

# 主成分分析

## 基本的な考え方

村田 昇

## 講義概要

- 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

### 主成分分析

- 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
  - 特徴量に関与する変量間の関係を明らかにする
- PCA (Principal Component Analysis)
  - 構成する特徴量 : **主成分** (principal component)

### 分析の枠組み

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

$$Z_k = a_{1k}X_1 + \dots + a_{pk}X_p \quad (k = 1, \dots, d)$$

- 特徴量は定数倍の任意性があるので以下を仮定

$$\|a_k\|^2 = \sum_{j=1}^p a_{jk}^2 = 1$$

### 主成分分析の用語

- 特徴量  $Z_k$ 
  - 第  $k$  **主成分得点** (principal component score)
  - 第  $k$  **主成分**
- 係数ベクトル  $a_k$ 
  - 第  $k$  **主成分負荷量** (principal component loading)
  - 第  $k$  **主成分方向** (principal component direction)

## 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負荷量  $a_1, \dots, a_d$  を観測データから決定する
- 分析の方針 (以下は同値)
  - データの情報を最も保持する変量の **線形結合を構成**
  - データの情報を最も反映する **座標軸を探索**
- **教師なし学習** の代表的手法の 1 つ
  - 特徴抽出: 情報処理に重要な特性を変数に凝集
  - 次元縮約: 入力をできるだけ少ない変数で表現

## 実習

### R : 主成分分析を実行する関数

- R の標準的な関数
  - `stats::prcomp()`
  - `stats::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

- データフレームの全ての列を用いる場合

```
prcomp(x, retx = TRUE, center = TRUE, scale. = FALSE,
       tol = NULL, rank. = NULL, ...)
#' x: 必要な変数のみからなるデータフレーム
#' center: 中心化 (平均 0) を行って処理するか否か
#' scale.: 規格化 (分散 1) を行って処理するか否か
```

- 列名を指定する (formula を用いる) 場合

```
prcomp(formula, data = NULL, subset, na.action, ...)
#' formula: ~ 変数名 (解析の対象を + で並べる) 左辺はないので注意
#' data: 必要な変数を含むデータフレーム
#' 詳細は '?stats::prcomp' を参照
```

### R : 関数 `predict()` の使い方

- 主成分得点を計算する関数

```
predict(object, newdata, ...)
#' object: prcomp が出力したオブジェクト
#' newdata: 主成分得点を計算するデータフレーム
#' 詳細は '?stats::prcomp' または '?stats::predict.prcomp' を参照
```

- 'newdata' を省略すると分析に用いたデータフレームの得点が計算される

## 練習問題

- 数値実験により主成分分析の考え方を確認しなさい
  - 以下のモデルに従う人工データを生成する

```
#' 観測データ (2次元) の作成 (aのスカラ倍に正規乱数を重畳)
a <- c(1, 2)/sqrt(5) # 主成分負荷量 (単位ベクトル)
n <- 100 # データ数
toy_data <- tibble(runif(n, -1, 1) %o% a + rnorm(2*n, sd = 0.3))
```

- 観測データの散布図を作成
- 観測データから第1主成分負荷量を推定

```
prcomp(toy_data) # 全ての主成分を計算する
a_hat <- prcomp(toy_data)$rotation[,1] # 負荷量 (rotation) の1列目が第1主成分
```

- 散布図上に主成分負荷量を描画

```
geom_abline(slope = 傾き, intercept = 切片) # 指定の直線を追加できる
```

## 第1主成分の計算

### 記号の準備

- 変数:  $x_1, \dots, x_p$  ( $p$ 次元)
- 観測データ:  $n$  個の  $(x_1, \dots, x_p)$  の組

$$\{(x_{i1}, \dots, x_{ip})\}_{i=1}^n$$

- ベクトル表現
  - $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^T$ :  $i$  番目の観測データ ( $p$ 次元空間内の1点)
  - $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_p)^T$ : 長さ1の  $p$ 次元ベクトル

### 係数ベクトルによる射影

- データ  $\mathbf{x}_i$  の  $\mathbf{a}$  方向成分の長さ

$$\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i \quad (\text{スカラー})$$

- 方向ベクトル  $\mathbf{a}$  をもつ直線上への点  $\mathbf{x}_i$  の直交射影

$$(\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i) \mathbf{a} \quad (\text{スカラー} \times \text{ベクトル})$$

### 幾何学的描像

#### ベクトル $\mathbf{a}$ の選択の指針

- 射影による特徴量の構成  
ベクトル  $\mathbf{a}$  を **うまく** 選んで観測データ  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  の情報を最も保持する1変量データ  $z_1, \dots, z_n$  を構成

$$z_1 = \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1, z_2 = \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2, \dots, z_n = \mathbf{a}^T \mathbf{x}_n$$

- 特徴量のばらつきの最大化  
観測データの **ばらつき** を最も反映するベクトル  $\mathbf{a}$  を選択

$$\arg \max_{\mathbf{a}} \sum_{i=1}^n (\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{a}^T \bar{\mathbf{x}})^2, \quad \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i,$$

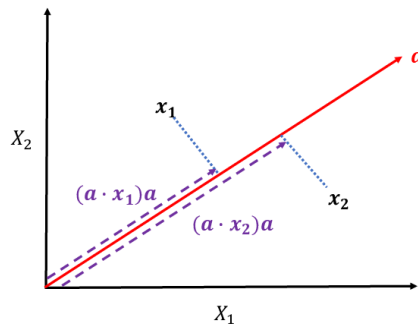


図 1: 観測データの直交射影 ( $p = 2, n = 2$  の場合)

## ベクトル $a$ の最適化

- 最適化問題

制約条件  $\|a\| = 1$  の下で以下の関数を最大化せよ

$$f(a) = \sum_{i=1}^n (a^T x_i - a^T \bar{x})^2$$

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

## 演習

### 問題

- 以下の問に答えなさい
  - 評価関数  $f(a)$  を以下の中心化したデータ行列で表しなさい

$$X = \begin{pmatrix} x_1^T - \bar{x}^T \\ \vdots \\ x_n^T - \bar{x}^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1p} - \bar{x}_p \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{np} - \bar{x}_p \end{pmatrix}$$

- 上の結果を用いて次の最適化問題の解の条件を求めなさい

$$\text{maximize } f(a) \quad \text{s.t. } a^T a = 1$$

## 解答例

- 定義どおりに計算する

$$\begin{aligned} f(a) &= \sum_{i=1}^n (a^T x_i - a^T \bar{x})^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (a^T x_i - a^T \bar{x})(x_i^T a - \bar{x}^T a) \\ &= a^T X^T X a \end{aligned}$$

– 回帰分析の Gram 行列を参照

- 制約付き最適化なので未定係数法を用いればよい

$$L(\mathbf{a}, \lambda) = f(\mathbf{a}) + \lambda(1 - \mathbf{a}^T \mathbf{a})$$

の鞍点

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} L(\mathbf{a}, \lambda) = 0$$

を求めればよいので

$$2X^T X \mathbf{a} - 2\lambda \mathbf{a} = 0$$

$$X^T X \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a} \quad (\text{固有値問題})$$

## 第1主成分の解

### 行列による表現

- 中心化したデータ行列

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

- 評価関数  $f(\mathbf{a})$  は行列  $X^T X$  の二次形式

$$f(\mathbf{a}) = \mathbf{a}^T X^T X \mathbf{a}$$

### ベクトル $\mathbf{a}$ の解

- 最適化問題

$$\text{maximize } f(\mathbf{a}) = \mathbf{a}^T X^T X \mathbf{a} \quad \text{s.t. } \mathbf{a}^T \mathbf{a} = 1$$

- 制約付き最適化なので未定係数法を用いればよい

$$L(\mathbf{a}, \lambda) = f(\mathbf{a}) + \lambda(1 - \mathbf{a}^T \mathbf{a})$$

の鞍点

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} L(\mathbf{a}, \lambda) = 0$$

を求めればよいので

$$2X^T X \mathbf{a} - 2\lambda \mathbf{a} = 0$$

$$X^T X \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a} \quad (\text{固有値問題})$$

- 解の条件

$f(\mathbf{a})$  の極大値を与える  $\mathbf{a}$  は  $X^T X$  の固有ベクトルとなる

$$X^T X \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a}$$

## 第1主成分

- 固有ベクトル  $\mathbf{a}$  に対する  $f(\mathbf{a})$  は行列  $X^T X$  の固有値

$$f(\mathbf{a}) = \mathbf{a}^T X^T X \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \lambda \mathbf{a} = \lambda$$

- 求める  $\mathbf{a}$  は行列  $X^T X$  の最大固有ベクトル (長さ 1)
- 第1主成分負荷量**: 最大 (第一) 固有ベクトル  $\mathbf{a}$
- 第1主成分得点**

$$z_{i1} = a_1 x_{i1} + \cdots + a_p x_{ip} = \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i, \quad (i = 1, \dots, n)$$

## 実習

### 練習問題

- 第1主成分と Gram 行列の固有ベクトルの関係を調べなさい
  - 人工データを生成する
  - 主成分分析を実行する
  - Gram 行列を計算し固有値・固有ベクトルを求める

```
#' 中心化を行う
X <- scale(toy_data, scale=FALSE) # help(scale) でオプション scaleを確認
#' Gram 行列を計算する
G <- crossprod(X)
#' 固有値・固有ベクトルを求める
eigen(G) # help(eigen) で戻り値を確認
```

## Gram 行列の性質

### Gram 行列の固有値

- $X^T X$  は非負定値対称行列
- $X^T X$  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  $\lambda_k$  に対する固有ベクトルを  $\mathbf{a}_k$  (長さ 1) とする

$$\|\mathbf{a}_k\| = 1, \quad (k = 1, \dots, p)$$

### Gram 行列のスペクトル分解

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

$$j \neq k \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_k = 0$$

- 行列  $X^T X$  (非負定値対称行列) のスペクトル分解

$$\begin{aligned}
 X^T X &= \lambda_1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T + \lambda_2 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2^T + \cdots + \lambda_p \mathbf{a}_p \mathbf{a}_p^T \\
 &= \sum_{k=1}^p \lambda_k \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^T
 \end{aligned}$$

– 固有値と固有ベクトルによる行列の表現

## 第2主成分以降の計算

### 第2主成分の考え方

- 第1主成分
  - 主成分負荷量: ベクトル  $\mathbf{a}_1$
  - 主成分得点:  $\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}_i$  ( $i = 1, \dots, n$ )
- 第1主成分負荷量に関してデータが有する情報

$$(\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}_i) \mathbf{a}_1 \quad (i = 1, \dots, n)$$

- 第1主成分を取り除いた観測データ (分析対象)

$$\tilde{\mathbf{x}}_i = \mathbf{x}_i - (\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}_i) \mathbf{a}_1 \quad (i = 1, \dots, n)$$

### 第2主成分の最適化

- 最適化問題  
制約条件  $\|\mathbf{a}\| = 1$  の下で以下の関数を最大化せよ

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

## 第2主成分以降の解

### 行列による表現

- 中心化したデータ行列

$$\tilde{X} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1^T - \bar{\tilde{\mathbf{x}}}^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n^T - \bar{\tilde{\mathbf{x}}}^T \end{pmatrix} = X - X \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T$$

- Gram 行列

$$\begin{aligned}
 \tilde{X}^T \tilde{X} &= (X - X \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T)^T (X - X \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T) \\
 &= X^T X - X^T X \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T - \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T X^T X + \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T X^T X \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T \\
 &= X^T X - \lambda_1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T - \lambda_1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T + \lambda_1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T \\
 &= X^T X - \lambda_1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^T \\
 &= \sum_{k=2}^p \lambda_k \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^T
 \end{aligned}$$

## 第2主成分

- Gram 行列  $\tilde{X}^T \tilde{X}$  の固有ベクトル  $\mathbf{a}_1$  の固有値は 0

$$\tilde{X}^T \tilde{X} \mathbf{a}_1 = 0$$

- Gram 行列  $\tilde{X}^T \tilde{X}$  の最大固有値は  $\lambda_2$
- 解は第2固有値  $\lambda_2$  に対応する固有ベクトル  $\mathbf{a}_2$

- 
- 以下同様に第  $k$  主成分負荷量は  $X^T X$  の第  $k$  固有値  $\lambda_k$  に対応する固有ベクトル  $\mathbf{a}_k$

## 実習

### データセットの準備

- 主成分分析では以下のデータセットを使用する
  - japan\_social.csv (配付)  
総務省統計局より取得した都道府県別の社会生活統計指標の一部
    - \* Pref: 都道府県名
    - \* Forest: 森林面積割合 (%) 2014 年
    - \* Agri: 就業者 1 人当たり農業産出額 (販売農家) (万円) 2014 年
    - \* Ratio: 全国総人口に占める人口割合 (%) 2015 年
    - \* Land: 土地生産性 (耕地面積 1 ヘクタール当たり) (万円) 2014 年
    - \* Goods: 商業年間商品販売額 [卸売業 + 小売業] (事業所当たり) (百万円) 2013 年
  - \* 参考: <https://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?bid=000001083999&cycode=0>

### 練習問題

- 前掲のデータを用いて主成分分析を行いなさい
  - 都道府県名を行名としてデータを読み込む

```
js_data <- read_csv("data/japan_social.csv")
```

- データの散布図行列を描く
- 各データの箱ひげ図を描き、変数の大きさを確認する
- 主成分負荷量を計算する

```
js_pca <- prcomp(js_data[-1], scale. = TRUE)  
# ' -1 ' は都道府県名を除く. 関数 select() を利用することもできる  
# ' scale.=TRUE ' とすると変数を正規化してから解析する
```

## 次回の予定

- 第1日: 主成分分析の考え方
- 第2日: 分析の評価と視覚化