

dimensionality reduction

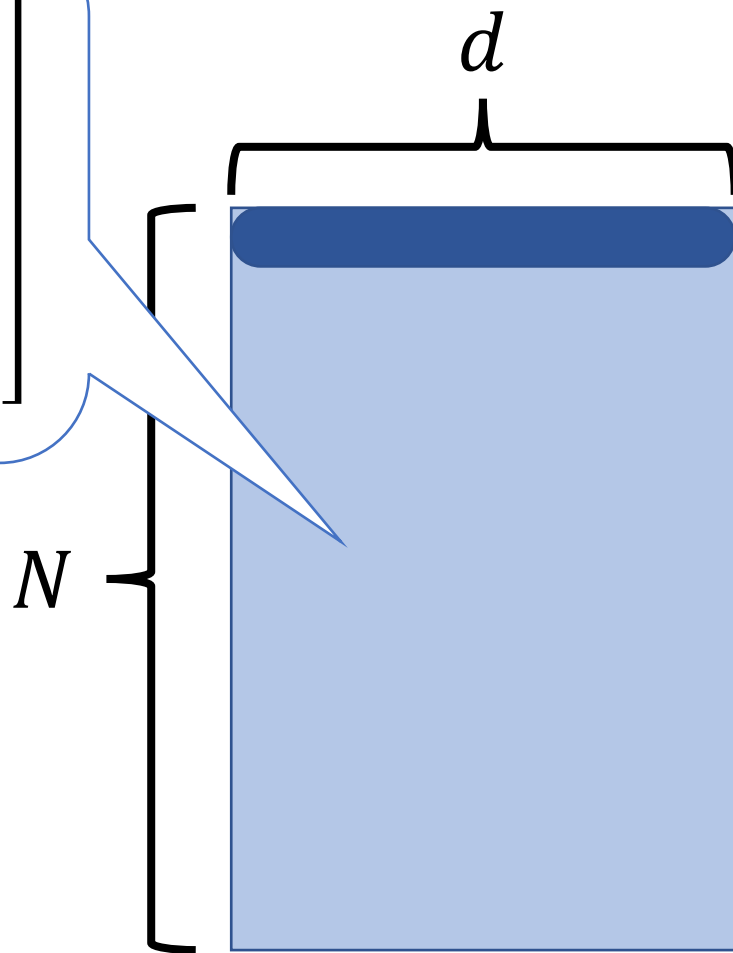
正田 備也

masada@rikkyo.ac.jp

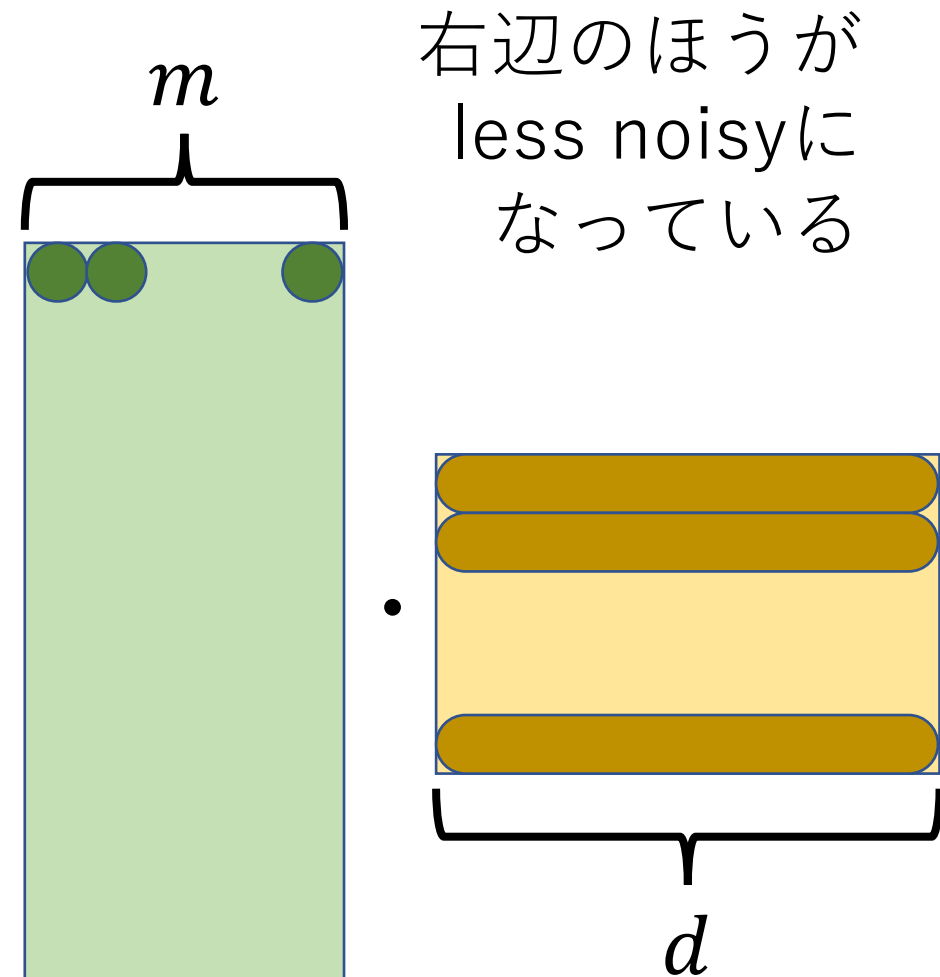
PCAで計画行列をless noisyにする

$$\begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,d} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{i,1} & x_{i,2} & \cdots & x_{i,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \cdots & x_{N,d} \end{bmatrix}$$

左辺は
元々の
計画行列



$\hat{=}$



PCAの考え方

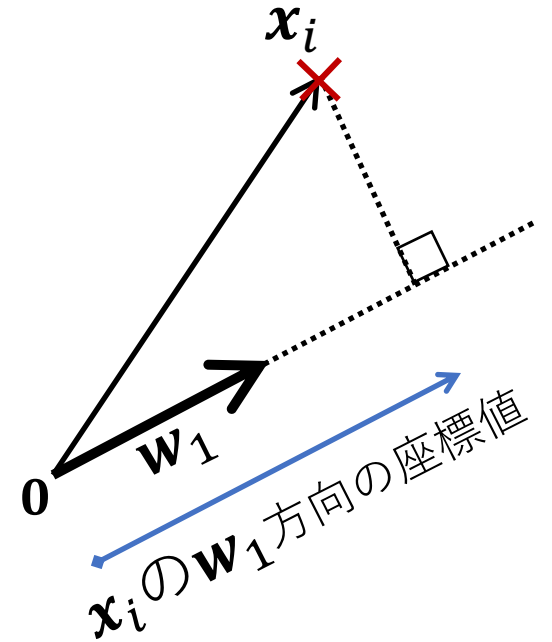
- 高次元空間に散らばったデータ点の集合が与えられている
 - データ点はベクトルです（原点から発してその点まで達する矢印のイメージ）
 - データの重心が原点になるように、全体の位置をシフトさせておく。
- データ点が最も広く散らばっている方向を見つける
 - この方向を表すベクトルが、主成分
- その方向と直交する超平面上に、全てのデータ点を押しつぶす
 - データ点の散らばっている空間の次元が、ひとつだけ下がる
- 次元を下げた空間で、また同じことをする
 - つまり、データ点が最も広く散らばっている方向を見つける

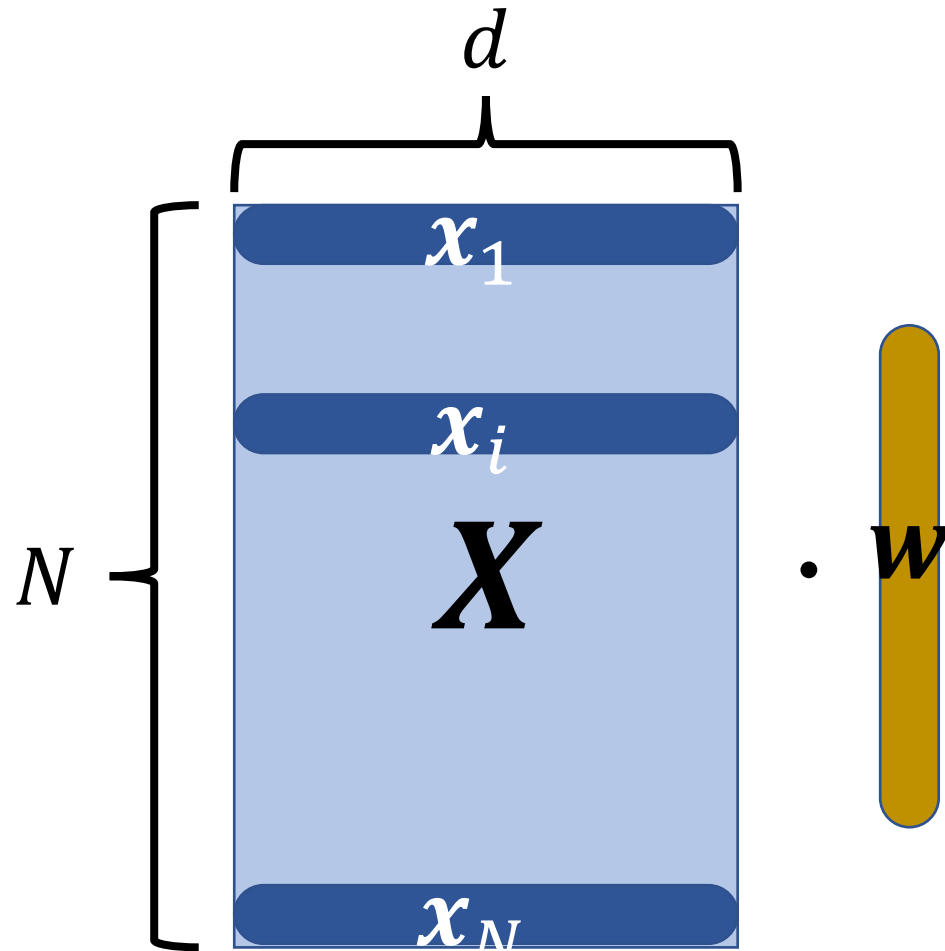
「最も広く散らばっている方向」

- 式で書くと以下の通り

$$\mathbf{w}_1 = \arg \max_{\|\mathbf{w}\|=1} \|\mathbf{X}\mathbf{w}\|^2$$

- \mathbf{X} は計画行列（ただし重心を原点へ移動した後のもの）
- $\mathbf{X}\mathbf{w}$ は列ベクトル
 - \mathbf{X} の各行ベクトル \mathbf{x}_i と \mathbf{w} との内積の値が要素として並ぶ、列ベクトル。
 - この内積の値は、 \mathbf{X} の各行ベクトル \mathbf{x}_i の、 \mathbf{w} の方向への座標値。
 - つまり、 \mathbf{w} の方向への+か-の符号がついた長さ





Xw のイメージ

各データ点 x_i と w との内積 $x_i^T w$ を、まとめて書いているだけ。

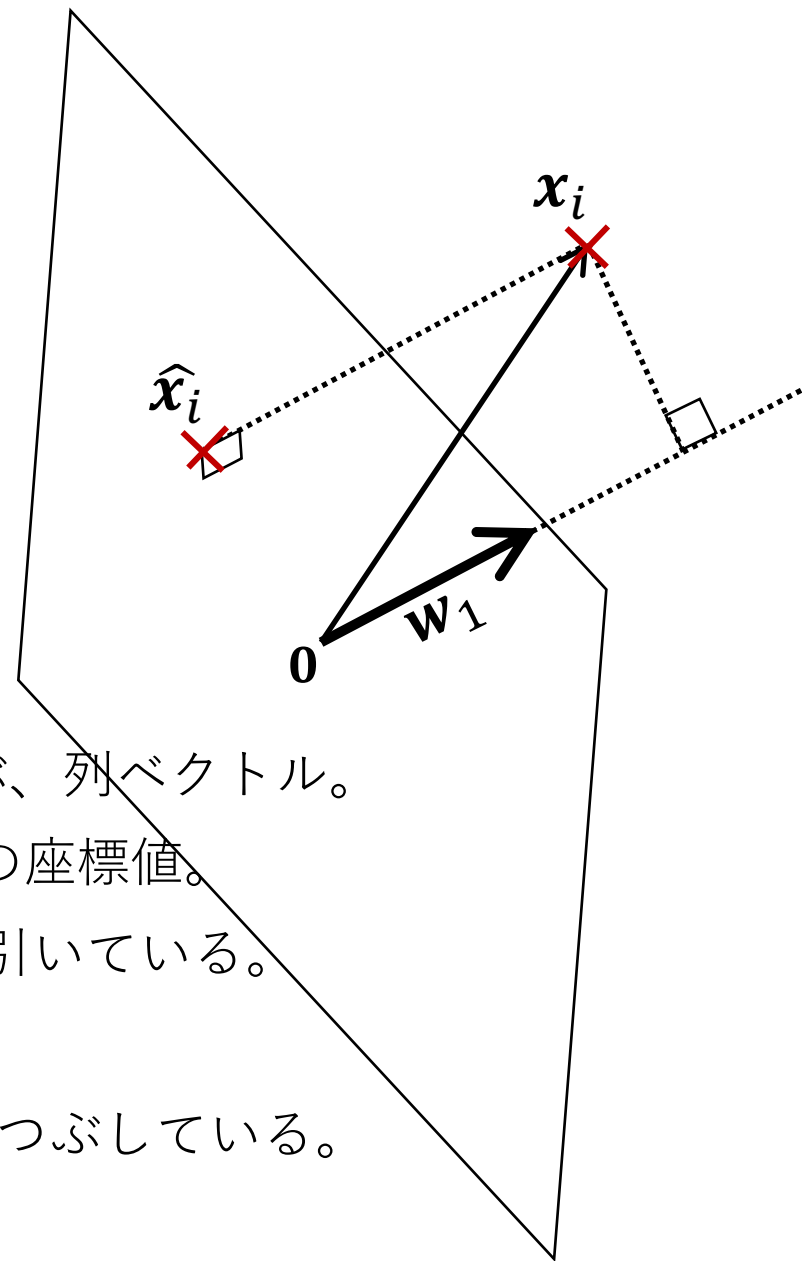
「データ点を押しつぶす」

- 式で書くと以下の通り

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{X} - (\mathbf{X}\mathbf{w}_1)\mathbf{w}_1^T$$

- $\mathbf{X}\mathbf{w}$ は列ベクトル

- \mathbf{X} の各行ベクトル \mathbf{x}_i と \mathbf{w} との内積の値が要素として並ぶ、列ベクトル。
- この内積の値は、 \mathbf{X} の各行ベクトル \mathbf{x}_i の、 \mathbf{w} の方向への座標値。
- その座標値に \mathbf{w}_1 をかけて、元の \mathbf{X} の行ベクトル \mathbf{x}_i から引いている。
- こうすると、 \mathbf{x}_i から \mathbf{w}_1 方向の成分を消せる。
- つまり、 \mathbf{x}_i を、 \mathbf{w}_1 と直交し原点を通る超平面上へ押しつぶしている。

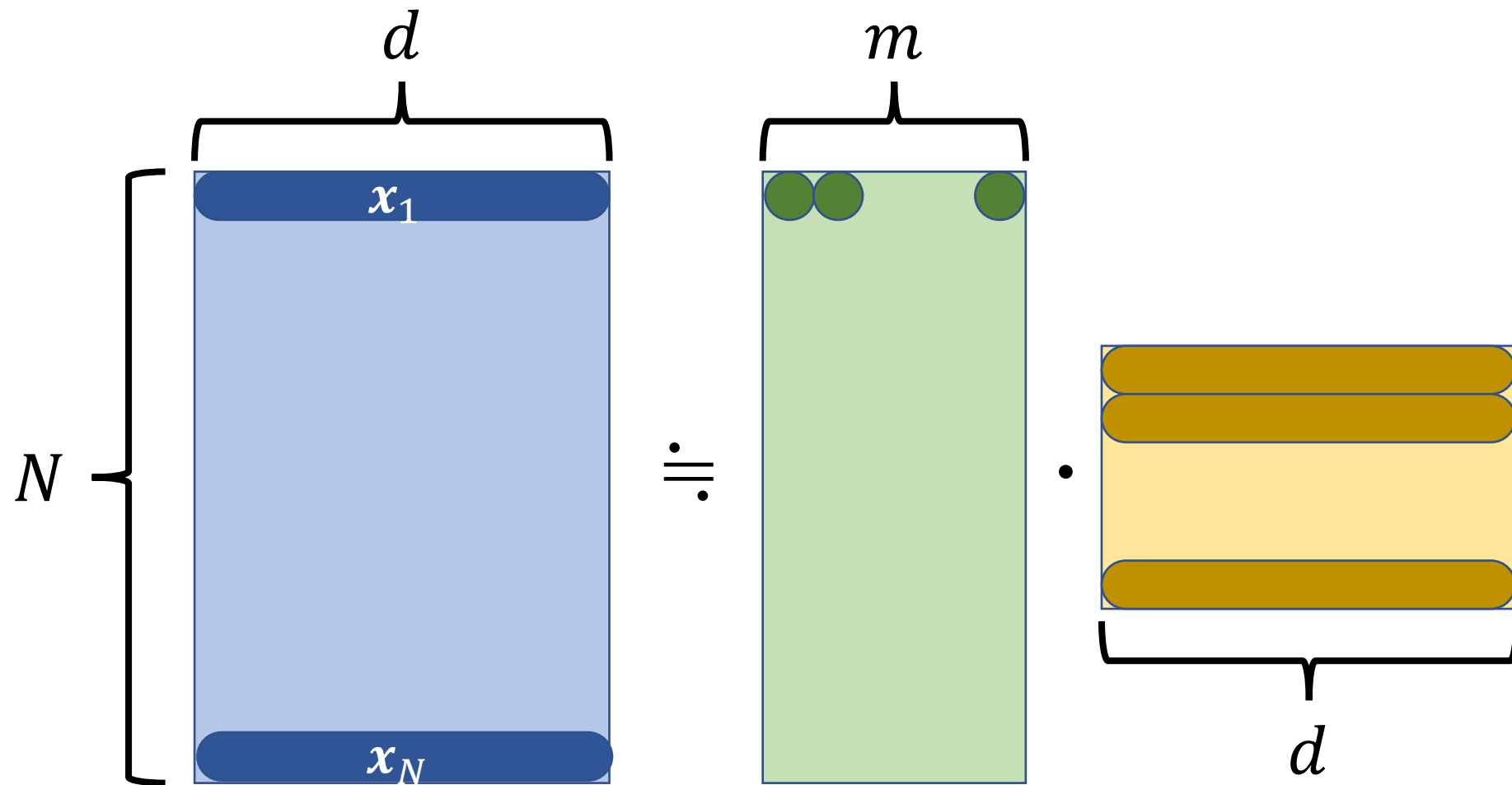


PCAの（実際の）アルゴリズム

1. データを中心化する（平均を引く）
2. 共分散行列 $\mathbf{C} = \frac{1}{n-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$ を計算する
3. 共分散行列 \mathbf{C} の固有値と固有ベクトルを求める
4. 最も大きい m 個の固有値に対応する固有ベクトルを選ぶ
 - このアルゴリズムで求まる固有ベクトルと、「最も広く散らばった方向」が同じになることは、ちゃんと証明できる
 - 等式制約の場合のラグランジュ未定乗数法を使う。

PCA, NMF, PLSIなど

- 計画行列を、小さい2つの行列の積で表現し直す



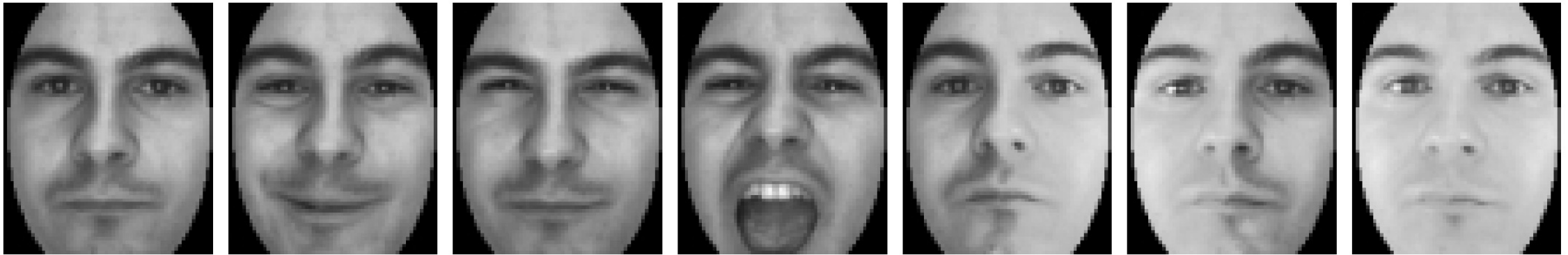
NMF (Nonnegative Matrix Factorization)

- PCAの問題点

- 元々どの属性値も負の値を取り得ないデータには適用しにくい
- 主成分は負の値を含みうるが、このような負の値は解釈が難しい

- NMFの特徴

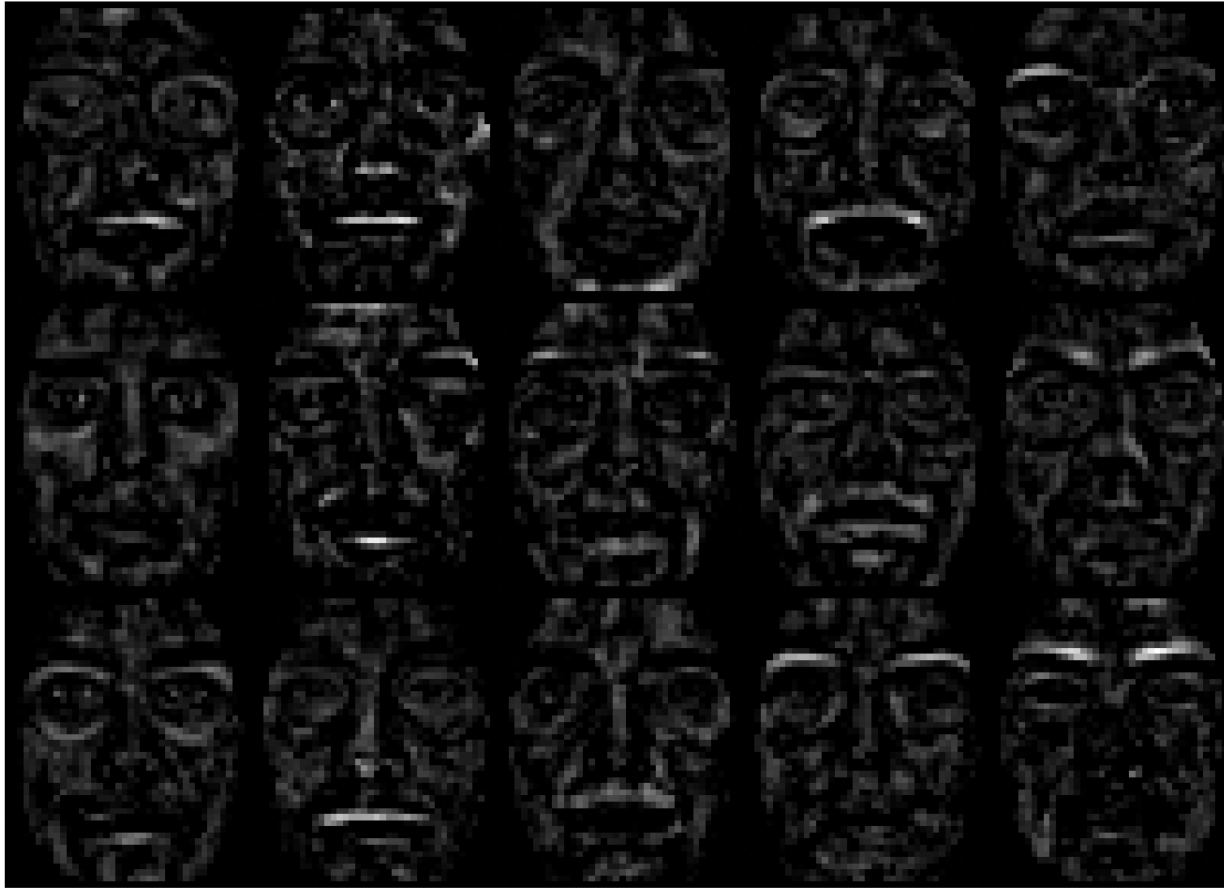
- PCAでいう主成分に相当するベクトルが非負ベクトルとして得られる
- 得られる非負ベクトルは、お互いに直交しないこともありうる
 - ただし、疎なベクトルになるので、ほぼ直交しているともみなせる。



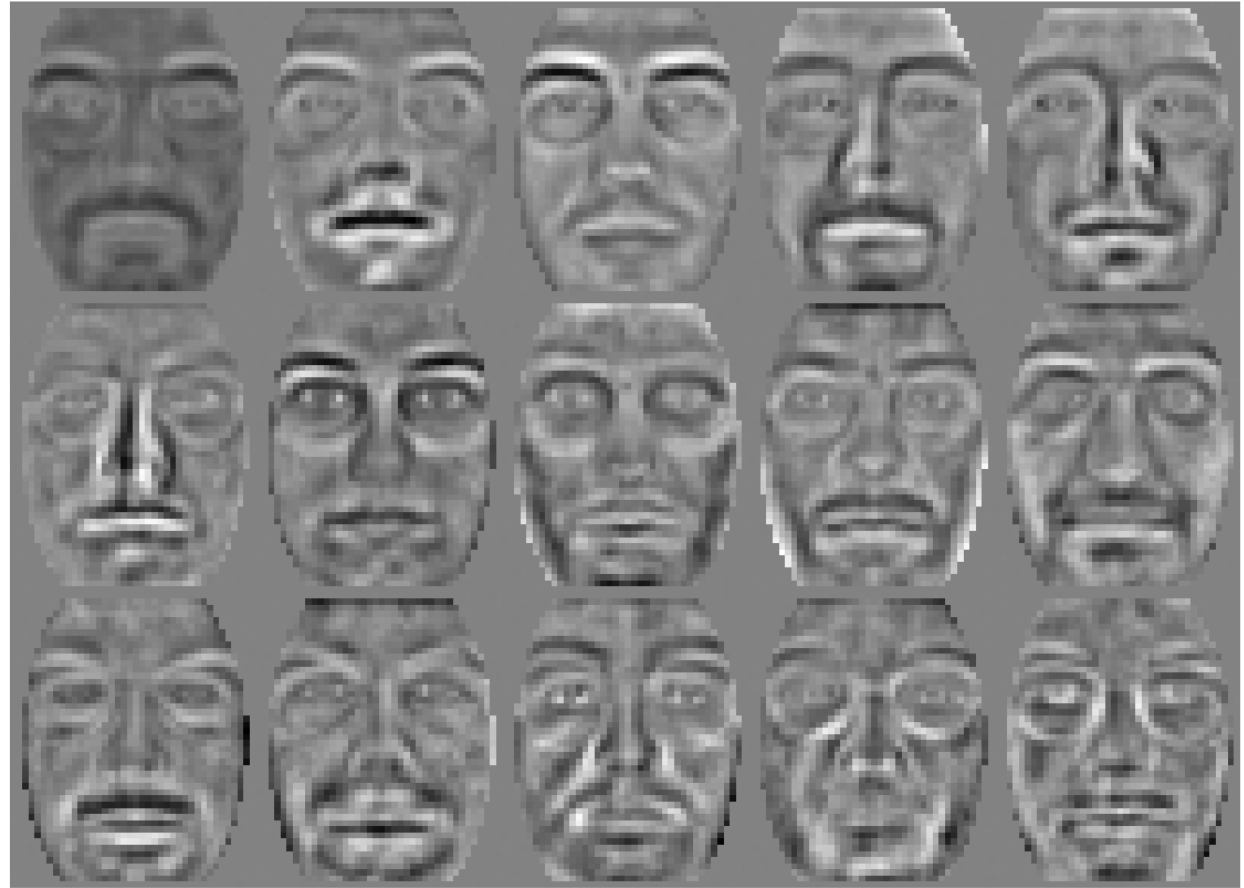
AR 01 AR 02 AR 03 AR 04 AR 05 AR 06 AR 07



AR 08 AR 09 AR 10 AR 11 AR 12 AR 13



(a) NMF bases.



(b) PCA bases.

Fig. 2. Bases obtained by both techniques, PCA and NMF

PLSI (probabilistic latent semantic indexing)

- NMFの確率モデル版
- 詳細は来年夏学期の「統計モデリング2」で
- EMアルゴリズムでパラメータを推定する

LDA (latent Dirichlet allocation)

- PLSIをベイズ化した確率モデル
- 詳細は来年夏学期の「統計モデリング2」で
- 変分ベイズ推定で事後分布のパラメータを推定する

今日の課題

- 手話画像を再構成してみる
- inverse_transformメソッドを持つクラスを使う
 - <https://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html#module-sklearn.decomposition>
- 手法ごとの特徴のようなものはあるか？
 - https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/decomposition/plot_faces_decomposition.html