1　偏相関係数

1.1　逆行列

n 次正方行列 $\mathbf{A}$ に関して,

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} \;=\; \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} \;=\; \mathbf{I}_n$$

となる行列 $\mathbf{A}^{-1}$ が存在するとき，$\mathbf{A}^{-1}$ を $\mathbf{A}$ の逆行列という.

$n=2$ のとき，行列 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$ の逆行列は,

$$\mathbf{A}^{-1} \;=\; \frac{1}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}, \quad \text{ただし} \quad a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21} \neq 0$$

である.

分割行列の逆行列は次のようになる.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}^{-1} \;=\; \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{11} & \mathbf{A}^{12} \\ \mathbf{A}^{21} & \mathbf{A}^{22} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^{11} &= \left(\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21}\right)^{-1} \\
\mathbf{A}^{22} &= \left(\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\right)^{-1} \\
\mathbf{A}^{12} &= -\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}^{22} \;=\; -\mathbf{A}^{11}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1} \\
\mathbf{A}^{21} &= -\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}^{11} \;=\; -\mathbf{A}^{22}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}
\end{aligned}$$

1.2　直交射影行列

変数群 $\mathbf{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m)$ の張る空間への直交射影行列を $\mathbf{P}$, $\mathbf{X}$ の張る空間の補空間への直交射影行列を $\mathbf{Q}$ とすると，以下が成り立つ.

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \\
\mathbf{Q} &= \mathbf{I} - \mathbf{P} \;=\; \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \\
\mathbf{P}^2 &= \mathbf{P}, \quad \mathbf{Q}^2 \;=\; \mathbf{Q} \\
\mathbf{P}' &= \mathbf{P}, \quad \mathbf{Q}' \;=\; \mathbf{Q}
\end{aligned}$$

1.3　偏相関係数

変数 $\boldsymbol{y}_1$，$\boldsymbol{y}_2$ から，変数群 $\mathbf{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m)$ の影響を除いたときの，変数 $\boldsymbol{y}_1$，$\boldsymbol{y}_2$ の相関係数 $r_{12|X}$ を偏相関係数という.

$\boldsymbol{y}_1$，$\boldsymbol{y}_2$ を $\mathbf{X}$ の直交補空間に射影したベクトルを $\boldsymbol{w}_1$，$\boldsymbol{w}_2$ とすると，$r_{12|X}$ は $\boldsymbol{w}_1$ と $\boldsymbol{w}_2$ のなす角のコサイン（$\boldsymbol{w}_1$ と $\boldsymbol{w}_2$ の相関係数）で与えられる.

$$\boldsymbol{w}_1 \;=\; \mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1, \quad \boldsymbol{w}_2 \;=\; \mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2$$

$$\begin{aligned}
r_{12|X} &= \frac{\boldsymbol{w}_1'\boldsymbol{w}_2}{|\boldsymbol{w}_1||\boldsymbol{w}_2|} \\
&= \frac{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}{\sqrt{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1}\sqrt{\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}} \\
&= \frac{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}{\sqrt{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1}\sqrt{\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}}
\end{aligned}$$

偏相関係数は，また，すべての変数を含む相関係数行列の逆行列を利用して求めることもできる．

$$r_{12|X} = \frac{-c_{12}}{\sqrt{c_{11}}\sqrt{c_{22}}}$$

ただし，c_{12} などは，データ $\mathbf{D} = [\boldsymbol{y}_1\ \boldsymbol{y}_2\ \mathbf{X}]$ の相関行列の逆行列の要素である．

1.4 相関係数行列の逆行列を用いた偏相関係数行列の算出

標準化されたデータ行列を $\mathbf{D} = [\mathbf{Y}\ \mathbf{X}]$，ただし $\mathbf{Y} = (\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$，$\mathbf{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m)$ とする．相関係数行列 $\mathbf{R}$ は,

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \frac{1}{n}\mathbf{D}'\mathbf{D} \\
&= \frac{1}{n}[\mathbf{Y}\ \mathbf{X}]'[\mathbf{Y}\ \mathbf{X}] \\
&= \frac{1}{n}\begin{bmatrix} \mathbf{Y}'\mathbf{Y} & \mathbf{Y}'\mathbf{X} \\ \mathbf{X}'\mathbf{Y} & \mathbf{X}'\mathbf{X} \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

逆行列は,

$$\mathbf{R}^{-1} = n\begin{bmatrix} \mathbf{Y}'\mathbf{Y} & \mathbf{Y}'\mathbf{X} \\ \mathbf{X}'\mathbf{Y} & \mathbf{X}'\mathbf{X} \end{bmatrix}^{-1}.$$

逆行列の $(1,1)$ ブロック $\mathbf{C}_{11}$ は 2×2 行列であり,

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_{11} &= n\left[\mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \mathbf{Y}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-\mathbf{1}}\mathbf{X}'\mathbf{Y}\right]^{-1} \\
&= n\left[\mathbf{Y}'(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-\mathbf{1}}\mathbf{X}')\mathbf{Y}\right]^{-1} \\
&= n\left(\mathbf{Y}'\mathbf{Q}\mathbf{Y}\right)^{-1} \\
&= n\begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2 \\ \boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix}^{-1} \\
&= \frac{n}{\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1 - (\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2)^2}\begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2 & -\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2 \\ -\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

である．これより,

$$\begin{aligned}
\frac{-c_{12}}{\sqrt{c_{11}}\sqrt{c_{22}}} &= -\frac{-\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}{\sqrt{\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}\sqrt{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1}} \\
&= \frac{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}{\sqrt{\boldsymbol{y}_1'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_1}\sqrt{\boldsymbol{y}_2'\mathbf{Q}\boldsymbol{y}_2}} \\
&= r_{12|X}
\end{aligned}$$

となることが分かる．

上記を一般化すると，相関係数の逆行列を利用することにより，当該 2 変数以外の全ての変数の影響を除去した偏相関係数行列は，次式で求めることができる．

$$r_{ij|others} = \frac{-c_{ij}}{\sqrt{c_{ii}}\sqrt{c_{jj}}},$$

ただし，c_{ij} は，全ての変数を含む相関係数行列の逆行列の (i,j) 要素である．

```
> # 偏相関係数
>
> setwd("d:\\")
> d1 <- read.table("偏相関_データ.csv", header=TRUE, sep=",")
> d2 <- d1[2:4]

> head(d2)
  develop shoes math
1    56.8  17.0 37.9
2    72.3  16.5 21.2
3    73.6  17.5 40.5
4    74.6  17.5 43.7
5    79.6  17.5 35.2
6    79.6  18.5 43.2
>

> # 単相関係数
> (r.d2 <-cor(d2))
          develop     shoes      math
develop 1.0000000 0.7597318 0.6074204
shoes   0.7597318 1.0000000 0.5658061
math    0.6074204 0.5658061 1.0000000


> # 当該の 2 変数以外の全ての変数の影響を除いた偏相関係数

>  # 相関係数の逆行列を用いて算出する関数
> #-----------------------------------------------------
> #partial correlation matrix
> #
> hensoukan <- function(x){
+  if (det(x)!=0){
+   inv.r <- solve(x)
+   p <- nrow(x)
+   par.r <- inv.r
+   d.r <- diag(1/sqrt(diag(inv.r)),p,p)
+   par.r <- d.r %*% -inv.r %*% d.r
+   diag(par.r) <- rep(1,p)
+   rownames(par.r) <- rownames(x)
+   colnames(par.r) <- colnames(x)
+  }
+  return(par.r)
+ }
> #-----------------------------------------------------
>
> hensoukan(r.d2)
```

```
          develop     shoes      math
develop 1.0000000 0.6351930 0.3311782
shoes   0.6351930 1.0000000 0.2019794
math    0.3311782 0.2019794 1.0000000
```

```
> # 直交補空間に射影したベクトルで計算する方法
> d3 <- scale(d2)
> n<- nrow(d3)
> r.xqx <- r.d2
> for (i in 1:2){
+  for (j in (i+1):3){
+  x <- d3[,c(i,j)]
+  y <- d3[,c(-i,-j)]
+  P <- y%*%solve(t(y)%*%y)%*%t(y)
+  Q <- diag(n) - P
+  xqx <- t(x)%*% Q %*% x
+  r12 <- xqx[1,2]/sqrt(xqx[1,1])/sqrt(xqx[2,2])
+  r.xqx[i,j] <- r12
+  r.xqx[j,i] <- r12
+  }
+ }
> r.xqx
          develop     shoes      math
develop 1.0000000 0.6351930 0.3311782
shoes   0.6351930 1.0000000 0.2019794
math    0.3311782 0.2019794 1.0000000
```

```
> # partial.r 関数を利用して，１つ１つ算出
> library(psych)     # psych パッケージの読み込み
> partial.r(d2, c(1,2), c(3))
partial correlations
        develop shoes
develop    1.00  0.64
shoes      0.64  1.00
> partial.r(d2, c(1,3), c(2))
partial correlations
        develop math
develop    1.00 0.33
math       0.33 1.00
> partial.r(d2, c(2,3), c(1))
partial correlations
      shoes math
shoes   1.0  0.2
math    0.2  1.0
```