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

- ベクトル $x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 行列 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- リストで書けばいい?

Out[3]: [2, 0]

```
In [2]: x = [1, 0] # x をリストで書いてみた 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): return [x[i] + y[i] for i in range(len(x))] 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(Anaconda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

```
In [9]: import numpy # numpy というライブラリを使うという宣言
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))

[1 0]
<class 'numpy.ndarray'>

In [10]: 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 = 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, 0]) print(3.0 * x) # 実数との掛け算も自然に定義されている
```

[3. 0.]

- ◆ 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: 3*x* 10*y*

```
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]: 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
```

- 0.0
- 1.0
- 0.0

*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

In [15]: 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

2.23606797749979
2.23606797749979

• 要素積(アダマール積): $x \circ y$

各次元で積を取る演算

```
In [16]: print(x * y)
[0. 0.]
```

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:*

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

行列

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

```
In [17]: # np.array にリストのリストを渡すと行列
A = np.array([[1.0, 1.0], [0.0, 2.0]])
print(A)

[[1. 1.]
[0. 2.]]
```

行列とベクトルの積

```
x^{\mathsf{T}}A
In [18]: print(A @ x)
print(x @ A)
```

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

Ax

```
In [19]: 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 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

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

[[0. 2.] [1. 5.]]

演習

•
$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$
 の絶対値が最大の固有値とそれに対応する固有ベクトルを計算せ よ

指針

- 1. 手計算
- 2. numpy で実装されているのをつかう
- 3.べき乗法
 - ヒント: *A* を掛け続けるとどうなるか?

```
In [21]: np.linalg.eigvals(np.array([[2,1],[1,2]]))
Out[21]: array([3., 1.])
```

手計算

- 固有値、固有ベクトルの定義: $Av = \lambda v$ を満たす $\lambda, v \neq 0$
- 線形方程式 $(A \lambda I)v = 0$ が非自明な解(つまり $v \neq 0$)を持つような λ を見つ ければよい
- 特性方程式 $\det(A \lambda I) = 0$ の解が固有値
- $\bullet \det(A \lambda I) = (2 \lambda)(2 \lambda) 1$ $= \lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda - 3)(\lambda - 1) = 0$
- 絶対値が最大の固有値は3
- $(A \lambda I)v = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0$ $v_1 = v_2$ を満たせばよいので、例えば $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ が固有ベクトル。

numpy で実装されているのを使う

絶対値最大の固有値は3、対応する固有ベクトルは $\begin{bmatrix} 0.70710678 \\ 0.70710678 \end{bmatrix}$

(返り値の解釈は、API (https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.eig.html)を見ましょう)

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 $\lambda_1, \ldots, \lambda_N, v_1, \ldots, v_N$ とする。
- $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_N|$ とする。

任意のベクトル $x \in \mathbb{R}^N$ 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):

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

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:

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

 \bullet 適当なベクトルに行列 A を掛け続けると v_1 が求まる

$$\lambda_1 = \frac{v_1^\mathsf{T} A v_1}{v_1^\mathsf{T} v_1}$$

```
In [23]: A = np.array([[2, 1], [1, 2]])
x = np.array([1, 2])
for _ 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]

線形方程式

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

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)

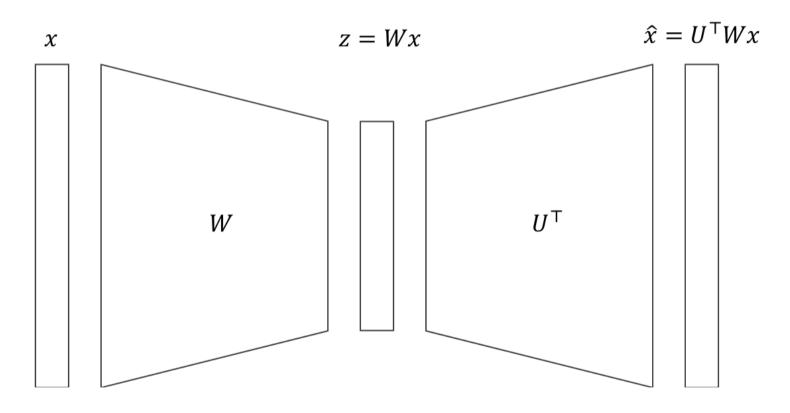
主成分分析, PCA

データ $x_1, ..., x_N \in \mathbb{R}^D$ 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

PCA は、次のような線形変換のペアW,Uを求めるという気持ち:

- 入力 $x \in \mathbb{R}^D$
- 低次元表現 z = Wx ($W \in \mathbb{R}^{K \times D}$)
- 低次元表現から入力を復元 $\hat{x} = U^{\mathsf{T}}z = U^{\mathsf{T}}Wx$ ($U \in \mathbb{R}^{K \times D}$)
- $\hat{x} \approx x$ となってほしい



定式化

• X

$$=\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix}^\mathsf{T}$$

- $= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix}^\mathsf{T}$ 平均0であるとする: $\sum_{n=1}^N x_n = 0$
- ullet 以下を満たす W,U を求める

$$\min_{W,U \in \mathbb{R}^{K \times D}} \sum_{n=1}^{N} \|x_n - U^{\top} W x_n\|_2^2$$
 (1)

補題1

式(1)の最適値は

$$\min_{V \in \mathbb{R}^{K \times D}, \ VV^{\top} = I} \sum_{n=1}^{N} \|x_n - V^{\top} V x_n\|_2^2$$
 (2)

の最適値と等しい

証明

- ullet $oldsymbol{R} = \{U^{ op} W x \mid x \in \mathbb{R}^D\}$ とすると、 $oldsymbol{R}$ は $oldsymbol{R}^D$ 中の $oldsymbol{K}$ 次元線型部分空間
- Rの正規直交基底を $V = \begin{bmatrix} v_1 & \dots & v_K \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^{D \times K}$ とする。
- $V^{\mathsf{T}}Vx = \arg\min_{\tilde{x} \in R} \|x \tilde{x}\|$ が成り立つ。
 - R の元は $y \in \mathbb{R}^K$ を用いて $V^{\mathsf{T}}y$ と書けることを利用して示す(演習)
- 式(1)の最適解 U^*, W^* と、それに対応する R^*, V^* を持ってくると、 $\|x_n U^{*^\top} W^* x_n\|^2 \ge \min_{\tilde{x}_n \in R^*} \|x_n \tilde{x}_n\|^2 = \|x_n V^{*^\top} V^* x_n\|^2$
- U^* , W^* も V^* も最適解なので、上式は等号成立。

補題2

最適化問題(2)は

$$\max_{V \in \mathbb{R}^{K \times D}, VV^{\top} = I} \operatorname{tr} \left(V \left(\sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top} \right) V^{\top} \right)$$
 (3)

と同値。

証明

展開すれば良い。

$$\sum_{n=1}^{N} \|x_n - V^{\top} V x_n\|^2 = \sum_{n=1}^{N} \|x_n\|^2 - 2 \sum_{n=1}^{N} x_n^{\top} V^{\top} V X_n + \sum_{n=1}^{N} x_n^{\top} V^{\top} V V^{\top} V x_n$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \|x_n\|^2 - \sum_{n=1}^{N} x_n^{\top} V^{\top} V x_n$$

第二項は、

$$\sum_{n=1}^{N} x_n^{\top} V^{\top} V x_n = \sum_{n=1}^{N} \operatorname{tr}(x_n^{\top} V^{\top} V x_n) = \sum_{n=1}^{N} \operatorname{tr}(x_n x_n^{\top} V^{\top} V)$$

$$= \operatorname{tr}\left(\left(\sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top}\right) V^{\top} V\right) = \operatorname{tr}\left(V\left(\sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\top}\right) V^{\top}\right)$$

補題3

 $A = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^{\mathsf{T}}$ として、その固有値、固有ベクトルを $\lambda_1, \ldots, \lambda_D, u_1, \ldots, u_D$ とする $(\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_D)$ 。この時任意の $V \in \mathbb{R}^{K \times D}, VV^{\mathsf{T}} = I$ について

$$\operatorname{tr}(VAV^{\top}) \le \max_{w \in [0,1]^D, \sum_{d=1}^D w_d \le K} \sum_{d=1}^D \lambda_d w_d = \sum_{d=1}^K \lambda_d$$

が成立

証明

 $A=U^{\top}\Lambda U$ と固有値分解できる($U\in\mathbb{R}^{D imes D}$)。 $V\in\mathbb{R}^{K imes D},VV^{\top}=I$ を一つ持ってくる。

 $W = VU^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^{K \times D}$ と置くと、

- $\bullet \ VAV^{\top} = VU^{\top} \Lambda UV^{\top}.$ $= W\Lambda W^{\top}$
- ullet W の各行はD次元空間の正規直交基底: $WW^{\mathsf{T}} = UV^{\mathsf{T}}VU^{\mathsf{T}} = I$

$$\operatorname{tr}(W\Lambda W^{\top}) = \sum_{d=1}^{D} \lambda_d \sum_{k=1}^{K} w_{k,d}^2$$

 $w_d := \sum_{k=1}^K w_{k,d}^2$ と置くと、

$$\operatorname{tr}(W\Lambda W^{\top}) = \sum_{d=1}^{D} \lambda_d \sum_{k=1}^{K} w_{k,d}^2$$
$$= \sum_{d=1}^{D} \lambda_d w_d$$

ここで
$$0 \leq \sum_{k=1}^{K} w_{k,d}^2 \leq 1 \ (d=1,\ldots,D), \sum_{d=1}^{D} \sum_{k=1}^{K} w_{k,d}^2 = K$$
なので、

$$\operatorname{tr}(W\Lambda W^{\top}) = \sum_{d=1}^{D} \lambda_{d} w_{d}$$

$$\leq \max_{w_{d} \in [0,1], \sum_{d=1}^{D} w_{d} \leq K} \sum_{d=1}^{D} \lambda_{d} w_{d}$$

が成立.

定理

 $A = \sum_{n=1}^N x_n x_n^{\top}$ として、その固有値、固有ベクトルを $\lambda_1, \ldots, \lambda_D, u_1, \ldots, u_D$ とする $(\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_D)$ 。

この時 $V = \begin{bmatrix} u_1 \dots u_K \end{bmatrix}^\mathsf{T}$ が最適化問題(2), (3)の解

証明

$$\operatorname{tr}(VAV^{\top}) = \operatorname{tr}(VU^{\top}\Lambda UV^{\top}) = \operatorname{tr}(\mathbb{1}_{K}\Lambda\mathbb{1}_{K}) = \sum_{d=1}^{K} \lambda_{d}$$

が成り立つ。ここで

$$[\mathbb{1}_K]_{i,j} = \begin{cases} \delta_{i,j} & \text{if } i = j \leq K \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

補題3より、これは最適値。

アルゴリズム

```
• 入力: x_1, K \dots, \in \mathbb{N} x_N \in \mathbb{R}^D • 出力: z_1, \dots, z_N \in \mathbb{R}^K 1. A = \sum_{n=1}^N x_n x_n^\top 2. A の固有値と対応する固有ベクトル (\lambda_1, u_1), \dots, (\lambda_D, u_D) を求める (\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_D) 3. V = \begin{bmatrix} u_1 \dots u_K \end{bmatrix}^\top として、z_n = Vx_n を計算
```

ここまでのまとめ

- PCA はデータを低次元空間に落とす方法
- 再構成時の損失を最小化するようにする

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

```
In [24]: import matplotlib.pyplot as plt from sklearn.datasets import fetch_olivetti_faces

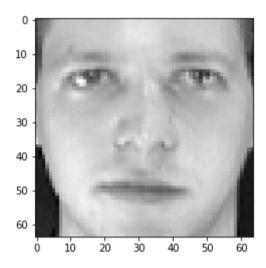
# データを取得
dataset = fetch_olivetti_faces()
num_examples, row_size, col_size = dataset['images'].shape
X = dataset['data']

# 平均0にしておく(しなくてもまあ大丈夫だけど)
X_mean = X.mean(axis=0)
X_centered = X - X_mean
```

/Users/kjn/.pyenv/versions/anaconda3-5.1.0/lib/python3.6/site-packages/sklearn/externals/joblib/__init__.py:15: DeprecationWarning: sklearn.externals.joblib is deprecated in 0.21 and will be removed in 0.23. Please import this function ality directly from joblib, which can be installed with: pip install joblib. If this warning is raised when loading pickled models, you may need to re-seria lize those models with scikit-learn 0.21+.

warnings.warn(msg, category=DeprecationWarning)

In [25]: # 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[25]: (400, 4096)

演習

PCA を実行する関数を書け

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

ヒント: 対称行列の固有値分解を行う関数 https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.linalg.eigh.html#scipy.linalg.eigh)
/reference/generated/scipy.linalg.eigh.html#scipy.linalg.eigh)

```
In [26]: from scipy.linalg import eigh

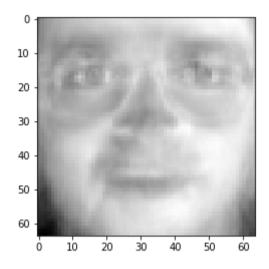
def pca(X, K):
    A = X.T @ X
    eig_val, eig_vec = eigh(A)
    V = eig_vec[:, -K:]
    z = X @ V
    return z, V

In [27]: # pca を実行
    K=20
    z, V = pca(X centered, K)
```

```
In [28]: # 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(V.T @ V - np.identity(K)).max()) print('mean reconstruction loss: ',((X_centered - z @ V.T) * (X_centered - z @ V.T)).mean())
```

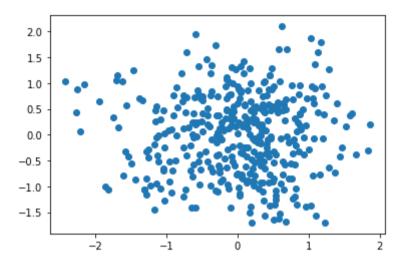
distance from the identity: 1.5404075384140015e-06 mean reconstruction loss: 0.0045594834

In [29]: # データの貼る空間の固有ベクトルを見てみる plt.imshow(-V[:, -1].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) plt.show()



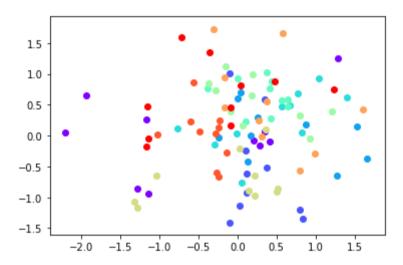
```
In [30]: plt.scatter(z[:, 0], z[:, 1])
```

Out[30]: <matplotlib.collections.PathCollection at 0x11087aa90>



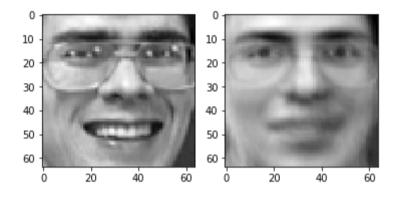
```
In [31]: # この場合は2次元に落としてもよくわからない...
import matplotlib.cm as cm
import numpy as np

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 [32]: # 再構成
    X_rec = z @ V.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
 - 再構成時の損失を最小化する
 - 固有値分解に帰着される