

AIF WEEK2 授業課題

主成分分析とは？

データを人に説明するときを考えてみましょう。

たとえばn次元のデータがあったとき、「特徴1のデータは～、特徴2のデータは～、…」のようにそれぞれ説明することはできます。しかし各特徴の傾向を説明したところで全体の特徴を言い表せたことにはなりません、何より時間がかかります。このとき全体の特徴を言い表す尺度があれば「このデータ群は〇〇の尺度で表すとこんな傾向にあります。」と簡潔に説明することができます。

このうまい尺度を見つける手法の一つが**主成分分析**と呼ばれる手法になります。

主成分分析とはn次元データを少ない次元に縮め、データ全体を要約する手法です。注意すべきなのは次元縮めることは「それぞれの特徴を少しずつ集めて妥当な値を決めること」であり、いくつかの特徴を無視するわけではありません。

つまり、それぞれのパラメータ x に重み a をかけた評価値 Z を

$$Z = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$$

と表し、この重み a を求めることになります。

ここでどんな a_i をとっても良いわけではなく a は必ず大きさが1となるように、つまり a は単位ベクトルになる必要があります。

こうすることで評価値 Z は x と a の内積となり、 a が単位ベクトルであるとき、**内積の値は軸 a に x を直行射影したときの長さ**に相当します。

この長さの分散が最大になるような a がもっともそれぞれの特徴を加味しつつ、なおかつ評価がばらついているため情報が残っているといえます。反対に分散が小さい場合は各データが共通して持っている特徴であり、どのデータでも変わらないため評価値 Z としてふさわしくありません。

ここで a が単位ベクトルであることが生きてきます。各ベクトル a の長さがバラバラだとそこに直行射影したときの値は純粋な各データの長さではなくなるため、公平に分散の比較ができません。

そのため**軸となるベクトル a は単位ベクトルである**という条件を設け、その中で Z の分散が最大となる a を求めるのです。

詳しくは次の項目で説明しますが、このようなベクトル a を求めるのに固有ベクトルが活躍します。この固有ベクトルは評価値 Z の分散が最大となるような大きさ1の a となるため、評価値 Z を表す重みとして妥当な重みベクトルになります。

長くなりましたが、主成分分析の具体的な方法を簡単に説明すると、

1. もっともばらつき（分散）が大きい軸がそのデータの特徴を説明するのにふさわしい値とみなし、第一主成分とする。
2. 第一主成分に直交する軸の中でもっとも分散が大きい軸を見つけ、それを第二主成分とする。
3. 同様の手順で必要な第 $n-1$ 主成分まで求める。

となります。

一般的にはグラフ化して説明することが多いため、2,3次元（第3主成分まで特定する）に圧縮することが多いです。

主成分分析の数式を用いた説明

第一主成分を決める際、第一主成分の評価値を Z としたとき それぞれの特徴を加味した値が欲しいため、 それぞれの特徴にある重みをかけた和として表し下記ようになります。

$$Z = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n$$

このとき、「 Z のばらつきが最も大きくなるような重み $\vec{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$ が最も全体の特徴を捉えている」(★)と考え、この重み $\vec{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$ を求めます。ただし重みを自由に設定できると比較にならないため $\|\vec{a}\| = 1$ という制約をつけます。

つまり主成分分析は「 Z の分散が最大となる新しい評価軸の単位ベクトル (\vec{a}) を見つけること」です。

話を簡単にするために2次元ベクトルデータを1変数で説明する場合を数式を用いて説明します。

ここで新しい座標軸の単位ベクトルを $\vec{a} = (a, b) = (\cos\theta, \sin\theta)$ とします。まず、元の座標でデータの中心化を行い分散を求めます。

中心化とは、其々の軸の平均値に原点を移動します。

分散とは、各データの値(x_1, x_2, \cdots)から全データの平均値 \bar{x} を引いた値(偏差)の2乗の総和をデータの個数で割ったものです。

従って、中心化させる事で各データの値がそのまま偏差となって計算が簡単になります。偏差の2乗を取るの、原点を挟んでプラスとマイナスがあるので、相殺されるのを防ぐためです。

そこで、ある点 k (中心化後の座標を x_k, y_k とする)と新しい座標軸の単位ベクトルと内積を D_k とすると、 $D_k = ax_k + by_k$ ($a = \cos\theta, b = \sin\theta$)となる。その2乗は以下ようになります。

$$(D_k)^2 = (ax_k + by_k)^2 = a^2 x_k^2 + b^2 y_k^2 + 2abx_k y_k$$

分散(var)を求めるには、全てのデータの2乗の和を求めてデータの個数(n)で割ればよいです。以下のように式が展開されるが、 a^2, b^2 は $(a, b) = (\cos\theta, \sin\theta)$ で定数であるため括り出せます。

$$\begin{aligned} var &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n D_k^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (ax_k + by_k)^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (a^2 x_k^2 + b^2 y_k^2 + 2abx_k y_k) \\ &= a^2 \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k^2 + b^2 \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^2 + 2ab \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k y_k \cdots (A) \end{aligned}$$

(A)式の a, b 以外のところはそれぞれ、回転前の座標軸の x 座標の分散(中心化後なので平均0の分散)、 y 座標の分散、 x 座標 y 座標の共分散となっています。これを以下のように定めます。

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k^2 \Rightarrow S_x : x \text{座標の分散}$$

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^2 \Rightarrow S_y : y \text{座標の分散}$$

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k y_k \Rightarrow S_{xy} : x, y \text{座標共分散}$$

また、 $a = \cos\theta, b = \sin\theta$ から、 $a^2 + b^2 = 1$ の制約もある。この制約の中で、分散varの最大値を求めるために、ラグランジュの未定係数法を用います。この方法によれば、以下のように関数を作り、 G の最大値を与える a, b, λ を求めれば、 F の最大値を与える a, b も求まることが分かります。

$$F(a, b) = S_x a^2 + S_y b^2 + S_{xy} 2ab$$

$$C(a, b) = a^2 + b^2 - 1 = 0$$

$$G(a, b, \lambda) = F(a, b) - \lambda C(a, b)$$

これを解くには、 G を a 、 b 、 λ で其々偏微分して、 $=0$ と置いた連立方程式を作ります。

$$G(a, b, \lambda) = F(a, b) - \lambda C(a, b) = S_x a^2 + S_y b^2 + S_{xy} 2ab - \lambda(a^2 + b^2 - 1)$$

$$\frac{\partial G}{\partial a} = 2S_x a + 2S_{xy} b - 2\lambda a = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial b} = 2S_y b + 2S_{xy} a - 2\lambda b = 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda} = -a^2 - b^2 + 1 = 0$$

上記の偏微分した式をまとめると

$$S_x a + S_{xy} b = \lambda a \quad \cdots (1)$$

$$S_y b + S_{xy} a = \lambda b \quad \cdots (2)$$

$$a^2 + b^2 = 1$$

$$\begin{pmatrix} S_x & S_{xy} \\ S_{xy} & S_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

となり、この式は共分散行列

$$\begin{pmatrix} S_x & S_{xy} \\ S_{xy} & S_y \end{pmatrix}$$

の固有方程式を求めることで解くことができます。

以上から、 λ は共分散行列の固有値、 (a, b) はその固有ベクトルになっているのでそれを求めれば良いことが分かります。固有ベクトルは通常、 a 、 b の比しか求められないが、ここでは $a^2 + b^2 = 1$ の制約があるので、各固有値に対する a 、 b は一意に決まります。

分散varを最大化する a 、 b 、 λ はラグランジュの未定係数法により、以下の(1)(2)のように求められます。(1) $\times a +$ (2) $\times b$ と置くと、これも $=0$ となります。これを整理して、 $a^2 + b^2 = 1$ の条件を使うと

$$S_x a + S_{xy} b - \lambda a = 0 \quad \cdots (1)$$

$$S_y b + S_{xy} a - \lambda b = 0 \quad \cdots (2)$$

(1) $\times a +$ (2) $\times b$ は

$$S_x a^2 + S_y b^2 + 2S_{xy} ab - \lambda(a^2 + b^2) = 0$$

$$\Leftrightarrow S_x a^2 + S_y b^2 + 2S_{xy} ab = \lambda$$

となり、左辺はまさに最大化を目指した主成分得点の分散varです。このvarの値は固有値 λ そのものです。長くなりましたが、主成分分析は**固有値問題に帰結することがわかります**。

各固有値の大きさが、その軸の主成分得点の分散の大きさを表します。分散が大きいほど、★の目的と合致するため、求めた固有値が大きい固有ベクトルから第1主成分、第2主成分、...の軸（単位ベクトル）となります。

対称行列の固有ベクトルの特徴として、それぞれの固有ベクトルは互いに直交し、各ベクトルの長さは1となります。共分散行列は対称行列なので、それぞれの主成分軸は直交します。

Pythonでの実装

ここではpca_scratch () 関数を実装し、sklearnで用意されているPCAライブラリと同じ値をとるか確認します。

※PCAライブラリのコードとデータセットは下記の記事から引用しています。 [意味がわかる主成分分析 \(https://qiita.com/NoriakiOshita/items/460247bb57c22973a5f0\)](https://qiita.com/NoriakiOshita/items/460247bb57c22973a5f0)

In [57]:

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import seaborn as sns
4 import pandas as pd
5 %matplotlib inline
6
7 # 主成分分析をするライブラリ
8 from sklearn.decomposition import PCA
```

In [55]:

```
1 def pca_scratch(data):
2     """
3     自作の主成分分析を行う関数
4     n次元から2次元のデータにする。
5     引数: 元データ (n次元) 行 (データ数) 列の行列
6     返回值: 2次元に圧縮されたデータの 2行 (データ数) 列の行列
7     """
8     # データの偏差を求める
9     data_deviation = np.array([row - np.mean(row)
10                                for row in X.transpose()]).transpose()
11     # 分散共分散行列を求める
12     cov_array = np.cov(data_deviation.T)
13     # cov関数を使わないなら下記のようになる
14     # X_bar = np.array([row - np.mean(row) for row in X.transpose()]).transpose()
15     # cov_array = np.dot(X_bar.T, X_bar) / (X.shape[0]-1)
16     print("スクラッチ分散共分散行列")
17     print(cov_array)
18
19     # 上の分散共分散行列を用いて固有値、固有ベクトルを求める
20     lam, eigen_vector = np.linalg.eig(cov_array)
21     print("スクラッチ固有値")
22     print(lam)
23     print("スクラッチ固有ベクトル")
24     print(eigen_vector)
25
26     # np.linalg.eig関数では固有値順にソートされていないため
27     # 固有ベクトルを固有値の大きい順にならべかえる
28     lam_index = [n for n in range(len(lam))]
29     for i in range(len(lam)):
30         for j in range(i + 1, len(lam)):
31             if lam[i] < lam[j]:
32                 lam[i], lam[j] = lam[j], lam[i]
33                 lam_index[i], lam_index[j] = lam_index[j], lam_index[i]
34
35     print("スクラッチ第一主成分の寄与率")
36     print(lam[0] / sum(lam))
37
38     # 各データの第一主成分の値を計算
39     first_axes = np.dot(eigen_vector[:, lam_index[0]].T, data.T)
40     # 各データの第二主成分の値を計算
41     second_axes = np.dot(eigen_vector[:, lam_index[1]].T, data.T)
42
43     return np.array([first_axes, second_axes])
44
```

In [56]:

```

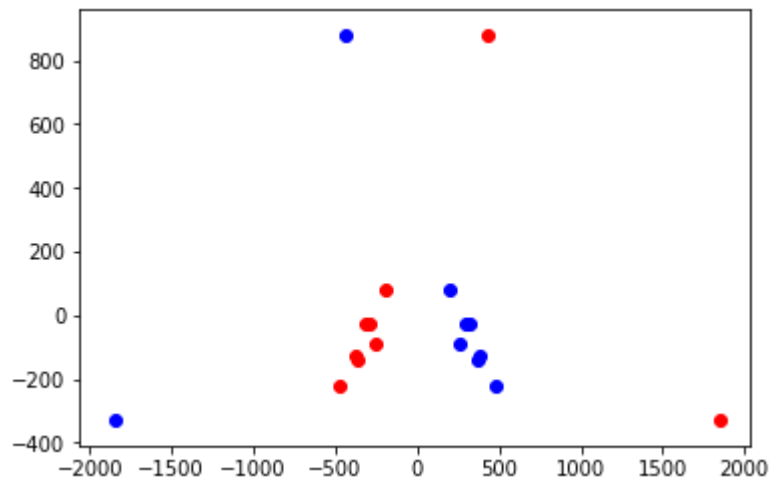
1  # PCAを使ったお手本コード
2  # [Pythonのコードのスター総数, Javaのコードのスターの総数, 年収]
3  X = np.array([[70, 30, 700],[32, 60, 480],[32, 20, 300],[20, 120, 600],[40, 120, 630], [40, 30,
4
5  pca = PCA(n_components=2)
6  pca.fit(X)
7
8  # データの確認
9  print("ライブラリ固有値ベクトル")
10 print(pca.components_)
11 print("ライブラリ分散共分散行列")
12 print(pca.get_covariance())
13 print("ライブラリ累積寄与率")
14 print(pca.explained_variance_ratio_)
15
16 print("#####")
17
18 # 次元削減をXに適用する.
19 pca_point = pca.transform(X)
20
21 # スクラッチ関数で圧縮したデータも用意する
22 pca_point2 = pca_scratch(X)
23
24 # スクラッチ関数で作った圧縮データは青でライブラリ関数で作った圧縮データは赤でプロットして結果を確認する
25 plt.scatter(*pca_point.T, color='red')
26 plt.scatter(pca_point2[0], pca_point2[1], color='blue')
27 plt.show()
28

```

```

[[420748.    70137.5    199897.5    ]
 [ 70137.5    120686.11111111  92822.22222222]
 [199897.5    92822.22222222 141894.44444444]]
ライブラリ固有値ベクトル
[[ 0.8497074  0.23978088  0.4695769 ]
 [-0.42326275  0.84127071  0.33632161]]
ライブラリ分散共分散行列
[[420748.    70137.5    199897.5    ]
 [ 70137.5    120686.11111111  92822.22222222]
 [199897.5    92822.22222222 141894.44444444]]
ライブラリ累積寄与率
[0.80636224 0.17927921]
#####
スクラッチ分散共分散行列
[[420748.    70137.5    199897.5    ]
 [ 70137.5    120686.11111111  92822.22222222]
 [199897.5    92822.22222222 141894.44444444]]
スクラッチ固有値
[551010.34761483 122506.60493504  9811.60300569]
スクラッチ固有ベクトル
[[-0.8497074 -0.42326275 -0.3143978 ]
 [-0.23978088  0.84127071 -0.48452938]
 [-0.4695769  0.33632161  0.81632426]]
スクラッチ第一主成分の寄与率
0.8063622442455204

```



その他授業で学んだこと

- sklearnのPCAがSVDなる類似手法であること
 - 上記のプロット図にあるように左右対称になるケースがある。
- ベイズの定理の応用例（ナイーブベイズフィルタ）
- 形態素解析ライブラリ(MeCab)の使い方