データ解析
第七回「主成分分析」

鈴木　大慈
理学部情報科学科
西八号館 W707 号室
s-taiji@is.titech.ac.jp

今日の講義内容

- 主成分分析

構成

主成分分析の目的

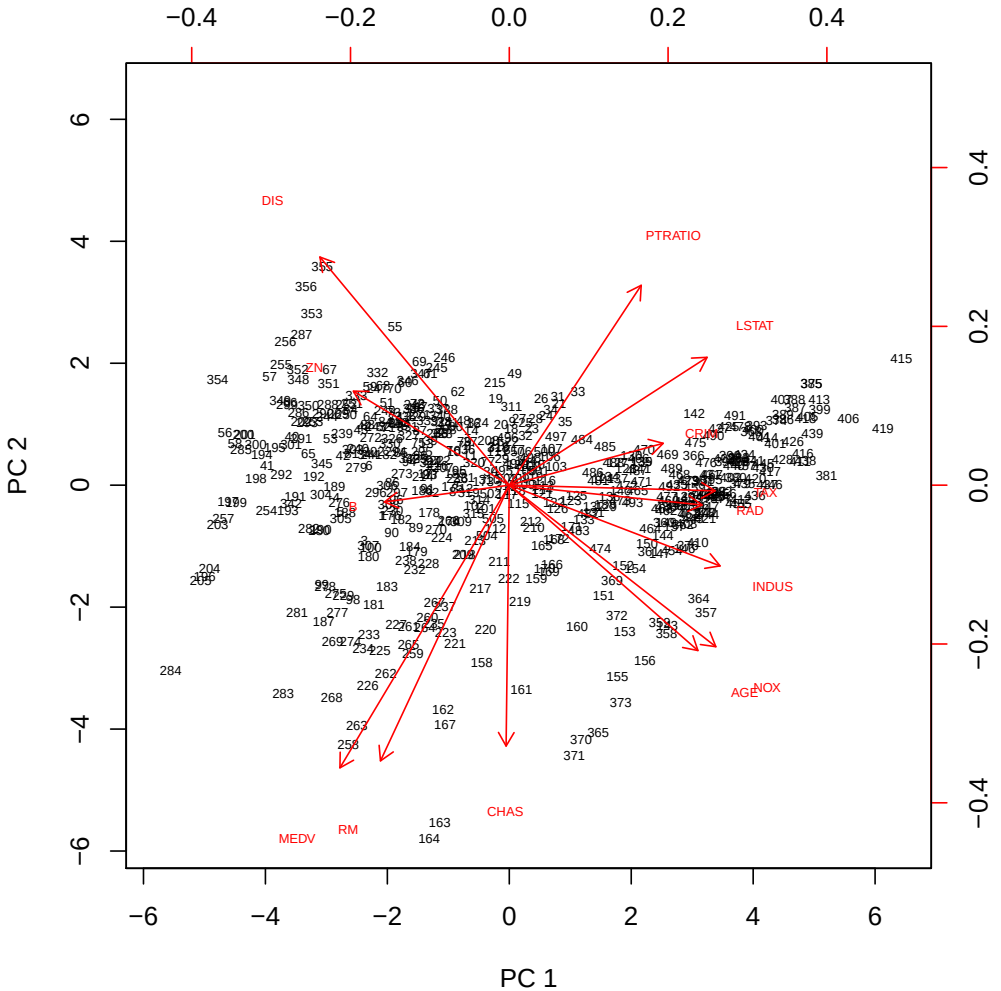
主成分分析: PCA (Principal Component Analysis) とも呼ばれる.

使いドコロ：多変量データを少ない変数に要約したい.
→ データの視覚化.
→ 線形回帰等多変量データ解析の前処理.

データを低い次元に落とすことを「次元削減」と言う.

主成分分析はデータ解析において「とりあえずやってみること」の一つ.

主成分分析で何が得られる？



多変量データを二次元に射影してデータを要約することができる．

- CRIM 各町の一人あたりの犯罪率
- ZN 宅地割合
- INDUS 非商用地の割合
- CHAS チャールズ川沿いかどうか
- NOX 一酸化窒素濃度
- RM 住居の平均部屋数
- AGE 1940 年より古くに建てられた住居の割合
- DIS ボストンのビジネス街からの距離
- RAD ハイウェイへのアクセスの良さ
- TAX 固定資産税
- PTRATIO 教師人口の割合
- B アフリカ系アメリカ人の割合を Bk としたときの $1000(Bk - 0.63)^2$
- LSTAT 低所得者層の割合
- MEDV 持ち家価格の中央値

主成分分析の流れ

1. データの標準化：中心化，分散の基準化
2. 分散共分散行列の計算
3. 分散共分散行列を固有値固有ベクトル分解
4. 固有値の大きい方からいくつかの固有値固有ベクトルを取ってくる
   →主成分！
5. 主成分にデータを射影して視覚化および回帰などの処理を続行

データの形式

$$
X = \underbrace{\begin{pmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & \cdots & X_{1,d} \\ X_{2,1} & X_{2,2} & \cdots & X_{2,d} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ X_{n,1} & X_{n,2} & \cdots & X_{n,d} \end{pmatrix}}_{d \text{ 次元}} \Bigg\} n \text{ サンプル}
$$

$$
= \begin{pmatrix} x_1^\top \\ x_2^\top \\ \vdots \\ x_n^\top \end{pmatrix}
$$

データの標準化

データの標準化

- 中心化 元データから平均を引いて平均を 0 にする.
- 分散の基準化 中心化したデータを標準偏差で割って，分散を 1 に基準化.

$$\hat{\mu}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij} : \quad \text{平均値 (の推定量)}$$

$$\hat{\sigma}_j = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \hat{\mu}_j)^2} : \quad \text{標準偏差 (の推定量)}$$

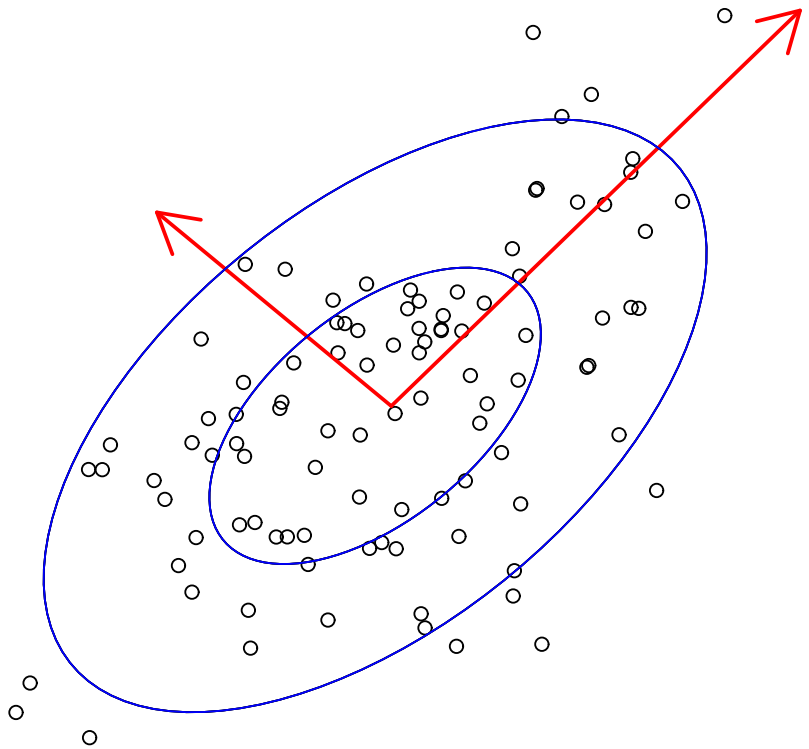
標準化：中心化して分散を 1 に基準化

$$x_{ij} \leftarrow \frac{x_{ij} - \hat{\mu}_j}{\hat{\sigma}_j}$$

→　各成分は平均 0 分散 1 になる.

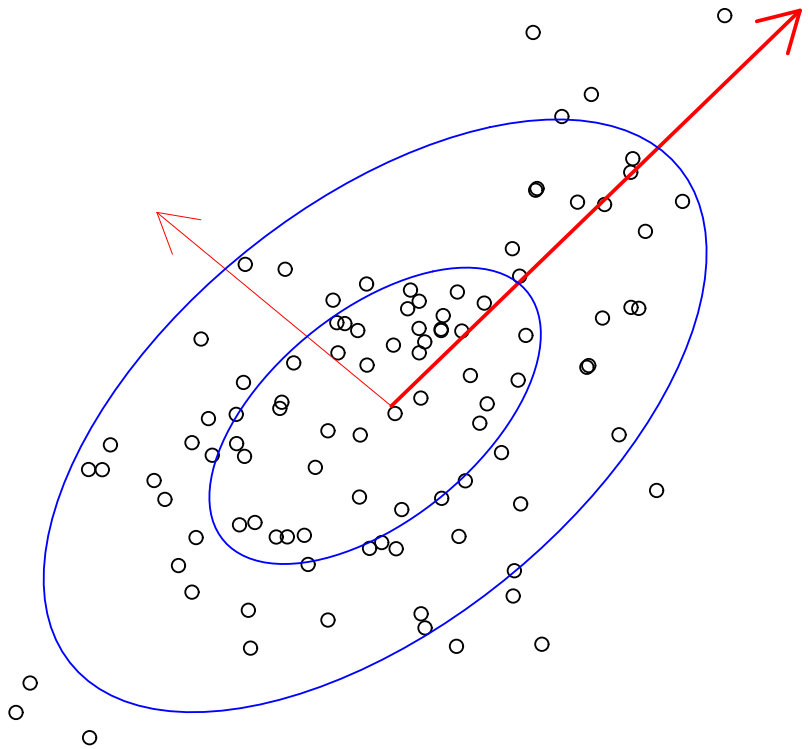
※ 主成分分析においては分散は 1 に揃えない場合も多い.

バラツキ（分散）が最大の方向



第一主成分とは，バラツキが一番大きい方向である．
分散が大きい→そのデータを特徴付ける方向→データの要約

バラツキ（分散）が最大の方向



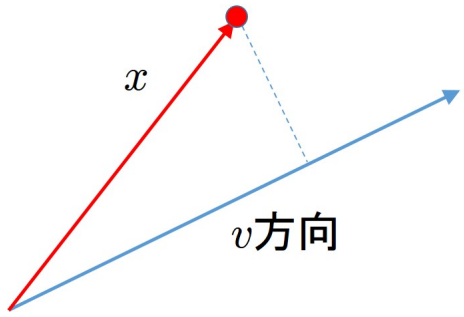
第一主成分とは，バラツキが一番大きい方向である．
分散が大きい→そのデータを特徴付ける方向→データの要約

バラツキ（分散）が最大の方向の計算

ある方向ベクトルを $v(\|v\| = 1)$ とおく．この方向への x の長さは

$$v^\top x$$

で求まる．
よって $v^\top x_i$ の分散は



$$\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}[v^\top(x_i-\hat{\mu})]^2 = v^\top \underbrace{\left(\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\hat{\mu})(x_i-\hat{\mu})^\top\right)}_{\text{分散共分散行列}} v$$

$$=: v^\top \Sigma v,$$

である．これを最大にする方向 v を求める:

$$\max_{v:\|v\|=1} v^\top \Sigma v.$$

→ 最大固有値に対応する固有ベクトルにほかならない．

分散共分散行列の固有値

Σ は (実対称) 半正定値行列 (チェックせよ)

一般に半正定値行列は直交行列で対角化可能 (固有値固有ベクト分解):

$$\Sigma v_j = \lambda_j v_j \quad (j = 1, \ldots, d),$$

ただし，v_j らは互いに直交 ($\langle v_j, v_{j'} \rangle = 0$ $(j \neq j')$) し，$\lambda_1 \geq \ldots \lambda_d \geq 0$.

行列表現

$$V = [v_1, \ldots, v_d], \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_d)$$

に対して,

$$\Sigma V = V\Lambda.$$

V は直交行列なので,

$$V^\top \Sigma V = \Lambda, \quad \Sigma = V\Lambda V^\top$$

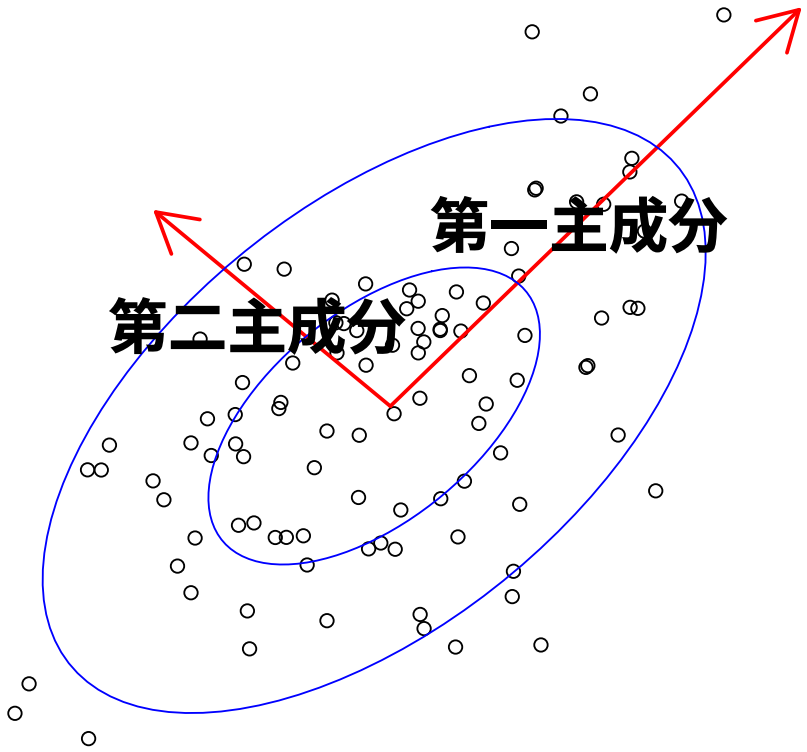
でもある.

最大固有値

$$
\begin{aligned}
\max_{v:\|v\|=1} v^\top \Sigma v &= \max_{v:\|v\|=1} v^\top V \Lambda V^\top v \\
&= \max_{v:\|v\|=1} v^\top \Lambda v \quad (\because \|Vv\| = 1 \Leftrightarrow \|v\| = 1) \\
&= \max_{v:\|v\|=1} \sum_{j=1}^{d} v_j^2 \lambda_j \\
&= \lambda_1,
\end{aligned}
$$

であり，最大化元は v_1 $(v_1^\top \Sigma v_1 = \lambda_1)$.

第二第三の主成分



v_1 (第一主成分) に直交した成分で，バラツキの一番大きな成分:

$$\max_{v: v_1 \perp v, \|v\|=1} v^\top \Sigma v.$$

第二第三主成分の計算

$$
\begin{aligned}
\max_{v:v_1 \perp v, \|v\|=1} v^\top \Sigma v &= \max_{v:v_1 \perp v, \|v\|=1} v^\top V \Lambda V^\top v \\
&= \max_{v:v_1 \perp v, \|v\|=1} v^\top [v_1 v_2 \dots v_d] \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_d \end{pmatrix} [v_1 v_2 \dots v_d]^\top v \\
&= \max_{v:v_1 \perp v, \|v\|=1} v^\top [v_2 \dots v_d] \begin{pmatrix} \lambda_2 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_d \end{pmatrix} [v_2 \dots v_d]^\top v \\
&= \lambda_2,
\end{aligned}
$$

最適解は v_2.
以下同様に第 j 主成分は j 番目の固有ベクトル v_j である.

まとめ

分散共分散行列を固有値分解して上から必要な数分だけ取ってくれば良い.

$$\Sigma = V\Lambda V^\top = [v_1 \dots v_d] \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_d \end{pmatrix} [v_1 \dots v_d]^\top.$$

固有値固有ベクトル分解

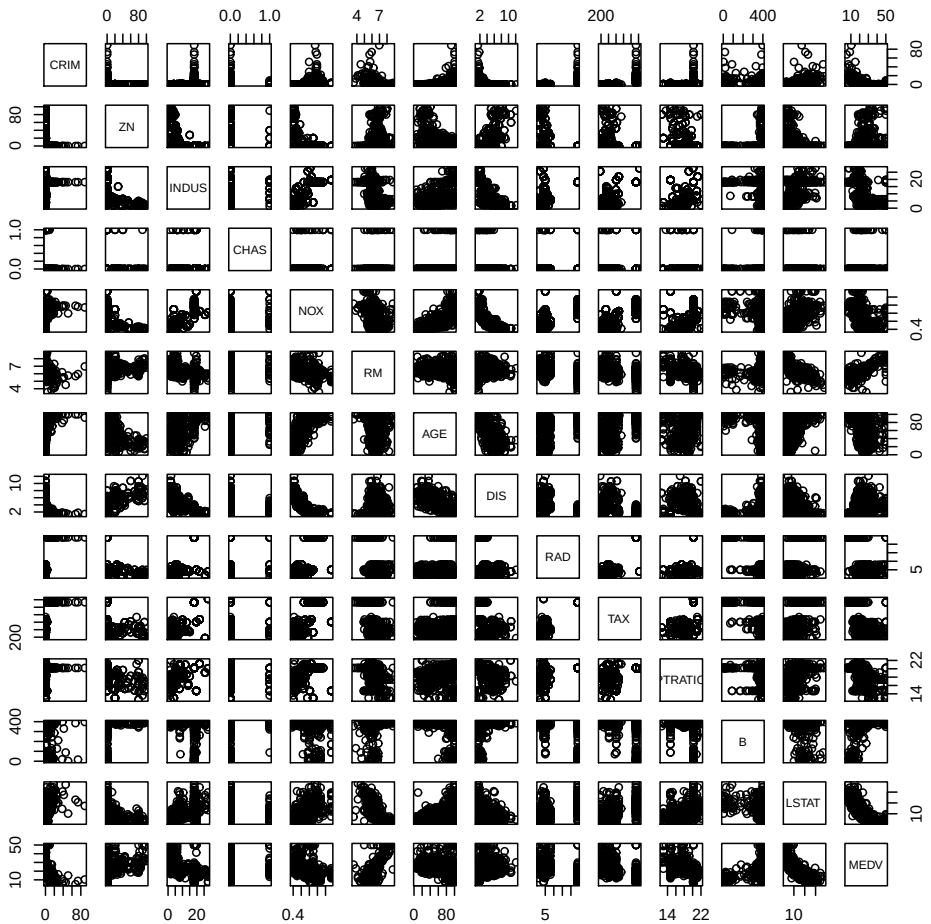
第 j 主成分: v_j
第 j 主成分スコア: $v_j^\top x$ (サンプル x が第 j 主成分をどれだけ含んでいるか)
第 j 主成分の寄与率: $\frac{\lambda_j}{\sum_j \lambda_j} (> 0)$

寄与率はその主成分方向がデータの何割を表現しているかを表している.
寄与率の大きい成分から順に取ってくることでデータの良い要約を得る.
それが主成分分析.

構成

ボストンハウジングデータ

```
x <- read.table("housing_table.data", header=T)
plot(x)
```



変数の意味

- CRIM 各町の一人あたりの犯罪率
- ZN 宅地割合
- INDUS 非商用地の割合
- CHAS チャールズ川沿いかどうか
- NOX 一酸化窒素濃度
- RM 住居の平均部屋数
- AGE 1940 年より古くに建てられた住居の割合
- DIS ボストンのビジネス街からの距離
- RAD ハイウェイへのアクセスの良さ
- TAX 固定資産税
- PTRATIO 教師人口の割合
- B アフリカ系アメリカ人の割合を Bk としたときの $1000(Bk - 0.63)^2$
- LSTAT 低所得者層の割合
- MEDV 持ち家価格の中央値

変数の標準化

scale 関数で標準化可能

```
> x <- scale(x)     #標準化
> colMeans(x)       #全変数の平均 0
         CRIM            ZN         INDUS          CHAS           NOX            RM
-6.899468e-18  2.298337e-17  1.516683e-17 -3.510587e-18 -2.149412e-16 -1.058524e-16
          AGE           DIS           RAD           TAX       PTRATIO             B
-1.645039e-16  1.144506e-16  4.651527e-17  1.906139e-17 -3.931034e-16 -1.155991e-16
        LSTAT          MEDV
-7.012260e-17 -1.379311e-16
> diag(var(x))      #全変数の分散 1
   CRIM      ZN   INDUS    CHAS     NOX      RM     AGE     DIS     RAD     TAX PTRATIO
      1       1       1       1       1       1       1       1       1       1       1
      B   LSTAT    MEDV
      1       1       1
```

分散共分散行列の計算

```
> Sigma = cov(x) #分散共分散行列を計算.
> Sigma[1:5,1:5]
              CRIM          ZN       INDUS        CHAS         NOX
CRIM    1.00000000 -0.20046922  0.40658341 -0.05589158  0.42097171
ZN     -0.20046922  1.00000000 -0.53382819 -0.04269672 -0.51660371
INDUS   0.40658341 -0.53382819  1.00000000  0.06293803  0.76365145
CHAS   -0.05589158 -0.04269672  0.06293803  1.00000000  0.09120281
NOX     0.42097171 -0.51660371  0.76365145  0.09120281  1.00000000
```

分散共分散行列の固有値固有ベクトル分解

```
> res <- eigen(Sigma)  #分散共分散行列を固有値固有ベクトル変換
> res
$values
 [1] 6.54598958 1.64953191 1.34890592 0.88653987 0.85089944 0.66001077 0.53
[13] 0.13400970 0.06032666

$vectors
              [,1]         [,2]         [,3]         [,4]         [,5]
 [1,]  0.242284451  0.065873108  0.395077419  0.100366211  0.004957659 -0.2
 [2,] -0.245435005  0.148002653  0.394545713  0.342958421  0.114495002 -0.3
 [3,]  0.331859746 -0.127075668 -0.066081913 -0.009626936 -0.022583692 -0.0
 [4,] -0.005027133 -0.410668763 -0.125305293  0.700406497 -0.535197817  0.1
```

res$values は固有値．降順に並んでいる．
res$vectors は固有ベクトルを並べた行列 ($V$ のこと)．

固有値・固有ベクトルのチェック

固有値・固有ベクトルの性質をチェック

```
> norm(Sigma - res$vectors %*% diag(res$values) %*% t(res$vectors)) #確認
[1] 2.668005e-14
> tmp <- (res$vectors %*% t(res$vectors)); tmp[1:5,1:5]
              [,1]          [,2]          [,3]          [,4]          [,5]
[1,]  1.000000e+00 -5.551115e-17  1.040834e-16  2.602085e-18 -3.729655e-17
[2,] -5.551115e-17  1.000000e+00 -1.942890e-16 -1.170938e-16  2.064321e-16
[3,]  1.040834e-16 -1.942890e-16  1.000000e+00 -8.239937e-17 -6.834810e-16
[4,]  2.602085e-18 -1.170938e-16 -8.239937e-17  1.000000e+00 -6.591949e-17
[5,] -3.729655e-17  2.064321e-16 -6.834810e-16 -6.591949e-17  1.000000e+00
> tmp <- (t(res$vectors) %*% res$vectors); tmp[1:5,1:5]
              [,1]          [,2]          [,3]          [,4]          [,5]
[1,] 1.000000e+00  1.387779e-16  3.191891e-16  4.857226e-17  2.081668e-17
[2,] 1.387779e-16  1.000000e+00 -4.024558e-16  6.938894e-17 -3.122502e-17
[3,] 3.191891e-16 -4.024558e-16  1.000000e+00 -5.551115e-17 -5.204170e-17
[4,] 4.857226e-17  6.938894e-17 -5.551115e-17  1.000000e+00 -3.070461e-16
[5,] 2.081668e-17 -3.122502e-17 -5.204170e-17 -3.070461e-16  1.000000e+00
```

※ 対角行列の場合，固有ベクトルは直交行列をなす.

固有値・固有ベクトルのチェック 2

固有値・固有ベクトルの性質をチェック

```
> norm(Sigma %*% res$vectors - res$vectors %*% diag(res$values)) #確認
[1] 2.207262e-14
```

$$
\begin{aligned}
& \Sigma v_j = \lambda_j v_j \quad (\forall 1 \leq j \leq d) \\
\Rightarrow \quad & \Sigma V = V\Lambda, \\
& \text{ただし } V = [v_1, \ldots, v_d], \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \lambda_d \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

主成分分析

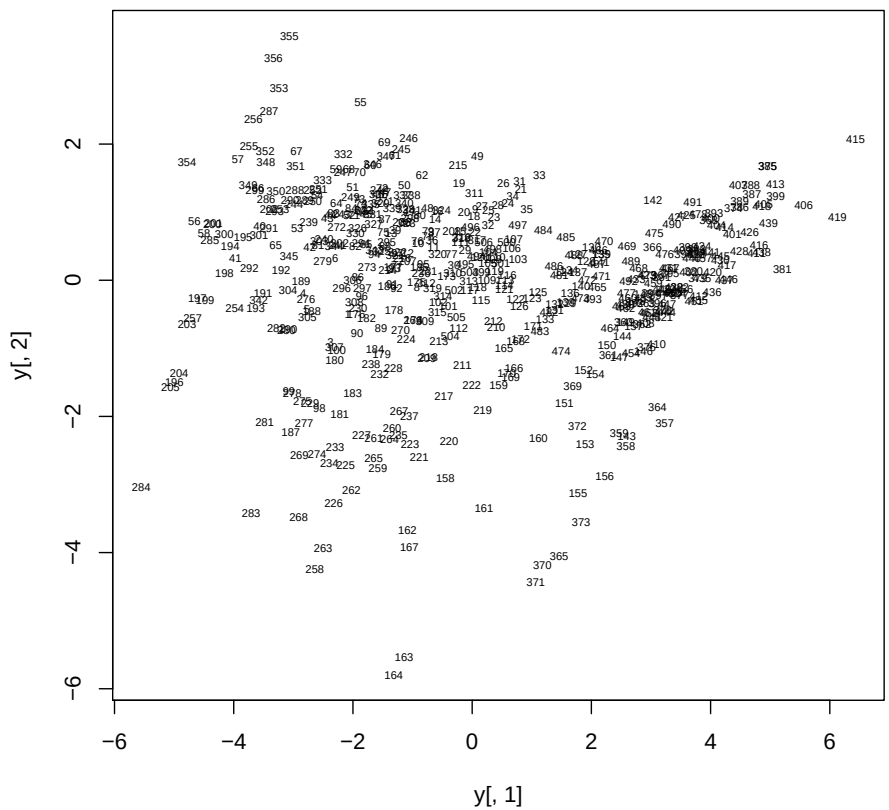
```
> #主成分分析
> Lam <- res$values
> V <- res$vectors
> y = x %*% V #主成分スコアの計算
> dim(y)  # n × d
[1] 506  14
```

$$y_i^\top = x_i^\top V = [x_i^\top v_1, \ldots, x_i^\top v_d],$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1^\top \\ \vdots \\ y_n^\top \end{pmatrix}.$$

第一，第二主成分スコアのプロット

```
> plot(y[,1],y[,2],type='n')    #第一，第二主成分スコアをプロット
> text(y[,1],y[,2],seq(length=nrow(y)),cex=0.5)
```



主成分スコア (Y の各列) は互いに無相関.

```
> round(cov(y),10)  #y は無相関
          [,1]     [,2]     [,3]      [,4]      [,5]
[1,] 6.54599 0.000000 0.000000 0.0000000 0.0000000
[2,] 0.00000 1.649532 0.000000 0.0000000 0.0000000
[3,] 0.00000 0.000000 1.348906 0.0000000 0.0000000
[4,] 0.00000 0.000000 0.000000 0.8865399 0.0000000
[5,] 0.00000 0.000000 0.000000 0.0000000 0.8508994
```

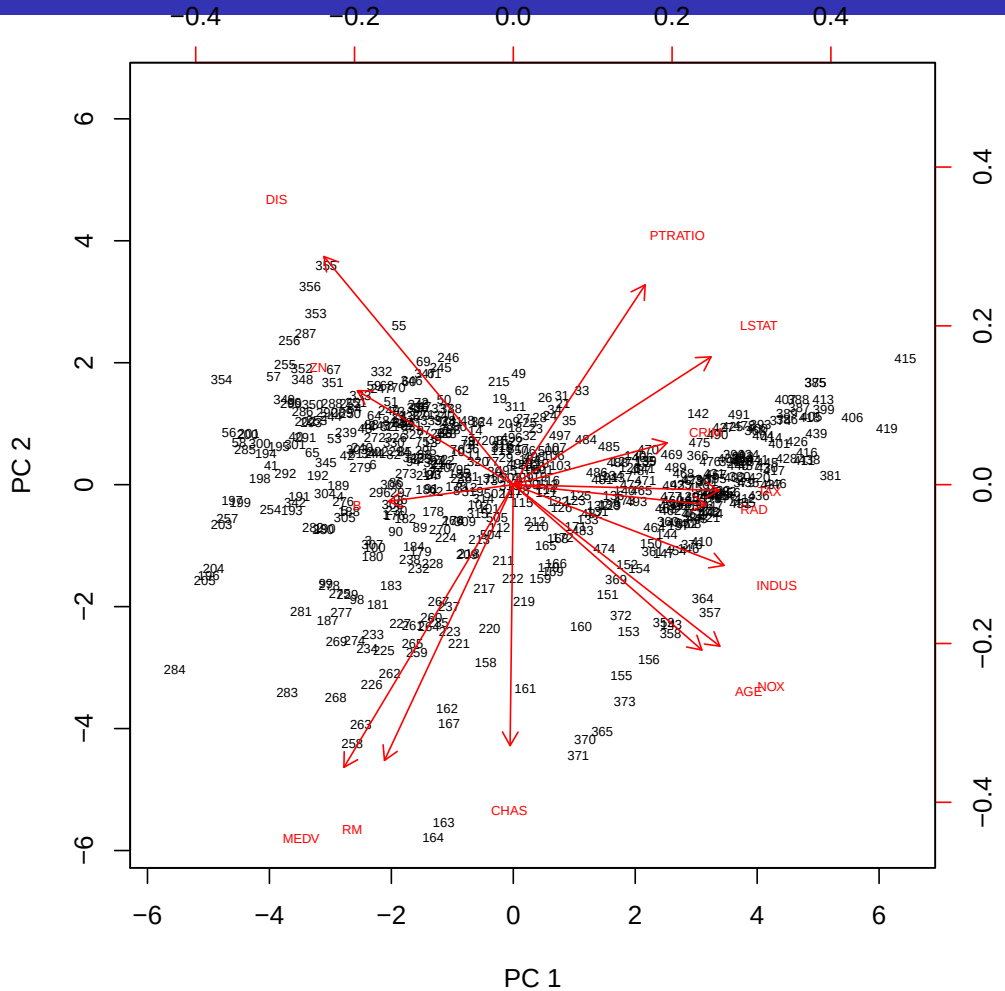
$$y = XV \in \mathbb{R}^{n \times d}$$

$$\Rightarrow \quad y^\top y = V^\top X^\top XV = V^\top(\Sigma)V = V^\top(V\Lambda V^\top)V = (V^\top V)\Lambda(V^\top V) = \Lambda.$$

主成分スコアと軸のプロット

```
biplot(y[,c(1,2)],V[,c(1,2)],cex=0.5) #第一，第二主成分スコア
```

第一・第二主成分スコア



各点 : $y_i^\top = [y_{i,1},\ y_{i,2}] = [x_i^\top v_1,\ x_i^\top v_2]$

矢印の方向 : $u_j = [v_{1,j}\, v_{2,j}] = e_j^\top [v_1,\ v_2]$.

- CRIM 各町の一人あたりの犯罪率
- ZN 宅地割合
- INDUS 非商用地の割合
- CHAS チャールズ川沿いかどうか
- NOX 一酸化窒素濃度
- RM 住居の平均部屋数
- AGE 1940 年より古くに建てられた住居の割合
- DIS ボストンのビジネス街からの距離
- RAD ハイウェイへのアクセスの良さ
- TAX 固定資産税
- PTRATIO 教師人口の割合
- B アフリカ系アメリカ人の割合を Bk としたときの $1000(Bk - 0.63)^2$
- LSTAT 低所得者層の割合
- MEDV 持ち家価格の中央値

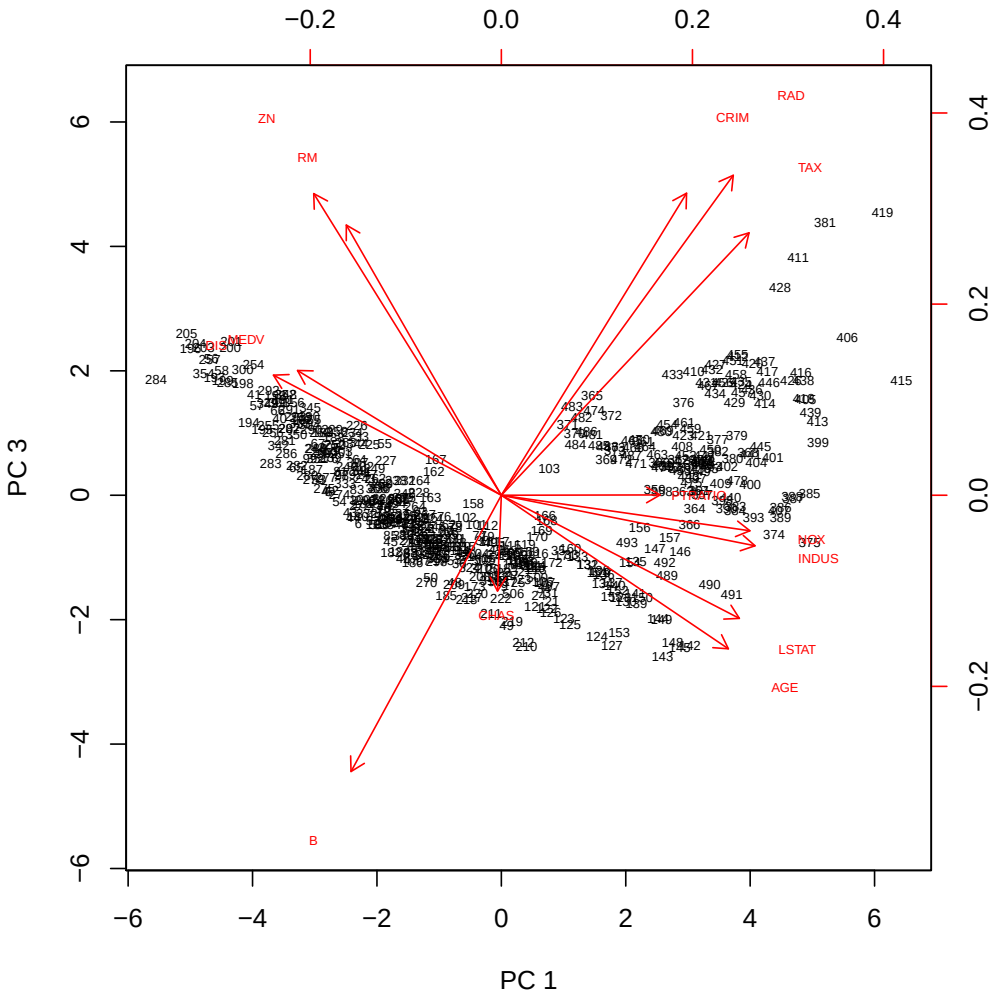
矢印は各変数が主成分の上でどの方向を向いているかを示している.

第一・第二主成分スコアの考察

第一主成分は，TAX や RAD,INDUS が大きく寄与していて，主に住環境に関する情報が乗っていると考えられる．
第一主成分が大きいほど，産業地域のようなあまり居住に適さない住環境．

第二主成分は CHAS や MEDV, RM の寄与が大きく，住宅の質の良さ（「いい家」かどうか）を表している．

第一・第三主成分スコア



$$\text{各点}: y_i^\top = [y_{i,1},\ y_{i,2}] = [x_i^\top v_1,\ x_i^\top v_2]$$

$$\text{矢印の方向}: u_j = [v_{1,j}\, v_{2,j}] = e_j^\top [v_1,\ v_2].$$

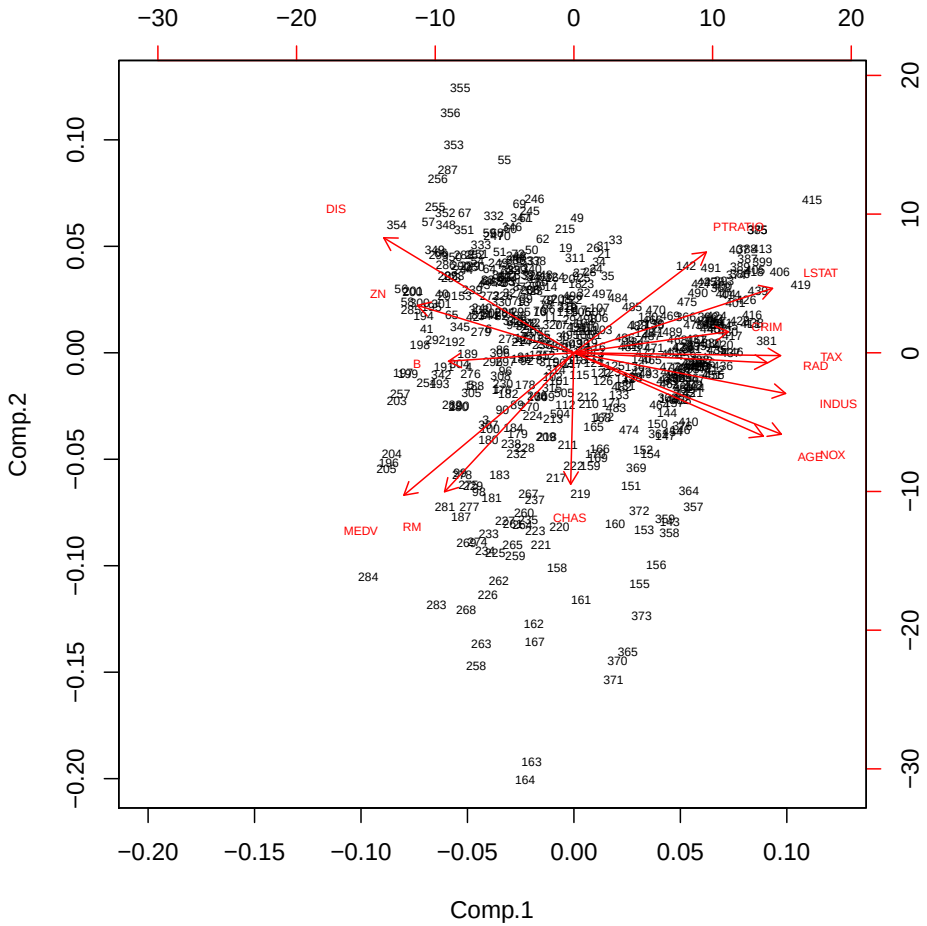
- CRIM 各町の一人あたりの犯罪率
- ZN 宅地割合
- INDUS 非商用地の割合
- CHAS チャールズ川沿いかどうか
- NOX 一酸化窒素濃度
- RM 住居の平均部屋数
- AGE 1940 年より古くに建てられた住居の割合
- DIS ボストンのビジネス街からの距離
- RAD ハイウェイへのアクセスの良さ
- TAX 固定資産税
- PTRATIO 教師人口の割合
- B アフリカ系アメリカ人の割合を Bk としたときの $1000(Bk - 0.63)^2$
- LSTAT 低所得者層の割合
- MEDV 持ち家価格の中央値

矢印は各変数が主成分の上でどの方向を向いているかを示している.

R の関数で主成分分析

princomp で主成分分析，prcomp もほぼ同じ．eigen か svd のどちらを使うかの違い．

```
> PCA <- princomp(x,cor=TRUE)  %相関行列を用いて PCA
> biplot(PCA)
```



さっきと表示が違う... ？

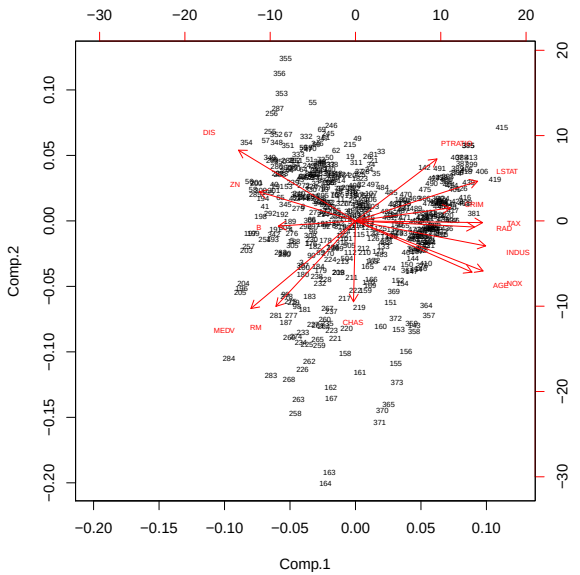
主成分スコアのスケーリング

主成分スコアの分散を基準化：

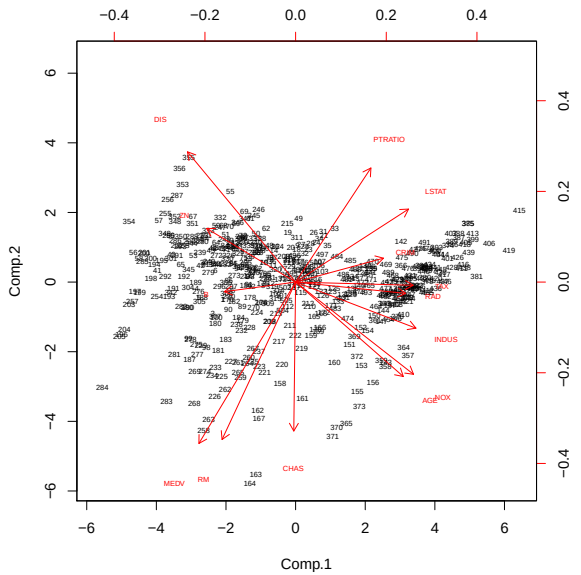
$$z_{i,j} = y_{i,j}/\sqrt{\lambda_j}$$

第 j 主成分スコアの分散:

$$\mathrm{var}(y_{:,j}) = y_{:,j}^\top y_{:,j} = V_{:,j}^\top XX^\top V_{:,j} = \Lambda_{j,j} = \lambda_j.$$



biplot(PCA,scale=1,cex=0.5)



biplot(PCA,scale=0,cex=0.5)

princomp オブジェクトに対しては scale=1 がデフォルト.

画像認識：固有顔

顔画像データから上位２０個の主成分を生成.

http://www.kixor.net/school/2008spring/comp776/assn3/