに証明したので、数学的帰納法より、 $\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = 0$

a 成分モデル 式変形 $\mathbf{E}_a\mathbf{w}_i=0$ の証明 4/4

p. 22 より、 $$\mathbf{E}_{a-1}\mathbf{w}_i = \mathbf{t}_a\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i + \mathbf{E}_a\mathbf{w}_i$$

$\mathbf{p}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{w}_i = 0$ より、 $$\mathbf{E}_{a-1}\mathbf{w}_i = \mathbf{E}_a\mathbf{w}_i$$

よって、 $$\mathbf{0} = \mathbf{E}_1\mathbf{w}_i = \mathbf{E}_2\mathbf{w}_i = \cdots = \mathbf{E}_{a-1}\mathbf{w}_i = \mathbf{E}_a\mathbf{w}_i$$

a 成分モデル 回帰係数

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}} + \mathbf{E}_a$$

両辺に右から $\mathbf{W}$ (=[$\mathbf{w}_1$ $\mathbf{w}_2$ … $\mathbf{w}_a$]) をかけると、 $\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W} + \mathbf{E}_a\mathbf{W}$

$\mathbf{E}_a\mathbf{w}_1 = \mathbf{E}_a\mathbf{w}_2 = \cdots = \mathbf{E}_a\mathbf{w}_a = \mathbf{0}$ より、 $\mathbf{X}\mathbf{W} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$

両辺に右から $\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$ の逆行列をかけると、

$$\mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1} = \mathbf{T}$$

$\mathbf{y} = \mathbf{T}\mathbf{q} + \mathbf{f}_3$ より、$\mathbf{y}$ の計算値 (誤差以外) を $\mathbf{y}_a$ とすると、

$$\mathbf{y}_a = \mathbf{T}\mathbf{q}$$

$$= \mathbf{X}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$$

よって、 $\mathbf{b} = \mathbf{W}\left(\mathbf{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{q}$