多変量解析
第 5 回: 主成分分析 (1) 基礎概念

藤本 衡

2018 年 5 月 9 日

本日の内容

- 多変量データを「より少ない尺度で」比較する
- 主成分分析の考え方
- 2 変数での例

多変量データの比較

- 多変量を 1 個ずつ比較するのは容易だが、順序・優劣・分類が明確でない
- できれば 1 つか 2 つの尺度で並べ替えができないだろうか？

例: 誰が理系で、誰が文系？

- あるいは、「どの科目が理系的で、どの科目が文系的なのか」

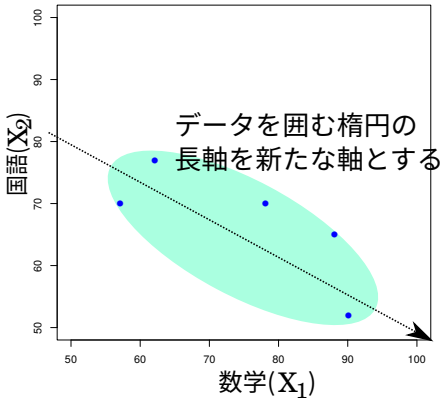
学生	数学	英語	国語	理科	社会
A	88	75	65	90	70
B	62	60	77	70	78
C	90	58	52	82	65
D	57	68	70	64	72
E	72	64	70	90	70

主成分分析 (Principal Component Analysis: PCA)

- N 個の変量を持つ個体の群を 1 つの指標で並べ替えたい
- できるだけ多くの変量から情報を取り込み、重み付けして新たな指標を合成する
  =主成分

$$Z = w_1 X_1 + w_2 X_2 + \cdots w_N X_N$$

2 変数での例: 数学と国語



- 数学の点数で並べ替える手もある
- でも国語の点数も加味したい
- 軸を変えてしまえばいいのでは？

軸の回転

回転行列

$$\begin{pmatrix} Z \\ Z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$$

新しい軸に沿った指標 Z は

$$Z = w_1 X_1 + w_2 X_2 = X_1 \cos\theta - X_2 \sin\theta$$

となる。
ここで

$$w_1^2 + w_2^2 = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$$

である (重みの平方和が 1 となる) 点に注意。

主成分を求める基準 (1)

- 似た個体は近い場所に、異なる個体は遠くに「ばらけて」ほしい
- Z の分散が最大になるように (w_1, w_2) を選べばよい？

制約条件付き最大化問題

$$\begin{aligned} &\text{maximize } \mathbb{V}[Z] = \mathbb{V}[w_1 X_1 + w_2 X_2] \\ &\qquad\qquad = w_1^2 \mathbb{V}[X_1] + 2 w_1 w_2 \mathrm{Cov}[X_1,\, X_2] + w_2^2 \mathbb{V}[X_2] \qquad (1) \\ &\text{subject to } w_1^2 + w_2^2 - 1 = 0 \end{aligned}$$

ラグランジュの未定乗数法

(1) 式はそのままラグランジュの未定乗数法が適用可能
λ をラグランジュ乗数とおき、

$$L = \mathbb{V}[Z] - \lambda(w_1^2 + w_2^2 - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = 2w_1\mathbb{V}[X_1] + 2w_2\mathrm{Cov}[X_1, X_2] - 2\lambda w_1 = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = 2w_2\mathbb{V}[X_2] + 2w_1\mathrm{Cov}[X_1, X_2] - 2\lambda w_2 = 0 \quad (3)$$

固有値問題

(2),(3) 式を行列で表現すると

$$\begin{pmatrix} \mathbb{V}[X_1] & \mathrm{Cov}[X_1, X_2] \\ \mathrm{Cov}[X_1, X_2] & \mathbb{V}[X_2] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

つまり

$$\boldsymbol{C}\boldsymbol{w} = \lambda \boldsymbol{w}$$

の形の固有値問題となる。
$\boldsymbol{C}$ は X_1, X_2 の分散共分散行列であり、λ は $\boldsymbol{C}$ の固有値、$\boldsymbol{w}$ は対応する右固有ベクトル。

固有値を求める

2 次正方行列なら固有値は簡単に求まるよね？

特性方程式 (固有方程式)

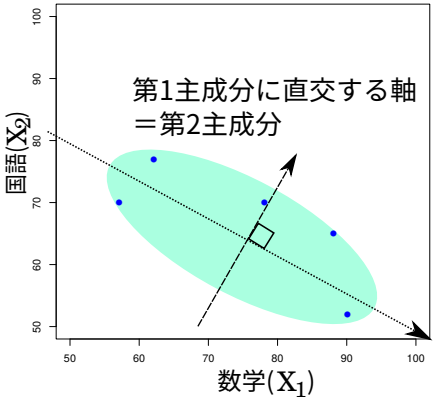
$$
\begin{aligned}
|C - \lambda I| &= \begin{vmatrix} \mathbb{V}[X_1] - \lambda & \mathrm{Cov}[X_1, X_2] \\ \mathrm{Cov}[X_1, X_2] & \mathbb{V}[X_2] - \lambda \end{vmatrix} \\
&= \lambda^2 - (\mathbb{V}[X_1] + \mathbb{V}[X_2])\lambda + \mathbb{V}[X_1]\mathbb{V}[X_2] - (\mathrm{Cov}[X_1, X_2])^2 \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$$
\lambda = -\frac{1}{2}\left\{(\mathbb{V}[X_1] + \mathbb{V}[X_2]) \mp \sqrt{(\mathbb{V}[X_1] - \mathbb{V}[X_2])^2 + 4(\mathrm{Cov}[X_1, X_2])^2}\right\}
$$

最大固有値と固有ベクトル

- C は半正定値行列なので固有値はすべて非負
- λ の解は 2 つ得られる→大きい方（最大固有値）を λ_1 とおく
- λ_1 に対応する右固有ベクトル（第 1 固有ベクトル）を求める → $\mathbb{V}[Z]$ を最大化する (w_1, w_2) が得られる
  - また連立一次方程式です
  - ただし制約 $w_1^2 + w_2^2 = 1$ がないと比例関係しか出てこないので注意
- 第 1 固有ベクトルから得られる主成分を、第 1 主成分と呼ぶ

第 2 主成分



- もう 1 個の固有値は使えないの？
- 楕円の短軸を表す＝第 2 主成分
- これも使える「かも」しれない

変量の標準化

- この例では X_1 と X_2 はともに 100 点満点（同じスケール）
- もし一方が 10 点満点だったら？→単位を合わせたい

標準化 (standardization)

$$T_j = \frac{X_j - \mathbb{E}[X_j]}{\sqrt{\mathbb{V}[X_j]}}$$

$\mathbb{E}[T_j] = 0, \quad \mathbb{V}[T_j] = 1$ となる。また $\mathrm{Cov}[T_1, T_2]$ は X_1 と X_2 の相関係数に等しいので、標準化したとき (4) 式の C は相関係数行列 R に置き換えられる。

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{w} = \lambda \boldsymbol{w}$$