主成分分析 - 考え方

数理科学続論J

(Press `?` for help, `n` and `p` for next and previous slide)

村田 昇

2019.11.08

講義の予定

- **第1日: 主成分分析の考え方**
- 第2日: 分析の評価と視覚化

主成分分析の考え方

3.1

主成分分析 (principal component analysis)

- 多数の変量のもつ情報の分析・視覚化
  - 変量を効率的に縮約して少数の特徴量を構成する
  - 変量の間の関係を明らかにする

記号の準備

- 変数: $X_1, \ldots, X_p$
- 特徴量: $Z_1, \ldots, Z_d$ ($d \leq p$)
- 変数と特徴量の関係 (線形結合):

$$Z_k = a_{1k}X_1 + \cdots + a_{pk}X_p \qquad (k = 1, \ldots, d)$$

- 特徴量は定数倍の任意性があるので以下を仮定:

$$\|\boldsymbol{a}_k\|^2 := \sum_{j=1}^{p} a_{jk}^2 = 1$$

主成分分析の用語

- 特徴量 Z_k: 第 k **主成分(得点)**
  (principal component score)
- 係数ベクトル $\boldsymbol{a}_k$: 第 k **主成分方向**
  (principal component direction)
  または第 k **主成分負荷量**
  (principal component loading)

主成分分析の目的

- 目的: 主成分得点 $Z_1, \dots, Z_d$ が変数 $X_1, \dots, X_p$ の情報を 効率よく反映するように 主成分方向 $\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_d$ を 観測データから **うまく** 決定する
- 分析の方針: (以下は同値)
  - データの情報を最大限保持する変量の線形結合を構成
  - データの情報を最大限反映する座標(方向)を探索
- **教師なし学習** の代表的手法の1つ
  - 次元縮約: 入力をできるだけ少ない変数で表現
  - 特徴抽出: 情報処理に重要な特性を変数に凝集

R: 主成分分析を実行する関数

- Rの標準的な関数: `prcomp()` および `princomp()`
- 計算法に若干の違いがある
  - 数値計算の観点からみると `prcomp()` が優位
  - `princomp()` はS言語(商用)との互換性を重視した実装
- 本講義では `prcomp()` を利用

R: 関数 `prcomp()` の使い方

- 基本的にデータフレームを用いる:
  - データフレーム `mydata`: 必要な変数を含むデータフレーム
  - 列名: x1の変数名, …, xpの変数名

```
## データフレームを全て用いる場合
prcomp(mydata)
## 列名を指定する(formulaを用いる)場合
prcomp( ~ x1の変数名 + ... + xpの変数名, data = mydata)
```

3.7

演習: 2次元人工データの主成分分析

- 07-toy.r の前半を確認してみよう

3.8

第1主成分の計算

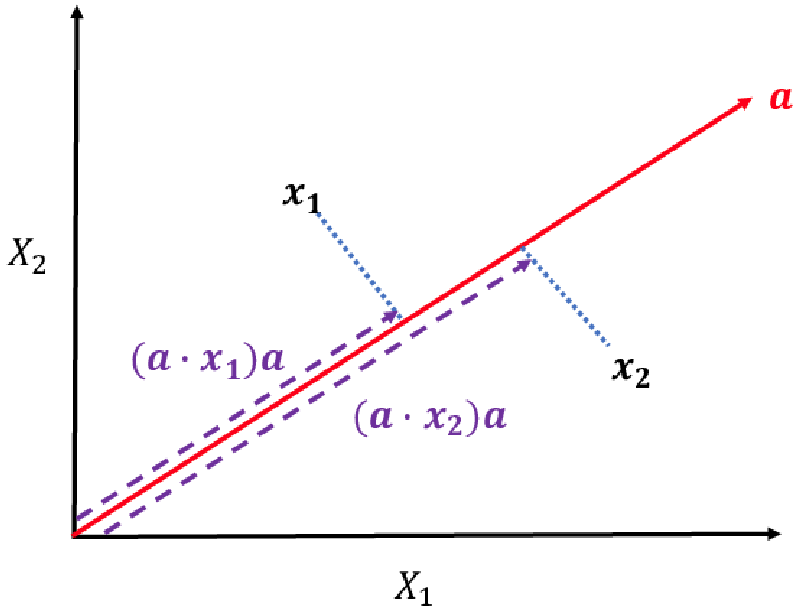
4.1

記号の準備

- $\{(x_{i1}, \dots, x_{ip})\}_{i=1}^{n}$: n 個の p 次元観測データ
- $\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^\top$: i 番目の観測データ
  (p 次元空間内の1点)
- $\boldsymbol{a} = (a_1, \dots, a_p)^\top$: 長さ1の p 次元ベクトル
- $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_i$: データ $\boldsymbol{x}_i$ の $\boldsymbol{a}$ 方向成分の長さ(スカラー)
- $(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_i)\,\boldsymbol{a}$: (スカラー × ベクトル)
  方向ベクトル $\boldsymbol{a}$ をもつ直線上への点 $\boldsymbol{x}_i$ の直交射影

4.2

幾何学的描像



観測データの直交射影 ($p = 2, n = 2$ の場合)

4.3

ベクトル a の選択の指針

- ベクトル $\boldsymbol{a}$ を **うまく** 選んで観測データ $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$ の情報を最大限保持する 1変量データ $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_n$ を構成する
- 観測データ $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$ のばらつきを最も反映する方向を最適なベクトル $\boldsymbol{a}$ とする

$$\arg\max_{\boldsymbol{a}} \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{a} \cdot \bar{\boldsymbol{x}})^2, \qquad \bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i,$$

ベクトル $\boldsymbol{a}$ の最適化問題

- 制約条件 $\|\boldsymbol{a}\| = 1$ の下で関数

$$f(\boldsymbol{a}) = \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{a} \cdot \bar{\boldsymbol{x}})^2$$

  を最大化せよ
- この最大化問題は必ず解をもつ:
  - $f(\boldsymbol{a})$ は連続関数
  - 集合 $\{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^p : \|\boldsymbol{a}\| = 1\}$ はコンパクト(有界閉集合)

4.5

ベクトル a の性質

- $f(\boldsymbol{a})$ の極大値を与える $\boldsymbol{a}$ は 以下で定義される行列 $\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}$ の 固有ベクトル:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top - \bar{\boldsymbol{x}}^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top - \bar{\boldsymbol{x}}^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1p} - \bar{x}_p \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{np} - \bar{x}_p \end{pmatrix}$$

(回帰分析のデザイン行列，Gram 行列を参照)

- 関数値 $f(\boldsymbol{a})$ はこの固有ベクトルに対する固有値

4.6

第1主成分

- 求める $\boldsymbol{a}$ は 行列 $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}$ の最大固有ベクトル (長さ1)
- $f(\boldsymbol{a})$ は 行列 $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}$ の最大固有値
- **第1主成分方向**: ベクトル $\boldsymbol{a}$
- **第1主成分得点**:

$$z_{i1} = a_1 x_{i1} + \cdots + a_p x_{ip} \quad (i = 1, \ldots, n)$$

演習: 第1主成分の計算

- 07-eigen.r を確認してみよう

4.8

第2主成分以降の計算

5.1

Gram行列の性質

- $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}$ は非負定値対称行列
- $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}$ の固有値は0以上の実数
  - 固有値を重複を許して降順に並べる

$$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_p \quad (\geq 0)$$

  - 固有値 λ_j に対する固有ベクトルを $\boldsymbol{a}_j$(長さ1)とする

$$\|\boldsymbol{a}_j\| = 1 \quad (j = 1, \dots, p)$$

- $\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_p$ は **互いに直交** するようとることができる

$$j \neq k \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{a}_j \cdot \boldsymbol{a}_k = 0$$

5.2

第2主成分の考え方

- 第1主成分:
  - 主成分方向: ベクトル $\boldsymbol{a}_1$
  - 主成分得点: $\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{x}_i \ (i = 1, \ldots, n)$
- 第1主成分方向に関してデータが有する情報:

$$(\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{a}_1 \quad (i = 1, \ldots, n)$$

- 第1主成分方向の成分を取り除いた観測データ:

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_i := \boldsymbol{x}_i - (\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{a}_1 \quad (i = 1, \ldots, n)$$

- これに対してばらつきを最も反映する方向を求める

第2主成分の最適化問題

- 制約条件 $\|\boldsymbol{a}\| = 1$ の下で関数

$$\tilde{f}(\boldsymbol{a}) = \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{a} \cdot \tilde{\boldsymbol{x}}_i - \boldsymbol{a} \cdot \bar{\tilde{\boldsymbol{x}}})^2 \quad ただし \quad \bar{\tilde{\boldsymbol{x}}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \tilde{\boldsymbol{x}}_i$$

  を最大化せよ
- 解は第2固有値 λ_2 に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{a}_2$
- 以下同様に 第 k 主成分方向は $X^\top X$ の第 k 固有値 λ_k に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{a}_k$

演習: 実データによる主成分分析

- 07-pca.r を確認してみよう

演習

- 以下のデータを用いて主成分分析を行ってみよう
  - datasets::USArrests
  - MASS::Cars93
  - MASS::UScereal