応用計量分析2(第4回)

線形代数

担当教員: 梶野 洸(かじの ひろし)

本日の目標

- 線形代数を思い出す
- Python で線形代数の数値計算をやる
- 主成分分析(PCA)を実装する

線形代数の登場人物

Out[3]: [2, 0]

リストで書けばいい?

```
In [2]: x = [1, 0] # x をリストで書いてみた
#print(x)
A = [[1, 0], [0, 1]]
#print(A)
print(x + x) # x + x は、ベクトルでは [2, 0] になってほしいが...

[1, 0, 1, 0]

In [3]: # ベクトルどうしの足し算を関数として定義する必要がある
def add_vectors(x, y):
    z = []
    for i in range(len(x)):
        z.append(x[i] + y[i])
    return z
add_vectors(x, x)
```

線形代数で使う計算

色々あるので全部書くのはめんどくさい...

- ベクトル/行列どうしの足し算引き算
- 行列とベクトルの積、行列どうしの積
- ノルム、内積などなど

numpy 使う

- 基本的な線形代数の計算が実装されているライブラリ
- リストではなく numpy.ndarray というオブジェクトでベクトルを定義する
 - リストどうしの足し算だとリストの連結になってしまう
 - numpy.ndarray どうしの足し算だとベクトルの足し算となる!

オブジェクト? numpy.ndarray?

- ◆ 全てのものはオブジェクトと呼ばれる
 - 1,[1,0,3], 'hello world' など
- 数字,文字列などは、オブジェクトの「型」と呼ばれる
 - 例1.1の型は、数字
 - 例2.[1,0,3]の型は、リスト
 - numpy.ndarrayも型
 - オブジェクトの「種類」と理解できる
 - type で型を調べられる

型の名前

ndarray

[0 1 2]

[0 10]

ndarray型の オブジェクト

```
In [4]: type(1.0)
Out[4]: float
In [5]: type('1.0')
Out[5]: str
In [6]: type([1,0])
Out[6]: list
```

- それぞれの型には特有の関数がある
 - <オブジェクト>.<関数名>(<引数>) と書くのが基本
 - 読み方: <オブジェクト> に、そのオブジェクトに対して定義されている <関数名> を適用する。その時の引数は <引数> で指定する
 - 別の読み方: <オブジェクト> の中の <関数名> を実行する。その時の引数は <引数> で指定する
 - A.Bは、Aの中のBという意味合いで広く使われる
 - Aがオブジェクトではないこともあるし、Bが関数でないこと もある
 - 何か値が返ってくる場合もあるし、オブジェクトが変更されるだけで何 も返ってこない場合もある

型の名前

ndarray

[0 1 2]

[0 10]

色々な関数を 持っている __add__ transpose inv などなど

みんな同じ 関数を持っている In [7]: x = [1, 0] # x にリストを入れる x.append(3) # リストには `append` という関数が用意されている。引数のオブジェクトを末尾に付け 足す機能 <math># x というオブジェクトに対して、 `append` という関数を適用する。その時に引数として 3 を取る print(x)

[1, 0, 3]

In [8]: x = [1, 0] $print(x + x) # 足し算も、リスト用に特別に用意されている <math>print(x._add_(x)) # 上の書き方っぽくするとこう書ける # x というオブジェクトに対して、 `__add__` という関数を適用する。その時に引数として x を取る$

[1, 0, 1, 0] [1, 0, 1, 0]

ここまで踏まえた上で numpy を使ってみる

- numpy.ndarray型のオブジェクトを作りたい
 - まず numpy を使えるようにしないといけない
 - 標準ライブラリでないのでそのままでは使えないことがある
 - 今回はインストールは不要(repl.it に入っている)
 - numpy.array(<リスト>) を実行すると <リスト> を numpy.ndarray に変換したものが返ってくる
 - o numpyの中のarrayという関数を実行している
 - numpy はライブラリ

```
import numpy # numpy というライブラリを使うという宣言
In [9]:
        x = numpy.array([1, 0]) # numpy.array という関数を使う。リストを入力するとベクトルを出力す
        る(ベクトルは色々線形計算が定義されている)
        print(x)
        print(type(x))
        print(type([1, 0]))
        [1 0]
        <class 'numpy.ndarray'>
        <class 'list'>
        import numpy as np # numpy を使いたいけど、 numpy という名前だと長いので np という短い名前
In [10]:
        で呼びたい
        x = np.array([1, 0])
        print(x)
        [1 0]
```

ベクトル
$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} とする$$

```
In [11]: x = \text{np.array}([1.0, 0])
          y = np.array([0, 1.0])
          print(x, y)
```

[1. 0.] [0. 1.]

● ベクトルのスカラー倍: 3x

```
In [12]: x = np.array([1.0, 2.0])
print(3.0 * x) # 実数との掛け算も自然に定義されている
```

[3. 6.]

- ベクトル同士の足し算・引き算: x + y, x y
- より一般的に線形結合: 3x 10y

```
In [13]: x = np.array([1.0, 0])
y = np.array([0, 1.0])
# ベクトル演算が自然に定義されている
print(x + y)
print(x - y)
print(3 * x - 10 * y)

[1. 1.]
[ 1. -1.]
[ 3. -10.]
```

● 内積: x · y, (3x - y) · (x + 2y)

```
In [14]: x = np.array([1.0, 10.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(x @ y)
print((3 * x - y) @ (x + 2 * y))
print(np.dot(x, y)) # 関数の形で書くこともできる

10.0
351.0
10.0
```

*内積は、2つベクトルを受け取って、1つのスカラーを返す関数としても書ける

● ノルム: II2x - yII₂

```
In [15]: x = np.array([1.0, 10.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(((2 * x - y) @ (2 * x - y)) ** (0.5)) # 内積を使って計算した場合
print(np.linalg.norm(2 * x - y)) # numpyの関数を使って計算した場合
```

19.1049731745428 19.1049731745428 要素積(アダマール積):x ⋅ y

各次元で積を取る演算

```
In [16]: x = np.array([1.0, 10.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(x * y)

[ 0. 10.]
```

```
In [23]: x = np.array([0, 1, 2, 3, 4])
print(x[1]) # 1 番目の要素
print(x[0:2]) # 0 から2番目の要素 (2番目は含まない)
print(x[-1]) # 一番最後の要素
print(x[-3:-1]) # 最後から3番目~1番目の要素 (-1番目を含まない)
print(x[-3:]) # 最後から3番目~最後の要素
```

```
1
[0 1]
4
[2 3]
[2 3 4]
```

ここまでのまとめ

- ベクトルはnumpyの ndarray というオブジェクトで定義する
- 普通の数値と同じような演算ができる
- 内積やノルムなど、線形代数特有の計算の関数もある
 - 内積: np.dot,@
 - ノルム:np.linalg.norm
 - アダマール積:*
- 構成要素の取り出し方は色々ある

想定QA

Q. 欲しい関数があるかどうか調べたい

A. ググるかライブラリのAPIを見る(numpyは<u>ここ (https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/)</u>)

- "numpy <ほしい機能>" みたいにググる
 - "numpy 内積" とか "numpy inner product" とか
 - 基本的には公式ドキュメントがもっとも正しいはず
 - プログラミングには英語は必須

Q. np.dot とか np.linalg.norm とかなんやねん

A. ライブラリは階層構造になっている。

- np.dot は、numpy (npと書いてる)直下に定義された dot という関数、
- np.linalg.norm は、numpyの下のlinalg(linear algebra; 線形代数)という線形代数の関数をまとめた集まりのなかのnormという関数と解釈する

演習4.1

- 1. input_list を入力とし、それを numpy.ndarray に変換して出力する関数 list2ndarray を実装せよ
 - input_list はリスト型のオブジェクトで、各要素は int または float型と仮定する
- 2. x_array, y_array という二つの numpy.ndarray を入力とし、 x_array と y array の差のI2ノルムを出力する関数 dist を実装せよ
 - x_array, y_array は numpy ndarray 型のオブジェクトで、同じ系列 長であると仮定する
- 3. x_array を入力とし、その一番はじめの要素と最後の要素を取り除いた numpy.ndarray を出力する関数 extract を実装せよ
 - x_array は numpy.ndarray 型のオブジェクトで系列長は3以上だと仮 定する
- 4. x_array と idx を入力とし、x_array の idx 番目の要素を 0 に書き換える関数 drop を実装せよ
 - x_array は numpy.ndarray 型のオブジェクトであると仮定し、x_array の系列長を L とする
 - idx は int 型のオブジェクトでかつ 0 以上 L 1 以下の値をとると仮定する

行列

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

行列とベクトルの積

Ax

```
x^{T}A
In [18]:
         x = np.array([1, 0])
         print(A @ x)
         print(x @ A)
         [1. 0.]
         [1. 1.]
         print(A @ np.array([1,2,3,4])) # 2x2の行列に4次元のベクトルは掛けられない
In [19]:
         ValueError
                                                 Traceback (most recent call last)
         <ipython-input-19-a386da54a8ef> in <module>
         ----> 1 print(A @ np.array([1,2,3,4])) # 2x2の行列に4次元のベクトルは掛けられない
         ValueError: matmul: Input operand 1 has a mismatch in its core dimension 0, wi
```

th gufunc signature (n?,k), $(k,m?) \rightarrow (n?,m?)$ (size 4 is different from 2)

行列と行列の積

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

[1. 5.]]

線形方程式

 $A \in R^{N \times N}, b \in R^{N}$ としたとき、 Ax = b を満たす $x \in R^{N}$ を求める。

A が正則行列(=逆行列を持つ)のとき、 $x = A^{-1}b$ が解。

二通りの実装方法がある

- 逆行列を求めるアルゴリズム(Gauss-Jordanなど)を利用
- 直接線形方程式を解くアルゴリズム(LU分解)を利用
 - !!なるべく直接線形方程式を解くアルゴリズムを利用すべき!!

- LU 分解の方がそもそも速い
 - Aの形によっては更に速くなる
- numpyでは逆行列を求めるのにAX = Iを解いている(=線形方程式を解くのと同じ計算時間がここで必要)
 - さらに $A^{-1}b$ を計算しないといけないので計算時間的に損

(参考) 伊理正夫, 藤野和建: 数値計算の常識

演習4.2

- 1. D×D正則行列 A と D 次元ベクトル x を入力として、 $\sqrt{x^TA^{-1}}x$ を出力する関数 quadratic を完成させよ。ただし A, x 共に numpy.array として与えられるとする。
- 2. D×D対称行列Aを入力として、Aの第二固有値(固有値の中で二番目に大きいもの)を出力する関数 second eigを完成させよ。
- 3.D×D行列A、D次元ベクトルx、自然数kを入力として、

$$v_1 = \frac{A^k x}{\|A^k x\|}$$

$$\lambda_1 = v_1^T A v_1$$

で定義される λ_1 を出力する関数 power_iter を完成させよ。

解説: べき乗法

- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ の固有値と対応する固有ベクトルを $\lambda_1, ..., \lambda_N, v_1, ..., v_N$ とする。
- $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_N|$ とする。

任意のベクトル $x \in R^N$ は、固有ベクトルで展開できる(固有ベクトルは基底を成す):

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} c_n v_n$$

Aを掛け続けると絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルが(相対的に)強調される:

$$A^{k}x = \sum_{n=1}^{N} c_{n}A^{k}v_{n} = \sum_{n=1}^{N} c_{n}\lambda_{n}^{k}v_{n}$$

$$= \lambda_{1}^{k} \sum_{n=1}^{N} c_{n} \left(\frac{\lambda_{n}}{\lambda_{1}}\right)^{k} v_{n}$$

$$\approx \lambda_{1}^{k}c_{1}v_{1}$$

● 適当なベクトルに行列 A を掛け続けると v₁ が求まる

$$\bullet \ \lambda_1 = \frac{v_1^\top A v_1}{v_1^\top v_1}$$

```
In [22]: import numpy as np
A = np.array([[2, 1], [1, 2]])
x = np.array([1, 2])
for i in range(100):
    x = A @ x
    x = x / np.linalg.norm(x) # ベクトルを正規化しないと発散する
print(x@A@x / (x@x), x)
```

3.0 [0.70710678 0.70710678]

ここまでのまとめ

- ベクトル、行列は numpy を使う
- 固有値・固有ベクトルなどの計算もできる
- 線形方程式も解ける
- 逆行列を求める必要があるか考える(線形方程式を解けばいい場合は線形方程式 を解く)

主成分分析, PCA

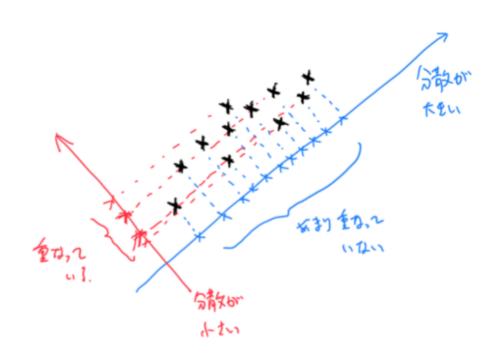
データ $x_1,...,x_N \in R^D$ があったとき、その"特性"を保ったまま低次元表現を得たい。

- データを目で見たい(100次元だと見られないけど2次元なら)
- 同じ情報量ならば低次元の方が学習しやすい
- 特性の定義によって様々な手法がある
- K(< D)次元表現を得る

主成分分析(1次元の場合)

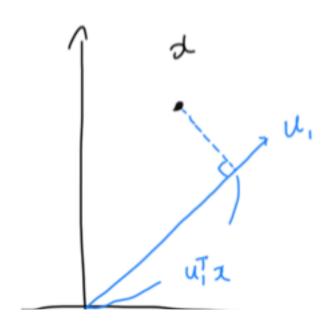
Q. データを1次元に射影するとき、どのように射影すれば一番データの特性を保存できるか?

A. データの分散が最も大きくなる軸に射影すれば良さそう



主成分分析(1次元の場合)の定式化

- $X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix}^T$ データの平均を $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$ とする
- \bullet $u_1 \in R^D$ で定められる軸に射影することを考える
 - u Tu₁ = 1とする
- ullet u_1 で定められる軸上での x_n の座標は $u_1^\top x_n$
- \bullet u_1 で定められる軸上での X の分散は $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (u_1^\top x_n u_1^\top \bar{x})^2$



主成分分析(1次元の場合)の定式化

分散が最大になる方向が知りたいので、以下の最適化問題を解く

$$\text{maximize}_{u_1 \in R} D_{N_{n=1}}^{1} \sum_{n=1}^{N} (u_1^T x_n - u_1^T \bar{x})^2 \text{subject to } u_1^T u_1 = 1$$

主成分分析(1次元の場合)の解法

まず目的関数を書き換える

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (u \mathbf{x}_n - u \mathbf{x}_n)^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} u \mathbf{x}_n - \bar{x}) (x_n - \bar{x})^\top u_1$$
$$= u \mathbf{x}_1$$

where
$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \bar{x})(x_n - \bar{x})^{\top}$$
.

すると最適化問題は以下のように書き換わる

$$\text{maximize}_{u_1 \in R} \text{D}_{u_1} \subseteq \text{Su}_1 \text{subject to } u_1 = 1$$

主成分分析(1次元の場合)の解法

ラグランジュ未定乗数法を使う。ラグランジアンは

$$\mathsf{L}(\mathsf{u}_1;\lambda_1) = \mathsf{u} \big[\mathsf{\Sigma} \mathsf{u}_1 + \lambda_1 (1 - \mathsf{u} \big[\mathsf{u}_1)$$

最適解u^{*}で停留点になっていることが必要なので、

$$\frac{\partial}{\partial u_1} L(u_1^{\star}; \lambda_1) = \Sigma u_1^{\star} - \lambda_1 u_1^{\star} = 0$$

つまり λ_1 は Σ の固有値で \mathbf{u}_1^\star はそれに対応する(単位)固有ベクトルであることが必要。また目的関数は

$$u_{1}^{\Sigma u_{1}} = \lambda_{1}$$

となるため、 λ_1 は Σ の最大固有値で、 \mathbf{u}_1^\star は最大固有値に対応する長さ1の固有ベクトルである。

主成分分析(2次元以上)について

- 第一主成分は分散共分散行列∑の最大固有値に対応する固有ベクトルだった。
- Q. データを K(≥2) 次元に落としたい場合はどうすればいいのか?
- A.K 次元空間に落とした時の分散を考えれば良さそう
 - Σ の固有値の大きい方から K 個とってきて、対応する固有ベクトルも持ってくる: $\{(\lambda_k, u_k)\}_{k=1}^K$
 - $U = [u_1...u_K]^\top \in R^{K \times D}$ として、 $U \circ K$ 次元空間に射影したらいい
 - ■証明略

アルゴリズム

- 入力:x₁,...,x_N∈R^D,K∈N
- 出力: z₁, ..., z_N ∈ R^K

1.
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$$

2.
$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \bar{x})(x_n - \bar{x})^{\top}$$

- 3. Σ の固有値と対応する固有ベクトル (λ_1 , u_1), ..., (λ_D , u_D) を求める $(\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_D$)
 - ただし ||u_d|| = 1 for all d = 1, ..., D.

$$4.U = [u_1...u_K]^T$$
として、 $z_n = Ux_n$ を計算

ここまでのまとめ

- PCA は分散共分散行列を固有値分解すればできる
- 固有値(+固有ベクトルも)の大きい方から順番にとってくればいい

PCA の実装

- PCA でデータを2次元で見てみる
- 主成分を見てみる
- 再構成してみる
- →見て楽しいので画像データを使ってみる

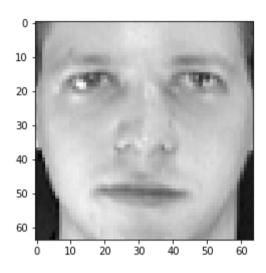
```
In [2]:

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import fetch_olivetti_faces

# データを取得
dataset = fetch_olivetti_faces()
num_examples, row_size, col_size = dataset['images'].shape
X = dataset['data']

# 平均0にしておく
X_mean = X.mean(axis=0)
X_centered = X - X_mean
```

```
In [3]: # 顔データを表示してみる
plt.imshow(dataset['images'][0], cmap=plt.cm.gray)
plt.show()
X_centered.shape
```



Out[3]: (400, 4096)



プレ演習

上で定義した $X_{centered}$ に対してPCAのアルゴリズムを適用した時に得られる低次元表現 $Z \in R^{N \times K}$ と変換に用いる行列 $U \in R^{K \times D}$ を求めるプログラムをかけ

小問

- 1. $\Sigma = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top}$ を計算せよ(x_n の平均は0に変換済み)
- 2. Σ の固有値と対応する固有ベクトル (λ_1 , u_1), ..., (λ_D , u_D) を計算せよ($\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_D$)
 - ヒント: 対称行列の固有値分解を行う関数 https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.eigh.html)

$$3.U = [u_1...u_K]^T$$
として、 $z_n = Ux_n$ を計算せよ

● 例えば K = 20

$1.\Sigma = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top}$ を計算せよ

```
In [4]: sample_size = X_centered.shape[0]
dim = X_centered.shape[1]

# 定義通り地道に sigma を作ってもいい
sigma = np.zeros((dim, dim))
for each_example in range(sample_size):
    sigma = sigma + np.outer(X_centered[each_example], X_centered[each_example])
```

$$X = [x_1..., x_N]^T$$
としたとき、

$$X^{\top}X = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top}$$

という関係を使ってもいい(こっちの方が圧倒的に速い)

In [5]: # sigma には上で計算したものが入っている print(np.linalg.norm(sigma - X_centered.T @ X_centered))

0.0015574189977048496

1. A の固有値と対応する固有ベクトル (λ_1, u_1), ..., (λ_D, u_D) を計算せよ($\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_D$)

```
In [6]: from numpy.linalg import eigh
    eig_val, eig_vec = eigh(sigma)
    print(eig_val)
    print(eig_vec.shape)
```

```
[-1.40173184e-06 -1.39795718e-06 -1.38039418e-06 ... 2.51554128e+03 4.41763308e+03 7.51723015e+03] (4096, 4096)
```

1.U = $\begin{bmatrix} u_1 ... u_K \end{bmatrix}^T$ として、 $z_n = Ux_n$ を計算せよ

演習

PCA を実行する関数を書け

- 入力: データ X ∈ R^{N×D}, 次元 K
- 出力: 変換されたデータ $Z \in R^{N \times K}$, 変換にもちいる線形変換 $U \in R^{K \times D}$

```
In [8]: from numpy.linalg import eigh
def pca(X, K):
    X = X - np.mean(X, axis=0)
    sigma = X.T @ X
    eig_val, eig_vec = eigh(sigma)
    U = eig_vec[:, -K:].T
    z = (U @ X.T).T
    return z, U
```

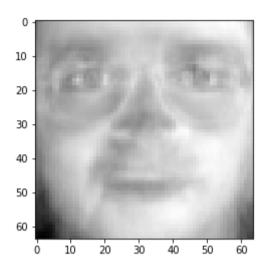
```
In [9]: # pca を実行
K=20
z, U = pca(X_centered, K)
print(z.shape, U.shape)

(400, 20) (20, 4096)
```

In [10]: # v の行べクトルが正規直交基底であることを確認 print('distance from the identity:', np.abs(U @ U.T - np.identity(K)).max()) print('mean reconstruction loss: ',((X_centered - (U.T @ z.T).T) * (X_centered - (U.T @ z.T).T)).mean())

distance from the identity: 1.1920928955078125e-07 mean reconstruction loss: 0.0045594834

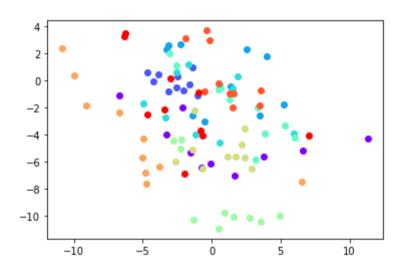
In [11]: # データの貼る空間の固有ベクトルを見てみる plt.imshow(-U[-1].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) plt.show()



```
In [12]: # この場合は2次元に落としてもよくわからない...
import matplotlib.cm as cm
import numpy as np

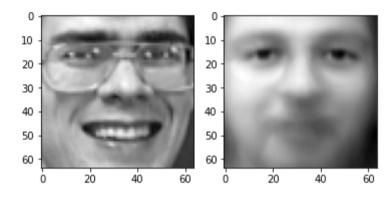
K = 2
z, U = pca(X_centered, K)

colors = cm.rainbow(np.linspace(0, 1, 10))
for each_idx in range(100):
    plt.scatter(z[each_idx, 0], z[each_idx, 1], color=colors[dataset['target'][each_idx]])
plt.show()
```



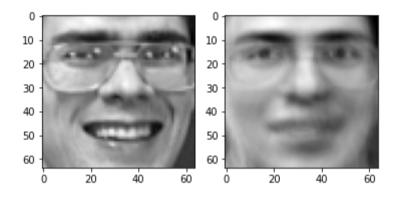
```
In [17]: # 再構成 (K=2)
K = 2
z, U = pca(X_centered, K)
X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
idx = 190

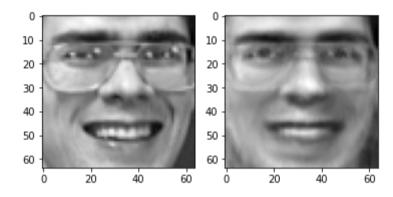
f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画像
plt.show()
```

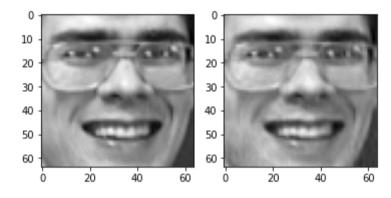


```
In [18]: # 再構成 (K=20)
    K = 20
    z, U = pca(X_centered, K)
    X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
    idx = 190

    f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
    ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
    ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画像
    plt.show()
```







まとめ

- 行列、ベクトルは numpy を使って実装する
- 線形代数の操作は numpy の API を探せば実装されていることが多い
- 主成分分析(principle component analysis; PCA) を実装した
 - データを低次元空間に射影するアルゴリズム
 - 低次元空間での分散を最小化する
 - 固有値分解に帰着される

以下、2020年の講義では用いない資料