日程

Prologue: データを読み解くとは何なのか
(多変量解析とデータサイエンスと統計学とパターン認識と機械学習とデータマイニング)

DAY-1 6/16 (01)(02) **単回帰: 点群への直線当てはめを”真剣に”考える**
(見えない世界へようこそ)
DAY-2 6/23 (03)(04) **重回帰と線形代数: 回帰の行列計算とその意味**
(データの計算とデータの解釈)
DAY-3 6/30 (05)(06) **重回帰と確率統計: なぜ回帰に確率が必要?**
(推測統計入門:データの向こう側について語るための代償)
DAY-4 7/07 (07)(08) **多変量正規分布: 多次元の正規分布と線形代数**
(ゼロから理解する正規分布)
DAY-5 7/14 (09)(10) **マハラノビス距離と判別分析: 線形代数を使う1**
(最適な判別とは)
DAY-6 7/28 (11)(12) **固有値分解と主成分分析: 線形代数を使う2**
(高次元データがかかえる大問題)
DAY-7 8/04 (13)(14) **特異値分解と数量化: 線形代数を使う3**
(数値じゃない対象に統計を効かすには)

Epilogue: 基礎の上に在る世界(話したことと話さなかったこと)

今後の日程

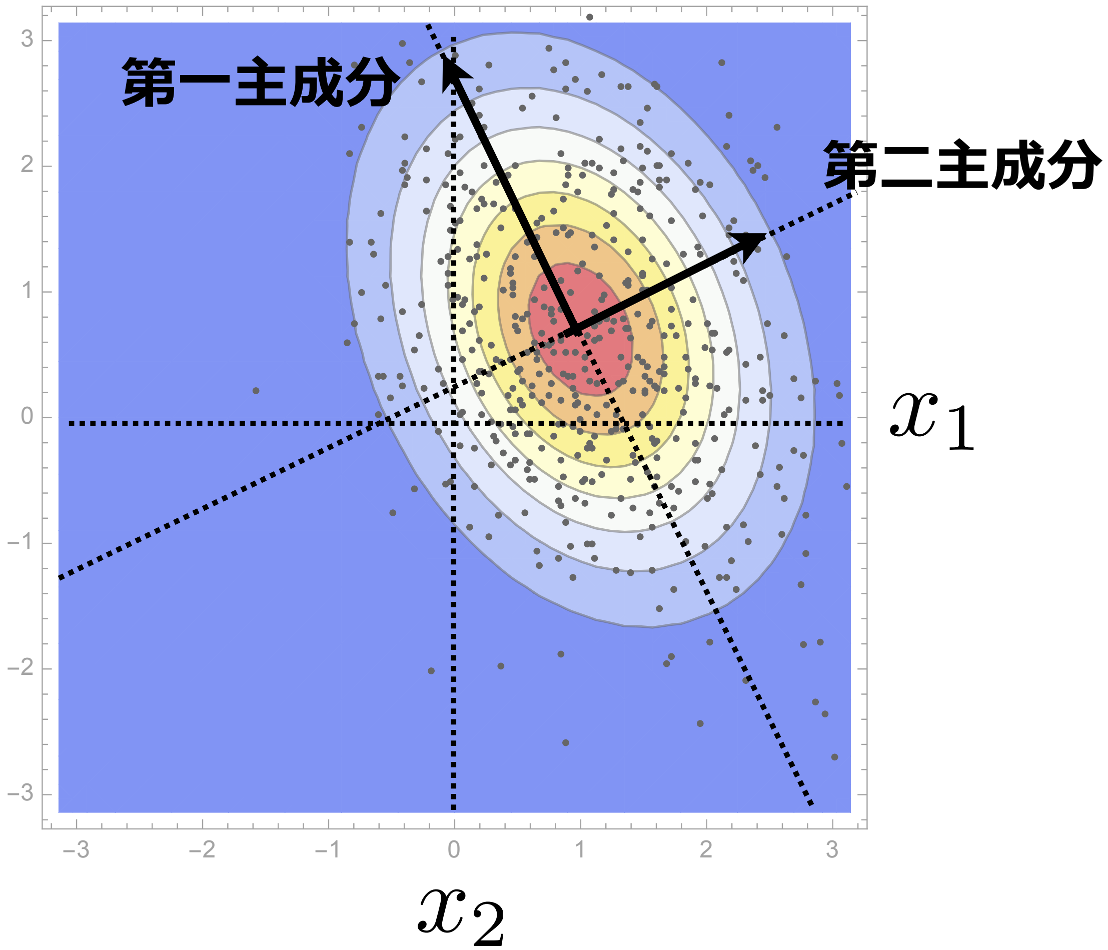
7/28 午前：固有値と２次形式　　午後：主軸変換と主成分分析
8/4　午前：数量化と特異値分解　午後：まとめ・アンケート
重要：本日配布のレポート試験の回答を8/5までに提出

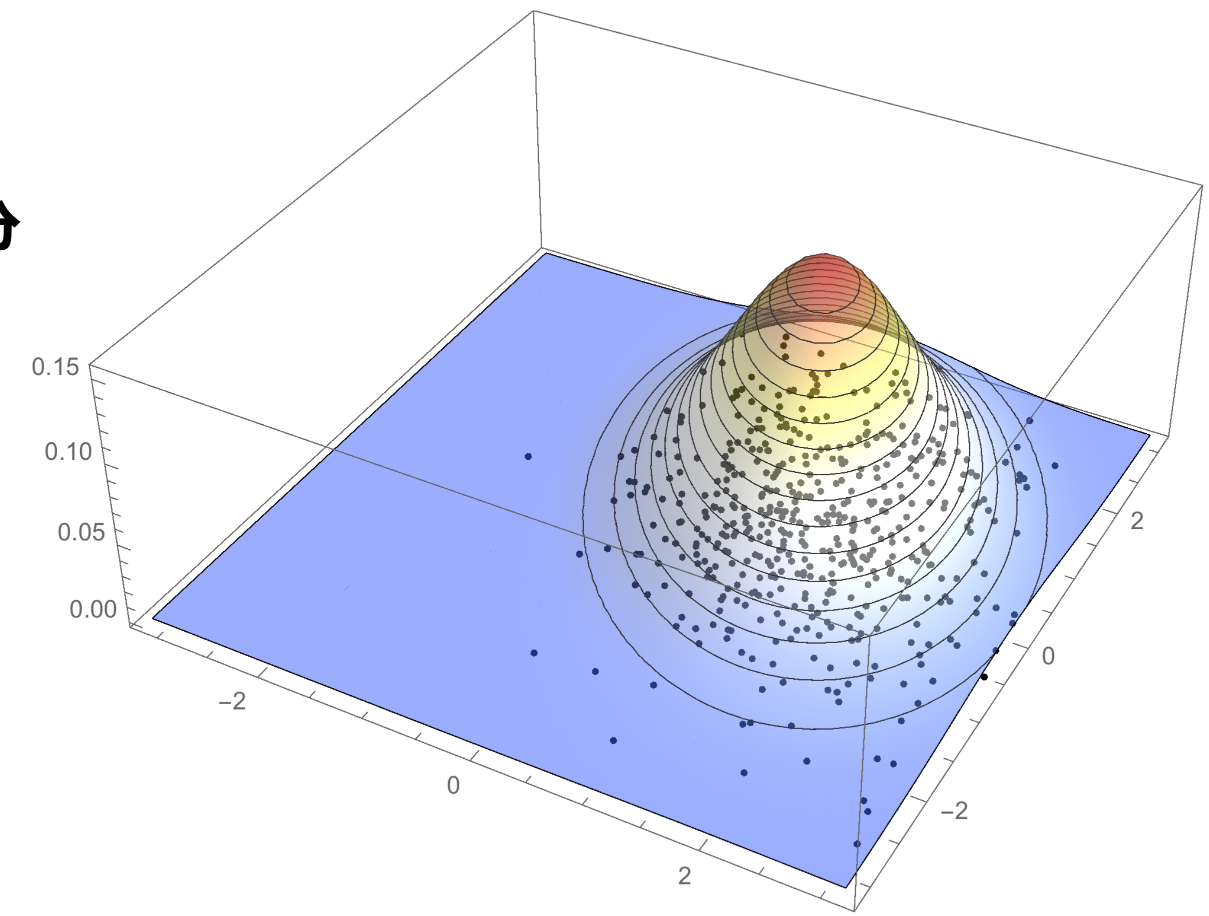
今日の話：主成分分析 (PCA)

[午前]
- 分散共分散行列
- 行列の固有値分解
- ２次形式の標準化

[午後]
- 主軸変換
- 主成分分析
- 主成分負荷量・寄与率・因子負荷量

主成分分析: Principal Component Analysis (PCA)





知りたいこと (教科書 p.6)

- 主成分により低い次元でデータを解釈できないか？
- それぞれの主成分の説明力はどれくらいか？
- 主成分により (x_1, x_2) の特徴付け・分類ができるか？

1.6 主成分分析とは

表 1.7 は，4 教科の試験の成績である．すべて量的変数と考える．

表 1.7　試験の成績のデータ

生徒 No.	国語 x_1	英語 x_2	数学 x_3	理科 x_4
1	86	79	67	68
2	71	75	78	84
3	42	43	39	44
4	62	58	98	95
5	96	97	61	63
6	39	33	45	50
7	50	53	64	72
8	78	66	52	47
9	51	44	76	72
10	89	92	93	91

この（4 次元）データに基づいて知りたいことは次の通りである．

(1) 主成分の構成により低い次元でデータを解釈できないか．

(2) それぞれの主成分の説明力はどれくらいか．

(3) 科目や生徒の特徴付けおよび分類をどのようにできるか．

平均と分散

	単変量	多変量(p変量)
確率変数	$X \in \mathbb{R}$	$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^p$
標本 (n個)	$X_1, X_2, \ldots, X_n$	$\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n$
平均	$\mu = \mathbb{E}\{X\}$	$\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}\{\boldsymbol{X}\}$
標本平均	$\bar{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$	$\bar{\boldsymbol{X}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{X}_i$
分散	$\mathbb{E}\{(X-\mu)^2\}$	$\mathbb{E}\{(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu})'\}$
標本分散	$\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2$	$\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{X}_i-\bar{\boldsymbol{X}})(\boldsymbol{X}_i-\bar{\boldsymbol{X}})'$

分散共分散行列

多変量の分布の"散らばり"具合 (2次の統計量) を司る

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1,x_1} & \sigma_{x_2,x_1} & \cdots & \sigma_{x_p,x_1} \\ \sigma_{x_1,x_2} & \sigma_{x_2,x_2} & \cdots & \sigma_{x_p,x_2} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{x_1,x_p} & \sigma_{x_2,x_p} & \cdots & \sigma_{x_p,x_p} \end{bmatrix}$$

i, j 要素は x_i と x_j の共分散 σ_{x_i,x_j}

$$\sigma_{x_i,x_j} := \mathbb{E}\{(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)\} \qquad \mu_i := \mathbb{E}\{x_i\}$$

→ 対角要素は分散 $\sigma_{x_i,x_i} = \mathbb{E}\{(x_i - \mu_i)^2\} = \sigma_{x_i}^2$

分散共分散行列：ベクトル・行列表記

$$\boldsymbol{X} := \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\mu} := \mathbb{E}\{\boldsymbol{X}\} = \begin{bmatrix} \mathbb{E}\{x_1\} \\ \mathbb{E}\{x_2\} \\ \vdots \\ \mathbb{E}\{x_p\} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{bmatrix}$$ とベクトル表記すれば

$$\Sigma = \mathbb{E}\{(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu})'\} = \mathbb{E}\left\{ \begin{bmatrix} x_1-\mu_1 \\ x_2-\mu_2 \\ \vdots \\ x_p-\mu_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1-\mu_1 & x_2-\mu_2 & \cdots & x_p-\mu_p \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \mathbb{E}\left\{ \begin{bmatrix} (x_1-\mu_1)(x_1-\mu_1) & (x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2) & \cdots & (x_1-\mu_1)(x_p-\mu_p) \\ (x_2-\mu_2)(x_1-\mu_1) & (x_2-\mu_2)(x_2-\mu_2) & \cdots & (x_2-\mu_2)(x_p-\mu_p) \\ \vdots & & & \\ (x_p-\mu_p)(x_1-\mu_1) & (x_p-\mu_p)(x_2-\mu_2) & \cdots & (x_p-\mu_p)(x_p-\mu_p) \end{bmatrix} \right\}$$

標本分散共分散行列

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})' \quad \text{ただし} \ \bar{\boldsymbol{x}} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i$$

単変量の標本分散のときと同じ理屈で不偏推定量になる

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\{\hat{\Sigma}\} &= \frac{1}{n-1}\mathbb{E}\left\{\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})' - 2n(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})' + n(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})'\right\} \\
&= \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left\{(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})'\right\} - n\mathbb{E}\left\{(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})'\right\}\right) \\
&= \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\Sigma - n\frac{1}{n}\Sigma\right) = \Sigma
\end{aligned}$$

重要　　**分散共分散行列Σは、正方、実対称、半正定値な行列**

(従って、全ての固有値≧0で一意な平方根行列を持ち常に直交行列による対角化が可能。半正定値なら対称、対称なら正方だけど)

標本分散共分散行列を計算してみる

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1,x_1} & \sigma_{x_2,x_1} & \cdots & \sigma_{x_p,x_1} \\ \sigma_{x_1,x_2} & \sigma_{x_2,x_2} & \cdots & \sigma_{x_p,x_2} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{x_1,x_p} & \sigma_{x_2,x_p} & \cdots & \sigma_{x_p,x_p} \end{bmatrix}$$

p変量あれば、全対間の共分散を計算すれば良い
(自分自身との共分散(対角成分)は定義から普通の分散)

$$\hat{\sigma}_{x_p,x_q} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_p(i) - \bar{x}_p)(x_q(i) - \bar{x}_q)$$

	目的変数	説明変数			
	Y	X_1	X_2	X_3	X_4
番号	新生児の体重	母親の体重(kg)	母親の年齢	懐妊期間(日)	喫煙習慣の有無 (有ならば1,無ならば0)
1	3087	48	28	304	0
2	3229	52	24	286	1
3	3204	61	33	273	1
4	3346	58	30	295	0
5	3579	56	21	290	0
6	2325	46	26	262	0
7	3159	55	30	318	1
8	3589	63	37	298	0
9	2969	52	25	299	1
10	2819	40	22	313	0
11	3191	59	34	285	1
12	3346	57	28	306	0
13	2444	45	30	291	1
14	3662	64	21	274	0
15	3241	53	29	283	0

$p(p-1)/2$ 個の共分散と p 個の分散の計算

$\Sigma =$

cov(x1,x1)	cov(x1,x2)	cov(x1,x3)	cov(x1,x4)
	cov(x2,x2)	cov(x2,x3)	cov(x2,x4)
		cov(x3,x3)	cov(x3,x4)
			cov(x4,x4)

Table 1-1

$=$

47.924	11.919	-23.443	0.029
11.919	22.695	2.900	0.629
-23.443	2.900	236.171	0.086
0.029	0.629	0.086	0.257

X_2	X_3
母親の年齢	懐妊期間(日)
28	304
24	286
33	273
30	295
21	290
26	262
30	318
37	298
25	299
22	313
34	285
28	306
30	291
21	274
29	283

例)

$$\bar{X}_2 = 27.86667$$

$$\bar{X}_3 = 291.8$$

$$\mathrm{cov}(X_2, X_3)$$

$$= \frac{1}{15-1}\sum_{i=1}^{15}(X_2(i) - \bar{X}_2)(X_3(i) - \bar{X}_3)$$

$$= 40.6/14 = 2.9$$

Rで験算

```
> x2 <- c(28, 24, 33, 30, 21, 26, 30, 37, 25, 22, 34, 28, 30, 21, 29)
> x3 <- c(304, 286, 273, 295, 290, 262, 318, 298, 299, 313, 285, 306, 291, 274, 283)
> cov(x2,x3)
[1] 2.9
> sum((x2-mean(x2))*(x3-mean(x3)))/14
[1] 2.9
```

分散共分散行列の固有値分解 (スペクトル分解)

$$\Sigma \quad = \quad P \quad \Lambda \quad P'$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{x_1,x_1} & \sigma_{x_2,x_1} & \cdots & \sigma_{x_p,x_1} \\ \sigma_{x_1,x_2} & \sigma_{x_2,x_2} & \cdots & \sigma_{x_p,x_2} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{x_1,x_p} & \sigma_{x_2,x_p} & \cdots & \sigma_{x_p,x_p} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1p} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{p1} & p_{p2} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix}}_{\text{固有ベクトル}} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_p \end{bmatrix}}_{\text{固有値}} \underbrace{\begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \cdots & p_{p1} \\ p_{12} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{1p} & p_{2p} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix}}_{\text{固有ベクトル(転置)}}$$

$$= \lambda_1 \begin{bmatrix} p_{11} \\ p_{21} \\ \vdots \\ p_{p1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \cdots & p_{p1} \end{bmatrix} + \lambda_2 \begin{bmatrix} p_{12} \\ p_{22} \\ \vdots \\ p_{p2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{12} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \end{bmatrix} + \cdots + \lambda_p \begin{bmatrix} p_{1p} \\ p_{2p} \\ \vdots \\ p_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{1p} & p_{2p} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix}$$

- **対称行列**なので固有ベクトルは直交する
- **正定値行列**なので正定値な平方根行列が唯一存在

分散共分散行列の平方根行列

$$\Sigma^{\frac{1}{2}} = P \qquad \Lambda^{\frac{1}{2}} \qquad P'$$

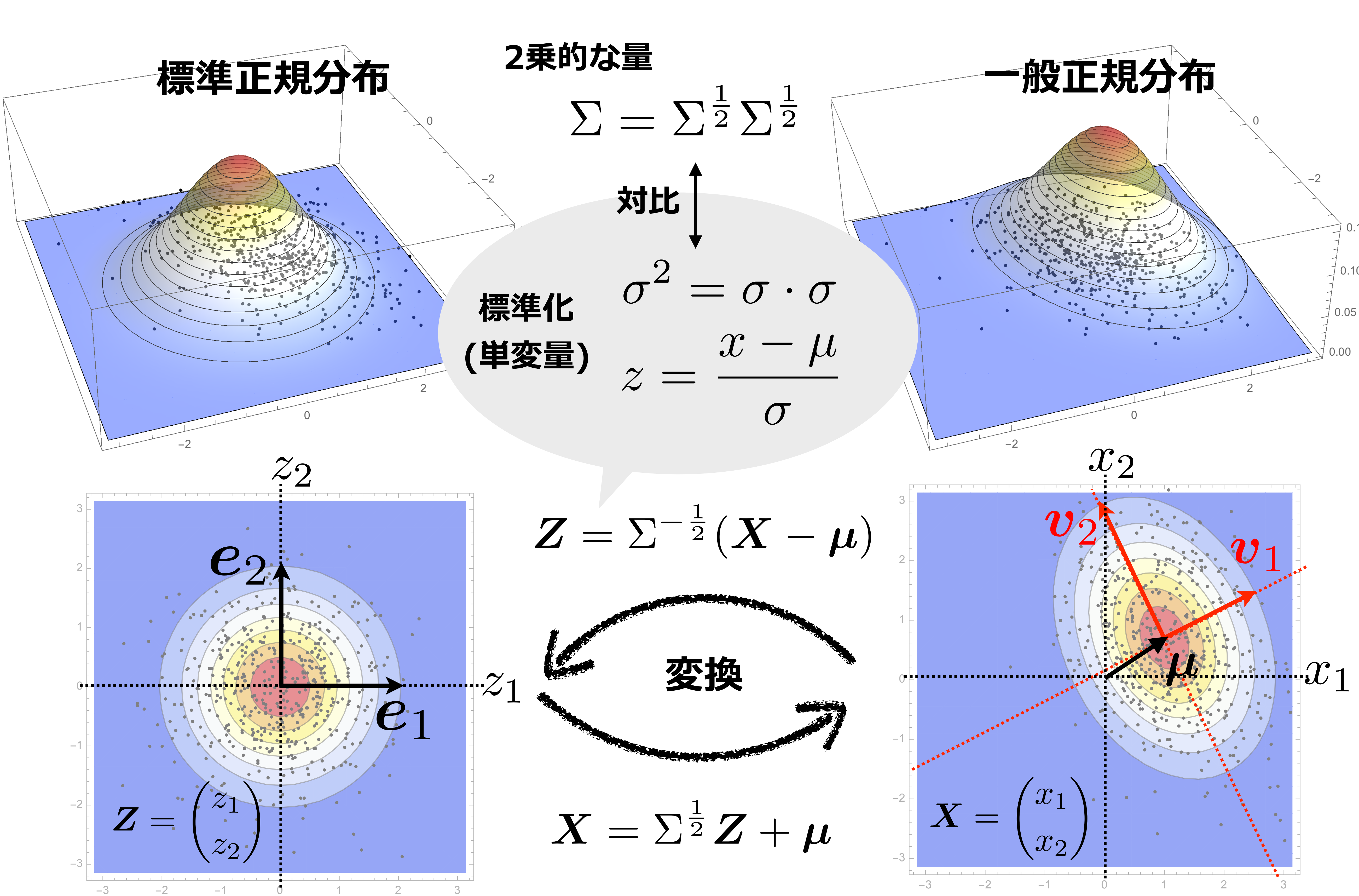
$$\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & & & \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1p} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{p1} & p_{p2} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \cdots & p_{p1} \\ p_{12} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{1p} & p_{2p} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix}$$

- 二乗したらΣ

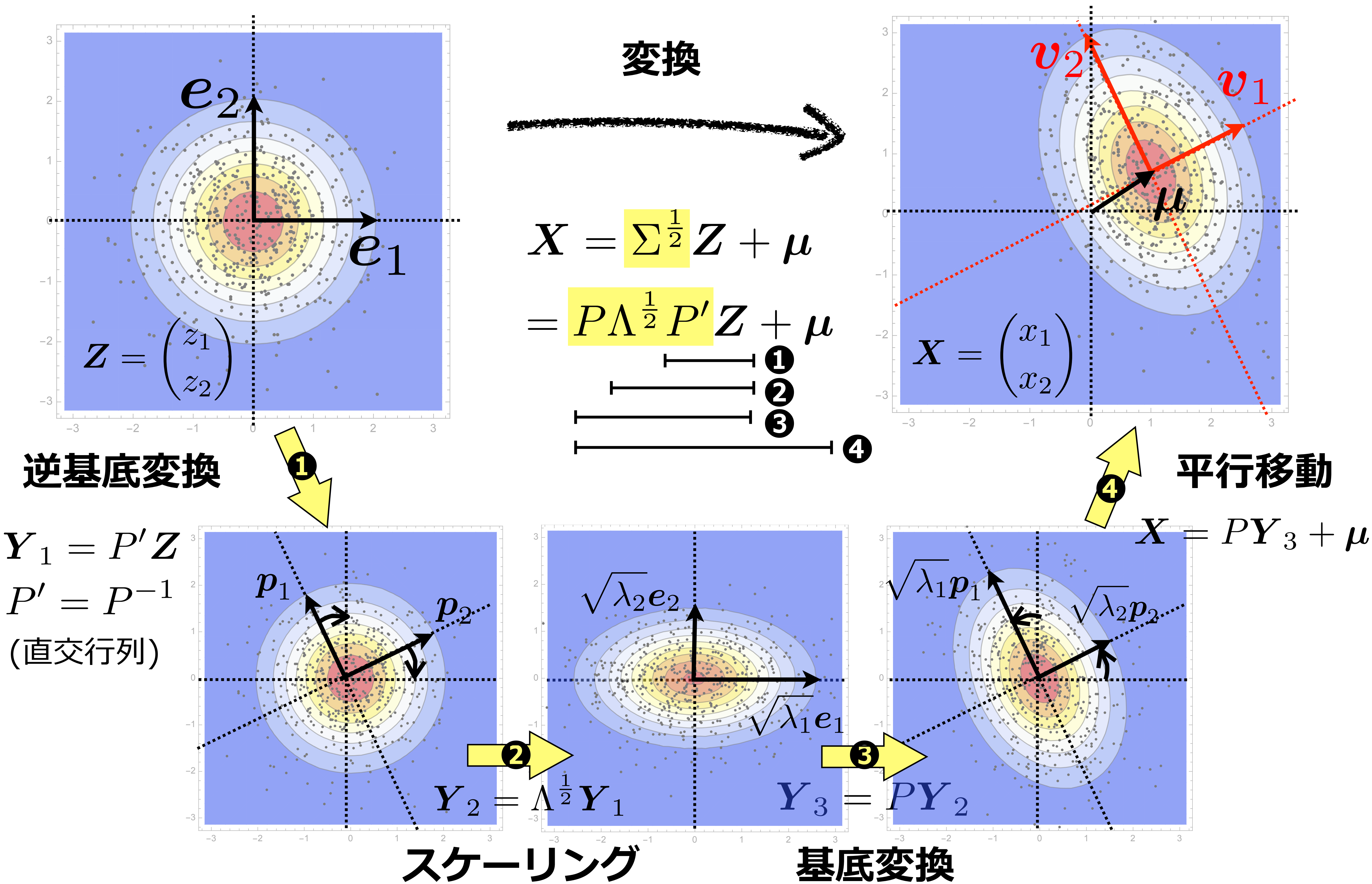
$$\Sigma^{1/2}\Sigma^{1/2} = P\Lambda^{1/2}P'P\Lambda^{1/2}P' = P\Lambda^{1/2}\Lambda^{1/2}P' = \Sigma$$

- 固有ベクトルはΣと同じ
- 正定値行列

基底の変換〜分散共分散行列〜正規分布



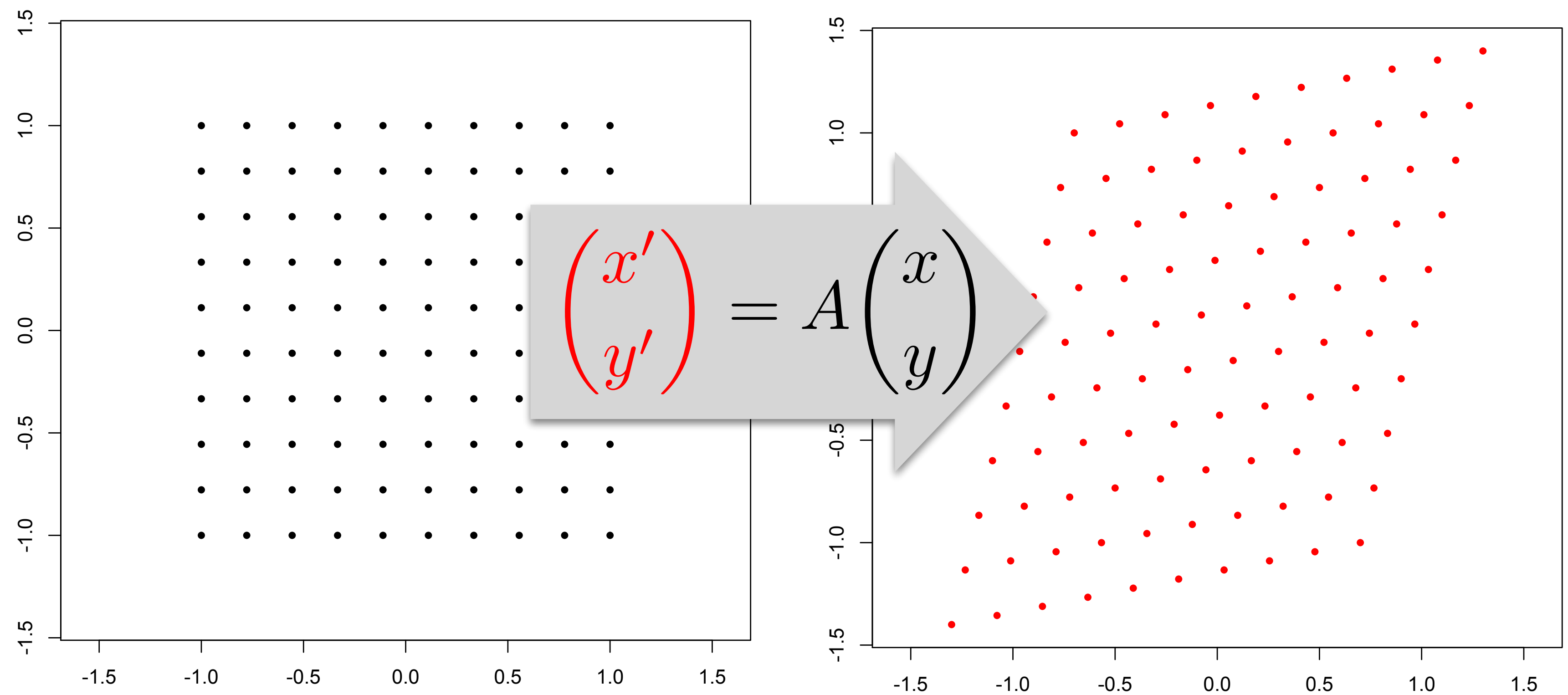
基底変換と固有値・固有ベクトル



固有値と固有ベクトル

$$A = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.2 & 1.2 \end{bmatrix}$$

点がAによる線形写像で
どこへ移るか観察



$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

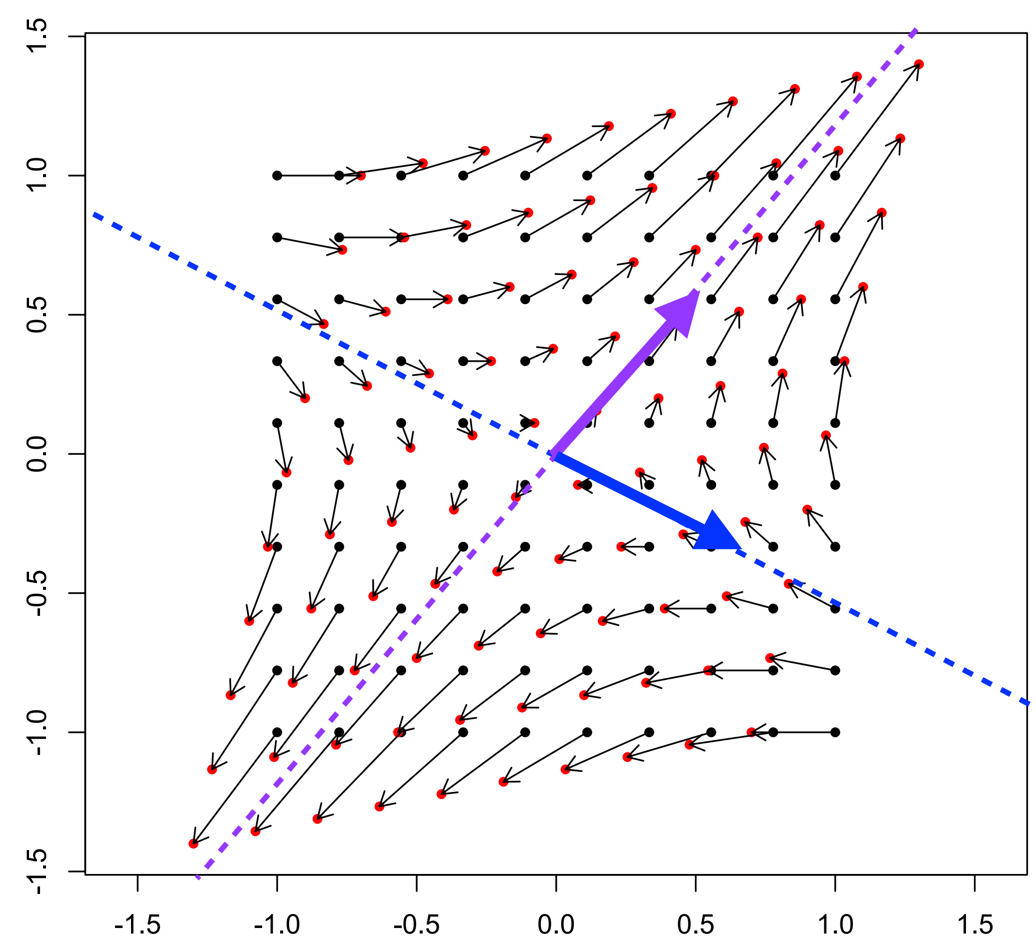
$$A \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

$$A \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

固有ベクトル v

Aをvにかける
= vを定数倍する

(倍率が固有値)



さっきのを並べて行列形に

$$A\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

$$A\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

$$A\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 u_1 \\ \lambda_1 v_2 & \lambda_2 u_2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

同じことのバリエーション

対角化

$$\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}^{-1} A \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

固有値分解

$$A = \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}^{-1}$$

ベクトルを列にならべた行列をかける意味

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}$$

固有ベクトルのように
これらが直交する場合

$$\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \\ u_1 & u_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}^{-1}$$

直交行列では「転置行列 = 逆行列」

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

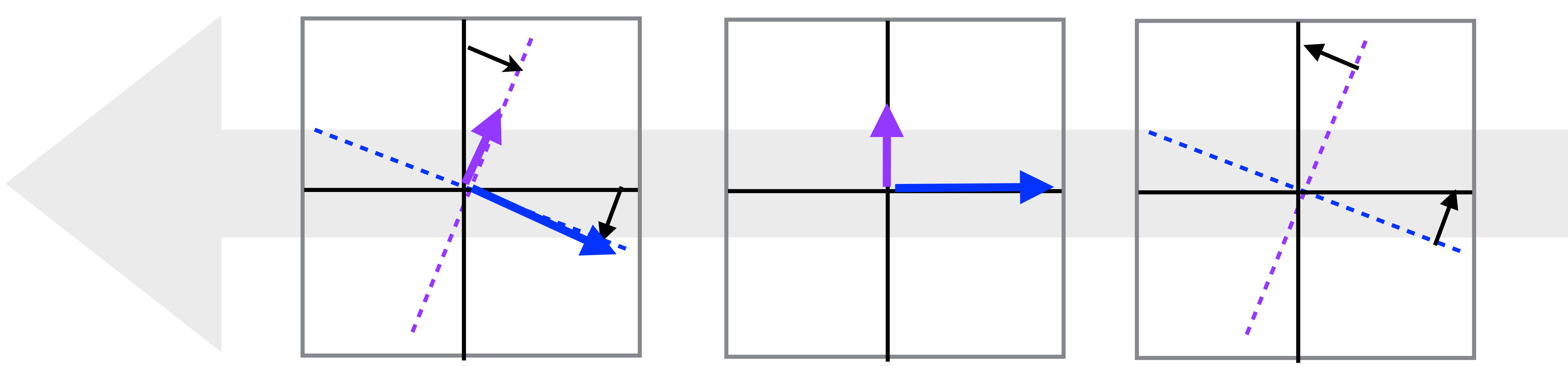
対称行列なら固有ベクトルは
直交するので固有値分解は…

$$A = \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}'$$

(対称行列の)固有値分解の直感的解釈

$$A\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}}_{\text{基底変換}} \underbrace{\begin{bmatrix} \color{red}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \color{purple}{\lambda_2} \end{bmatrix}}_{\text{倍率}} \underbrace{\begin{bmatrix} v_1 & u_1 \\ v_2 & u_2 \end{bmatrix}'}_{\text{逆基底変換}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \qquad\qquad \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



固有値分解 Eigendecomposition
(Eigen Value Decomposition = EVD とも)

$$\Sigma = P \quad \Lambda \quad P'$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{x_1,x_1} & \sigma_{x_2,x_1} & \cdots & \sigma_{x_p,x_1} \\ \sigma_{x_1,x_2} & \sigma_{x_2,x_2} & \cdots & \sigma_{x_p,x_2} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{x_1,x_p} & \sigma_{x_2,x_p} & \cdots & \sigma_{x_p,x_p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1p} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{p1} & p_{p2} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \cdots & p_{p1} \\ p_{12} & p_{22} & \cdots & p_{p2} \\ \vdots & & & \\ p_{1p} & p_{2p} & \cdots & p_{pp} \end{bmatrix}$$

固有ベクトル　　固有値　　固有ベクトル(転置)

$$\uparrow$$

$$P^{-1}$$

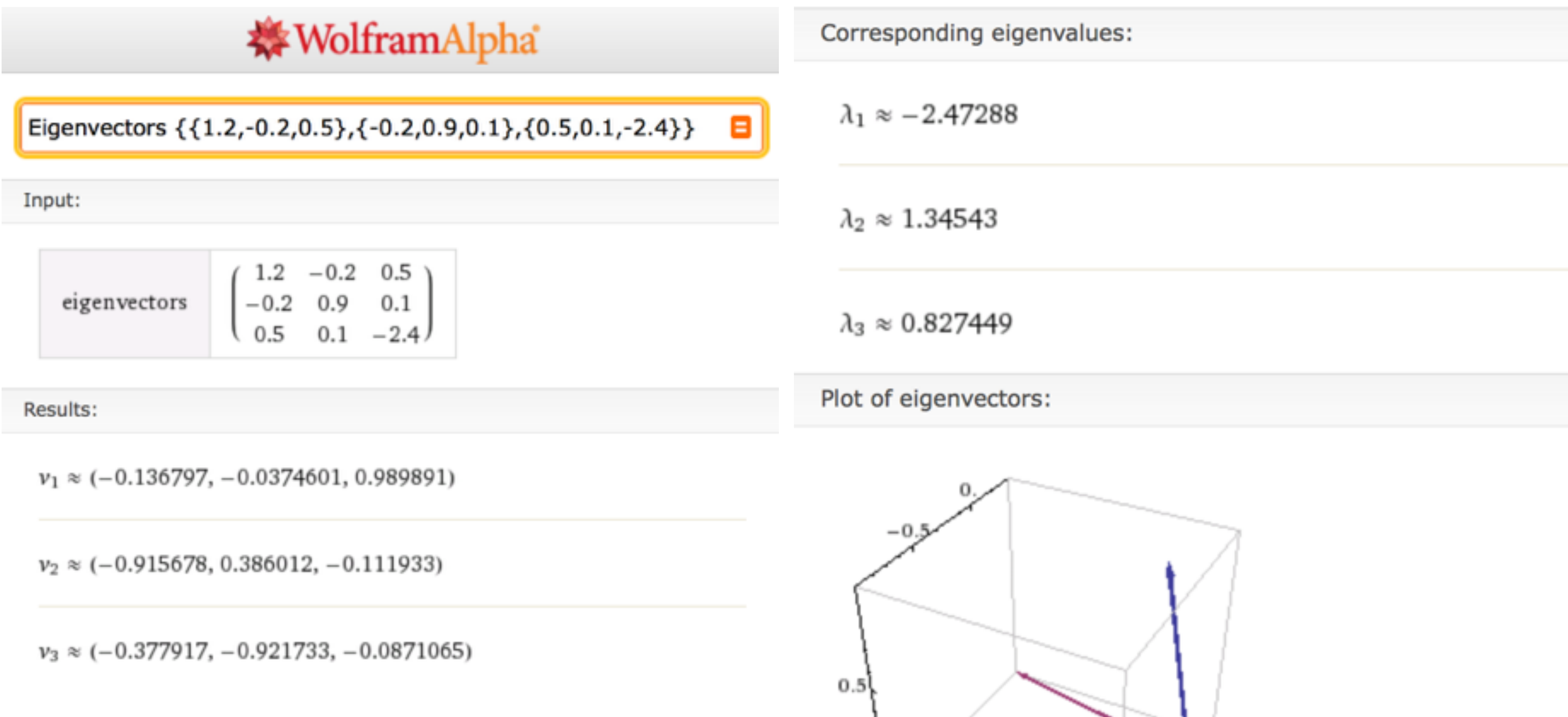
(非対称行列の場合)

例

列ベクトルが正規直交

$$A = \begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -0.137 & -0.916 & -0.378 \\ -0.0375 & 0.386 & -0.922 \\ 0.99 & -0.112 & -0.0871 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2.47 & 0. & 0. \\ 0. & 1.35 & 0. \\ 0. & 0. & 0.827 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.137 & -0.0375 & 0.99 \\ -0.916 & 0.386 & -0.112 \\ -0.378 & -0.922 & -0.0871 \end{pmatrix}$$



行列分解 (Matrix Decomposition)
行列因子分解 (Matrix Factorization)

$$A = \boxed{\begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}}$$

固有値分解

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} -0.137 & -0.916 & -0.378 \\ -0.0375 & 0.386 & -0.922 \\ 0.99 & -0.112 & -0.0871 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2.47 & 0. & 0. \\ 0. & 1.35 & 0. \\ 0. & 0. & 0.827 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.137 & -0.0375 & 0.99 \\ -0.916 & 0.386 & -0.112 \\ -0.378 & -0.922 & -0.0871 \end{pmatrix}$$

特異値分解

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} -0.137 & -0.916 & 0.378 \\ -0.0375 & 0.386 & 0.922 \\ 0.99 & -0.112 & 0.0871 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.47 & 0. & 0. \\ 0. & 1.35 & 0. \\ 0. & 0. & 0.827 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.137 & 0.0375 & -0.99 \\ -0.916 & 0.386 & -0.112 \\ 0.378 & 0.922 & 0.0871 \end{pmatrix}$$

LU分解

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.167 & 1 & 0 \\ 0.417 & 0.212 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ 0 & 0.867 & 0.183 \\ 0 & 0 & -2.65 \end{pmatrix}$$

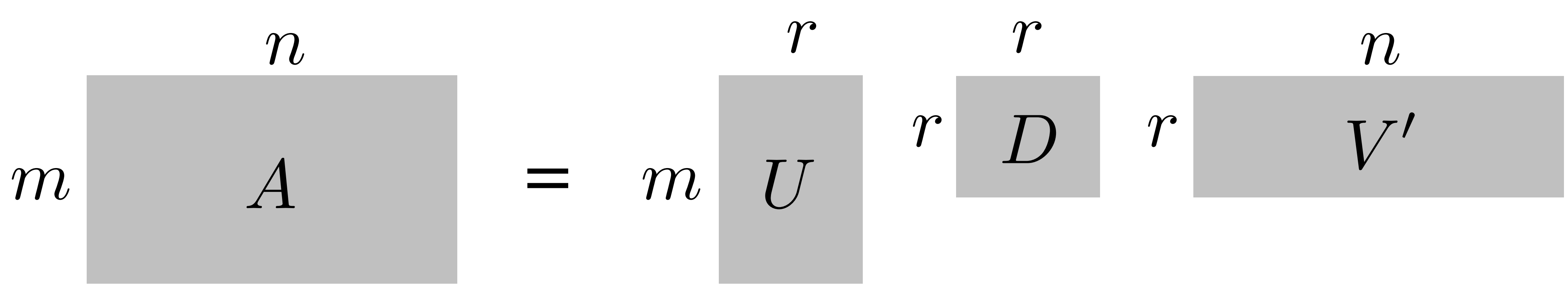
QR分解

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1.2 & -0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.9 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & -2.4 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} -0.912 & -0.0641 & -0.404 \\ 0.152 & -0.97 & -0.189 \\ -0.38 & -0.234 & 0.895 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1.32 & 0.281 & 0.471 \\ 0. & -0.884 & 0.433 \\ 0. & 0. & -2.37 \end{pmatrix}$$

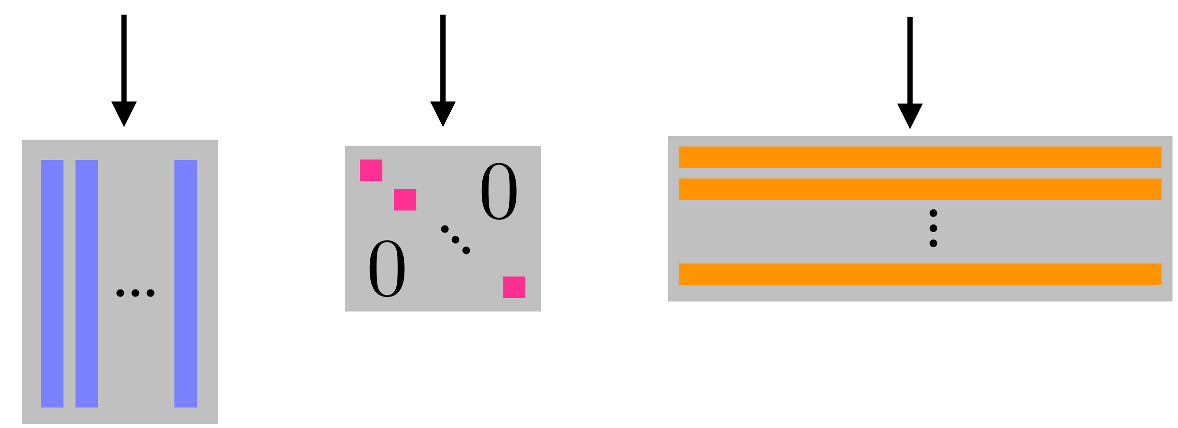
特異値分解 (SVD, Singular Value Decomposition)

任意の行列 A は積形 U D V’ に分解できる。

(固有値分解は対角化可能な行列のみ可能)



$$\mathrm{rank}(A) = r$$



U, V: 直交行列

つまり、列ベクトルは正規直交

$$U'U = V'V = I$$

D: 対角行列 (全成分は正)

相関係数: 標準化変数の共分散

共分散 $\sigma_{x_i,x_j} := \mathbb{E}\{(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)\}$

相関係数
$$r_{i,j} := \mathbb{E}\left\{\left(\frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i}\right) \cdot \left(\frac{x_j - \mu_j}{\sigma_j}\right)\right\}$$
$$= \mathbb{E}\{z_i \cdot z_j\}$$

標準化 (平均0,分散1の確率変数に変換)

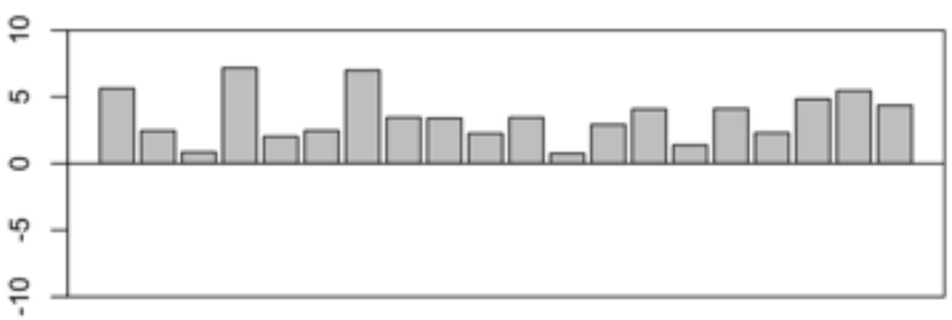
$$z_i = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i} \Rightarrow \begin{array}{l} \mathbb{E}\{z_i\} = 0 \\ \mathrm{var}\{z_i\} = \mathbb{E}\{(z_i - 0)^2\} = 1 \end{array}$$

相関係数の直感的イメージ

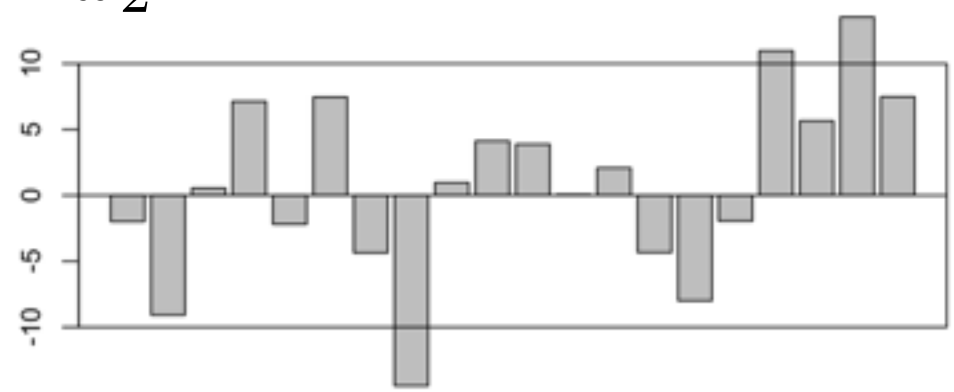
相関係数 $$r_{i,j} := \mathbb{E}\left\{\left(\frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i}\right) \cdot \left(\frac{x_j - \mu_j}{\sigma_j}\right)\right\}$$

$$= \mathbb{E}\{z_i \cdot z_j\}$$

x_1

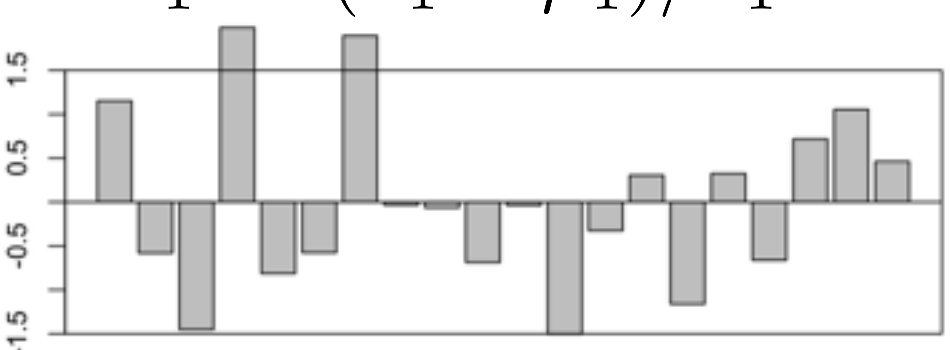


x_2

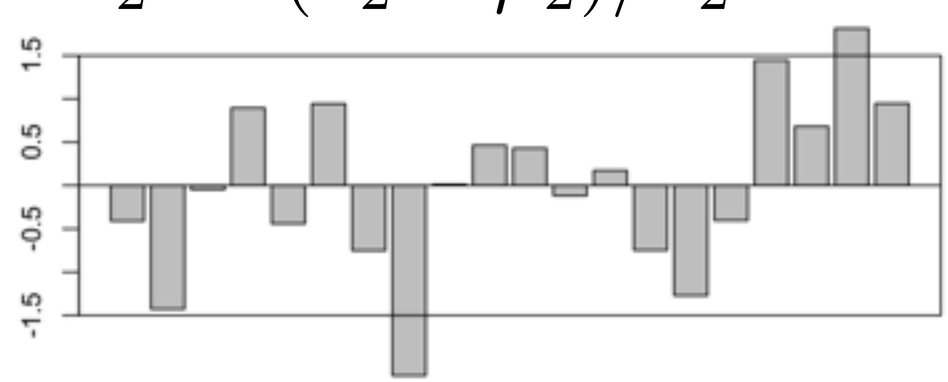


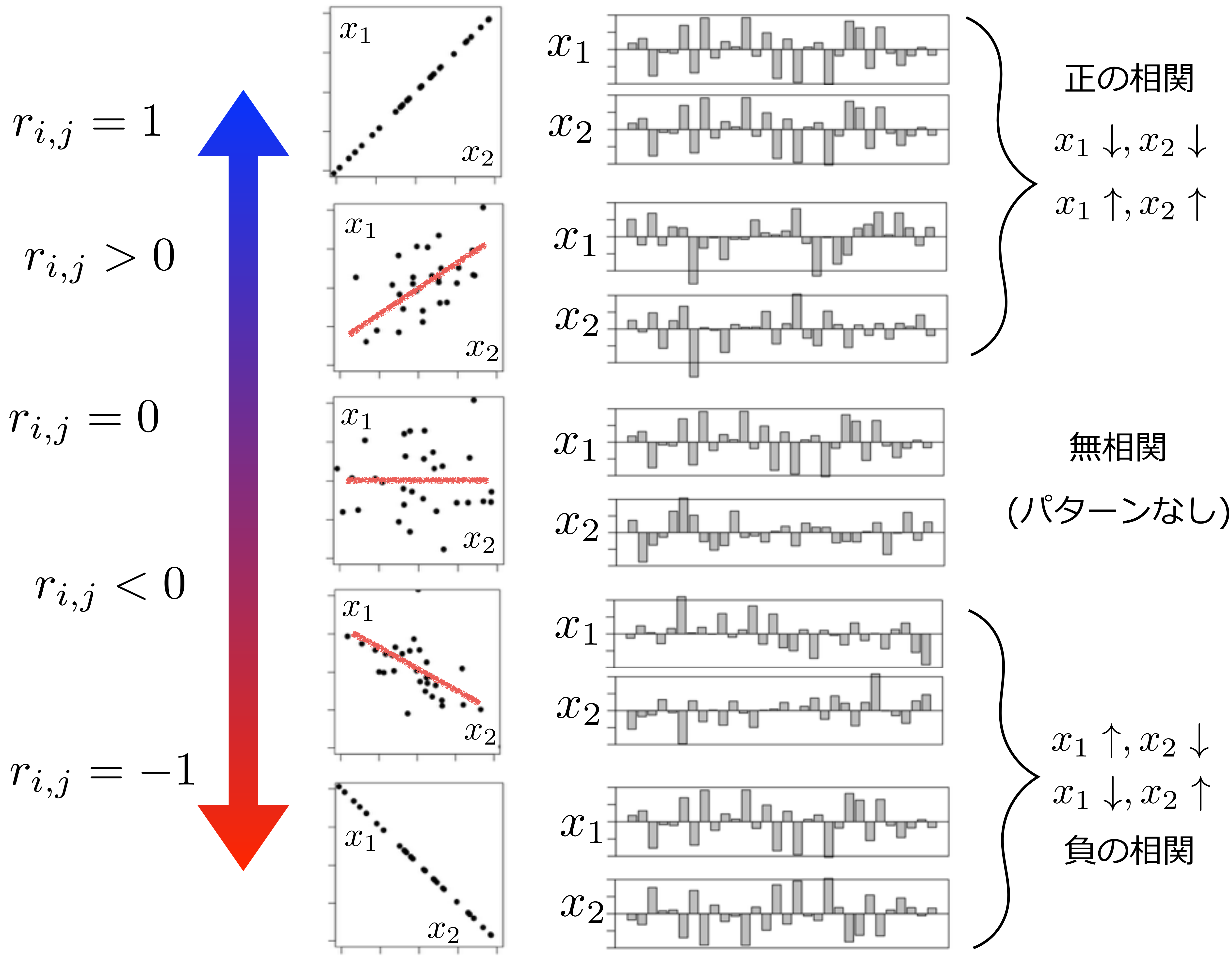
標準化 分布の真ん中(平均)とブレ幅(分散)を整えた後の変動の類似

$z_1 := (x_1 - \mu_1)/\sigma_1$



$z_2 := (x_2 - \mu_2)/\sigma_2$




$r_{i,j} = 1$
$r_{i,j} > 0$
$r_{i,j} = 0$
$r_{i,j} < 0$
$r_{i,j} = -1$
x_1
x_2
正の相関
$x_1 \downarrow, x_2 \downarrow$
$x_1 \uparrow, x_2 \uparrow$
無相関
(パターンなし)
$x_1 \uparrow, x_2 \downarrow$
$x_1 \downarrow, x_2 \uparrow$
負の相関

相関行列との関係：ベクトル・行列表記

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_{x_1,x_1} & \sigma_{x_2,x_1} & \cdots & \sigma_{x_p,x_1} \\ \sigma_{x_1,x_2} & \sigma_{x_2,x_2} & \cdots & \sigma_{x_p,x_2} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{x_1,x_p} & \sigma_{x_2,x_p} & \cdots & \sigma_{x_p,x_p} \end{bmatrix}}_{\Sigma} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_{x_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{x_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{x_p} \end{bmatrix}}_{D} \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\sigma_{x_1,x_1}}{\sigma_{x_1}\sigma_{x_1}} & \frac{\sigma_{x_2,x_1}}{\sigma_{x_2}\sigma_{x_1}} & \cdots & \frac{\sigma_{x_p,x_1}}{\sigma_{x_p}\sigma_{x_1}} \\ \frac{\sigma_{x_1,x_2}}{\sigma_{x_1}\sigma_{x_2}} & \frac{\sigma_{x_2,x_2}}{\sigma_{x_2}\sigma_{x_2}} & \cdots & \frac{\sigma_{x_p,x_2}}{\sigma_{x_p}\sigma_{x_2}} \\ \vdots & & & \\ \frac{\sigma_{x_1,x_p}}{\sigma_{x_1}\sigma_{x_p}} & \frac{\sigma_{x_2,x_p}}{\sigma_{x_2}\sigma_{x_p}} & \cdots & \frac{\sigma_{x_p,x_p}}{\sigma_{x_p}\sigma_{x_p}} \end{bmatrix}}_{R} \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_{x_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{x_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{x_p} \end{bmatrix}}_{D}$$

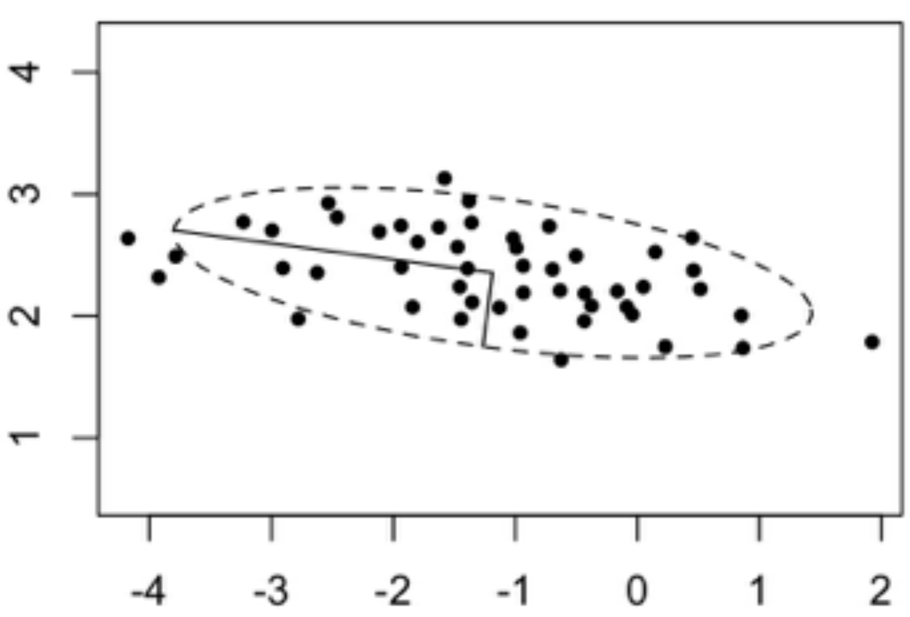
分散共分散行列　　　　**相関行列**

$$R = P\Lambda P' \quad \text{(固有値分解)}$$

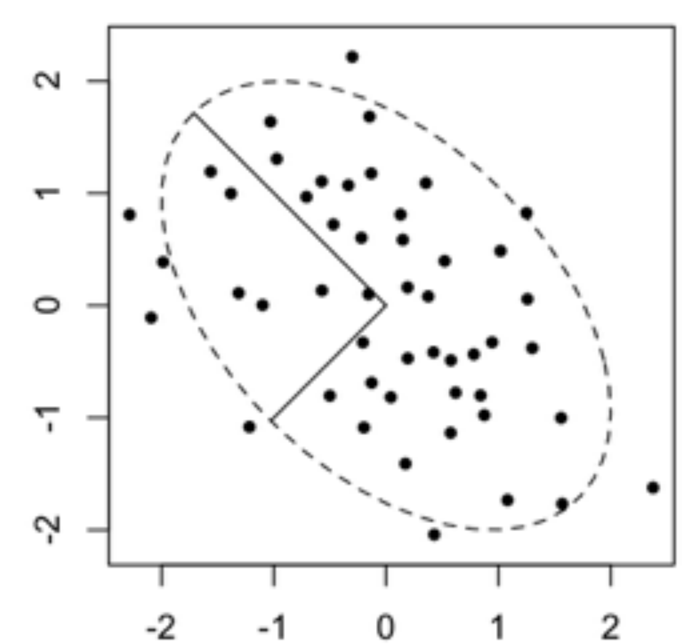
$$\Sigma = DP\Lambda P'D' = (DP)\Lambda(DP)'$$

固有構造は変化する

$$(DP)(DP)' \neq I$$



各々の変数を標準化
(× 多変量の標準化)



分散共分散行列と正規分布・マハラノビス距離

多変量正規分布

$N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$

$$\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n\sqrt{\det(\boldsymbol{\Sigma})}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

$N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Sigma})$

$$\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n\sqrt{\det(\boldsymbol{\Sigma})}}\exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{x}\right)$$

二次形式

$$\boldsymbol{x}'A\boldsymbol{x}$$

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) = \|\Sigma^{-1/2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\|^2$$

マハラノビス距離

確率変数xの法則性は「分散共分散行列」の「二次形式」で規定されている！

二次形式

変数の２次の項のみからなる式を二次形式と呼ぶ。

$$
\begin{aligned}
f = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \cdots + a_{nn}x_n^2 + \\
2a_{11}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + \cdots + 2a_{n(n-1)}x_nx_{n-1}
\end{aligned}
$$

$$
= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j
$$

(ただし $a_{ij} = a_{ji}$ であるとする)

二次形式のベクトル・行列表示

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$ とすると

$$f = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

$a_{ij} = a_{ji}$ のときは A が対称行列になる

ミニレポート問題

1) ベクトルと行列を展開して次の２次形式を多項式で表せ。

$$f = \begin{bmatrix} x & y & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & F & E \\ F & B & D \\ E & D & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

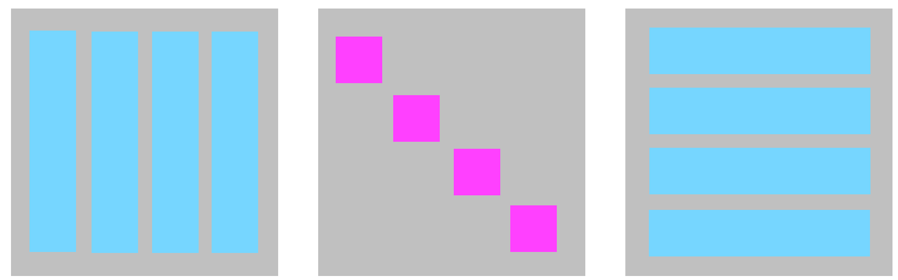
2) 次の２次形式をベクトルと対称行列とで表せ。

$$f = x^2 + 4xy + 5y^2 - 2yz + 2z^2$$

固有ベクトルが張る正規直交系

固有値分解

$$A = $$



U 　　Λ 　　U'

固有ベクトルの正規直交系　　固有値

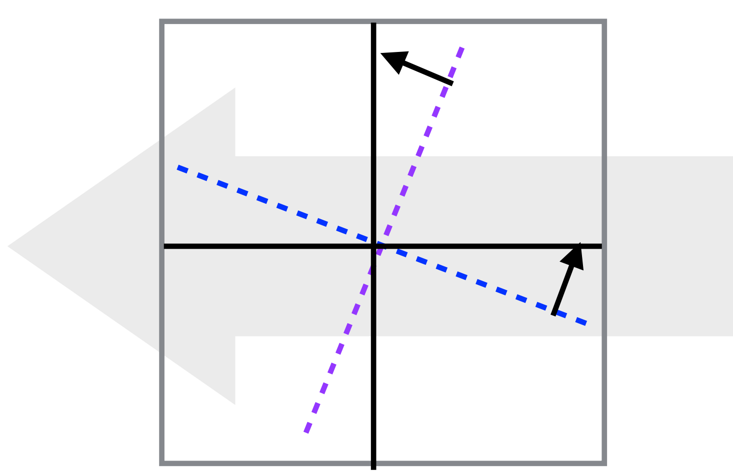
対称行列 : $A = A'$

直交行列 : $U'U = I$

$$z = U'x$$

直交行列による変換(直交変換)はベクトルの大きさを変えない

→ 直交変換 = 回転と鏡映

z  x

$$\|z\|^2 = z'z = (U'x)'(U'x)$$
$$= x'UU'x = x'x = \|x\|^2$$

二次形式の標準形

$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{U}'\boldsymbol{x}$ を用いると、二次形式 $x'Ax$ が次のような「標準形」になる。

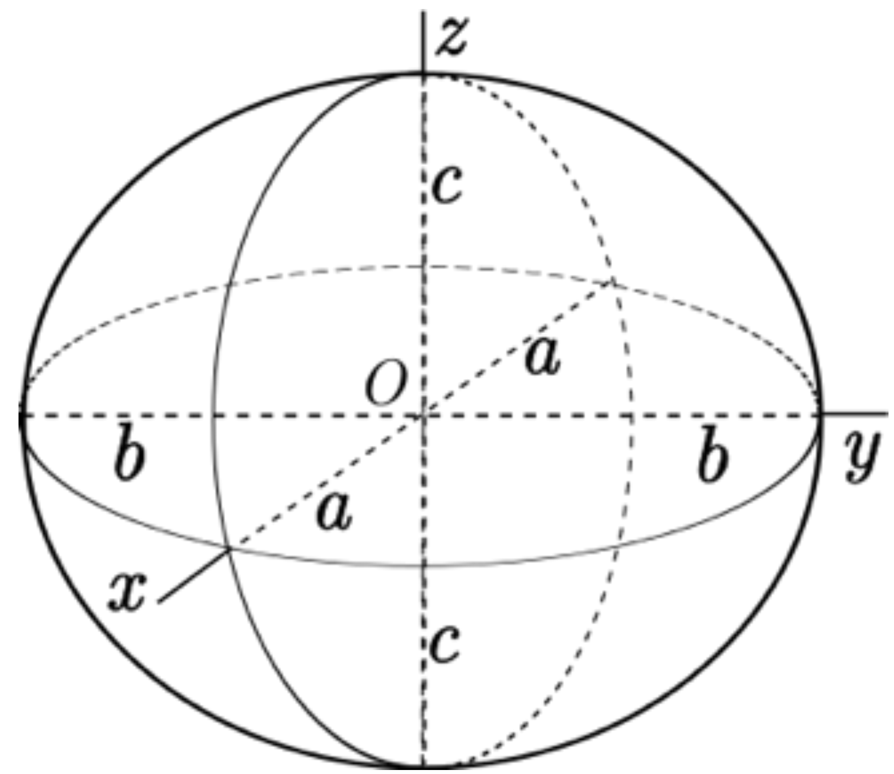
$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{z})'\boldsymbol{A}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{z}'\boldsymbol{U}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}'\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{z}$$
$$= \lambda_1 z_1^2 + \lambda_2 z_2^2 + \ldots \lambda_n z_n^2$$

この二次形式の等位面は「楕円体」であり、各軸の半径は $1/\sqrt{\lambda_i}$ である。「直交変換 = 回転と鏡映」なので

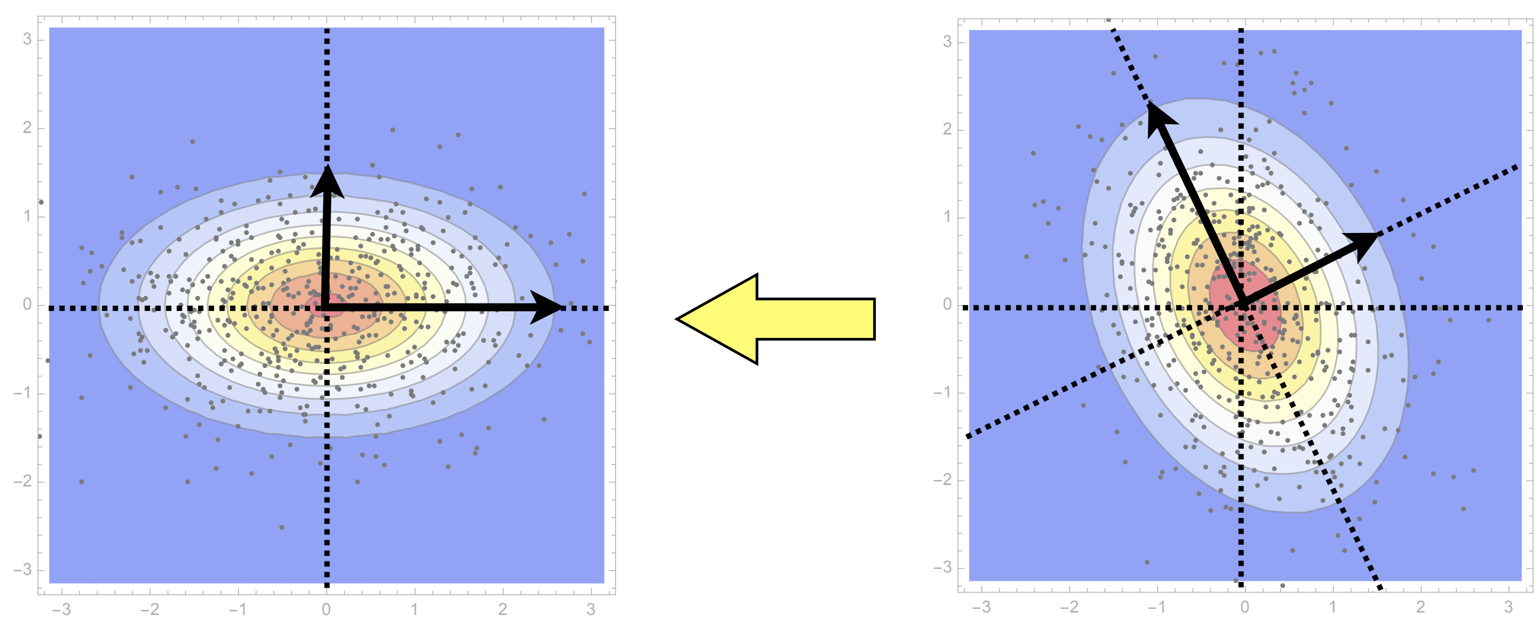
楕円体 $x'Ax = 1$ は主軸方向が A の固有ベクトル

楕円体(Ellipsoid)の式

$$\frac{1}{a^2}x_1^2 + \frac{1}{b^2}x_2^2 + \frac{1}{c^2}x_3^2 = 1$$



「直交変換 = 回転と鏡映」なので、
標準形がやっていることは長軸短軸を
座標軸方向にそろえること



固有ベクトルを座標軸
にとった座標系で表す

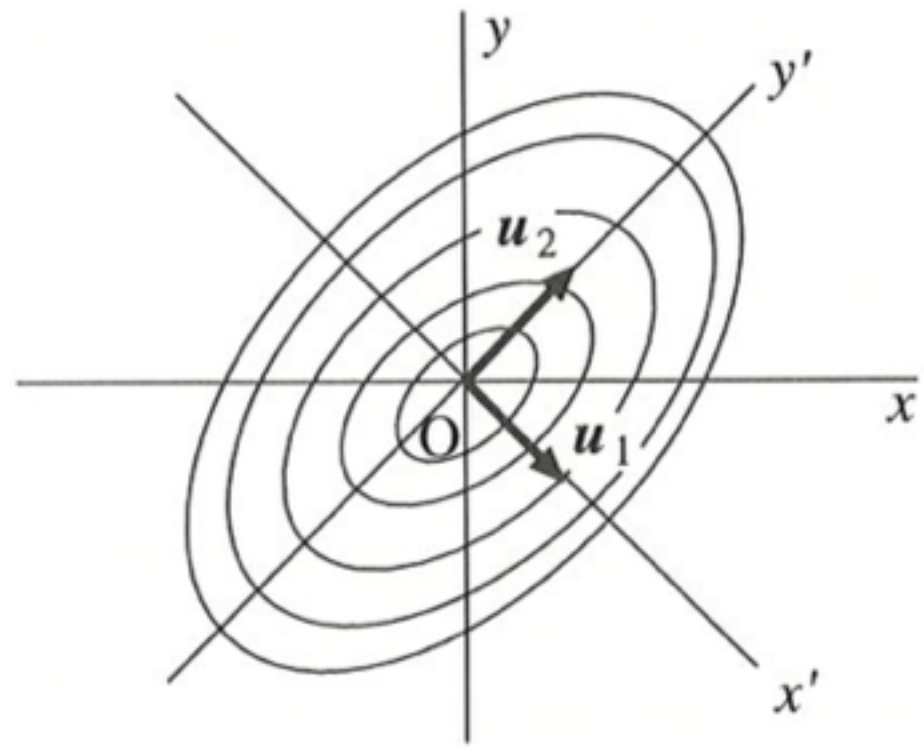


図 5.4　原点から 1 だけ進んで f を最大にするには等高線の短軸方向に，最小にするには長軸方向に進めばよい．

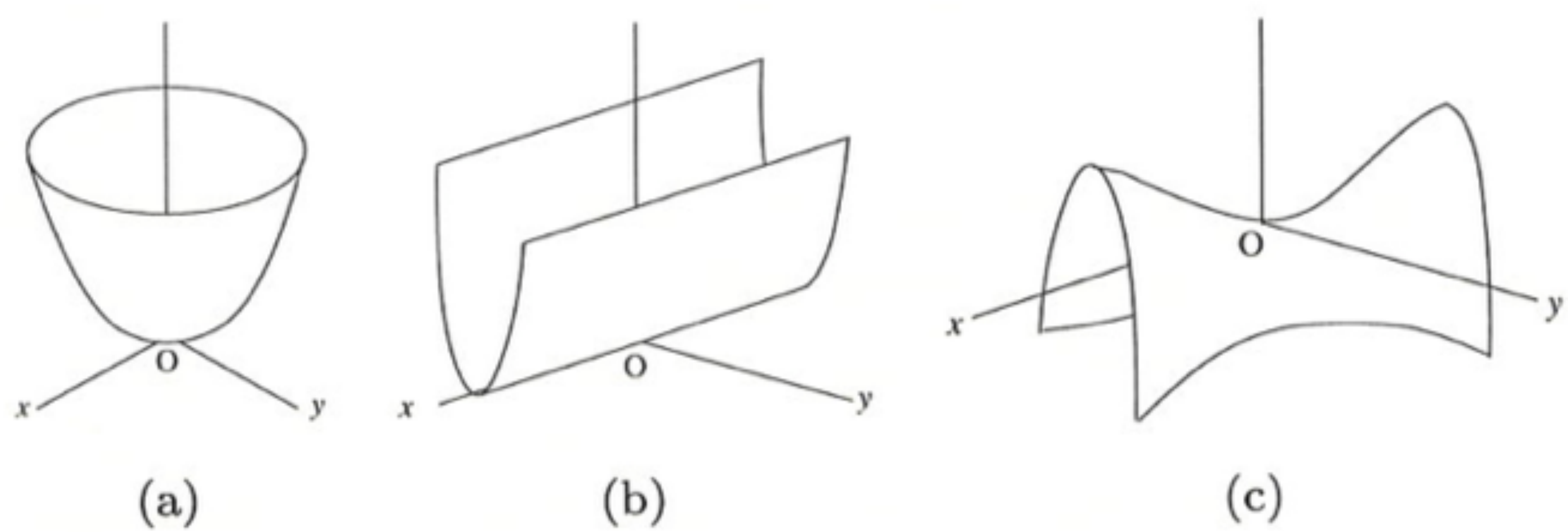


図 5.5　2 次形式 $f = \lambda_1 x^2 + \lambda_2 y^2$ の表す曲面．(a) λ_1，λ_2 が同符号の場合は楕円型，(b) λ_1，λ_2 の一方が 0 の場合は放物型，(c) λ_1，λ_2 が異符号の場合は双曲型．

【例 5.30】 次の 2 次形式を標準形に直せ.

$$f = 6x^2 + 4xy + 3y^2 \tag{5.124}$$

（解） f はベクトルと行列を用いると次のように書き直せる.

$$f = \left(\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) \tag{5.125}$$

例 5.12 より，係数行列

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \tag{5.126}$$

の固有値は 2, 7 であり，それぞれの単位固有ベクトルは

$$\boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_2 = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \tag{5.127}$$

である.

の固有値は 2, 7 であり，それぞれの単位固有ベクトルは

$$\boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{u}_2 = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \tag{5.127}$$

である．$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2$ を第 1 列，第 2 列とする行列 $\boldsymbol{U} = (\,\boldsymbol{u}_1 \;\; \boldsymbol{u}_2\,)$ は次のようになる．

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \tag{5.128}$$

これを用いると行列 $\boldsymbol{A}$ が次のように対角化される．

$$\boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{A} \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & -2/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix} \tag{5.129}$$

次の変数 x', y' を定義する．

$$x' = \frac{x}{\sqrt{5}} - \frac{2y}{\sqrt{5}}, \qquad y' = \frac{2x}{\sqrt{5}} + \frac{y}{\sqrt{5}} \tag{5.130}$$

x, y について表すと次のようになる．

$$x = \frac{x'}{\sqrt{5}} + \frac{2y'}{\sqrt{5}}, \qquad y = -\frac{2x'}{\sqrt{5}} + \frac{y'}{\sqrt{5}} \tag{5.131}$$

式 (5.130), (5.131) はベクトルと行列を用いると，それぞれ $\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}'$ となっている．これから，式 (5.125) が次のように変形される．

$$\begin{aligned}
f &= \left(\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) \\
&= \left(\begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right) \\
&= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & -2/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right) \\
&= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right)
\end{aligned} \tag{5.132}$$

ゆえに，f の標準形は次のようになる．

$$f = 2x'^2 + 7y'^2 \tag{5.133}$$

□

【例 5.31】 次の 2 次形式を標準形に直せ.

$$f = 4x^2 + 4y^2 + 4z^2 - 2yz + 2zx - 2xy$$

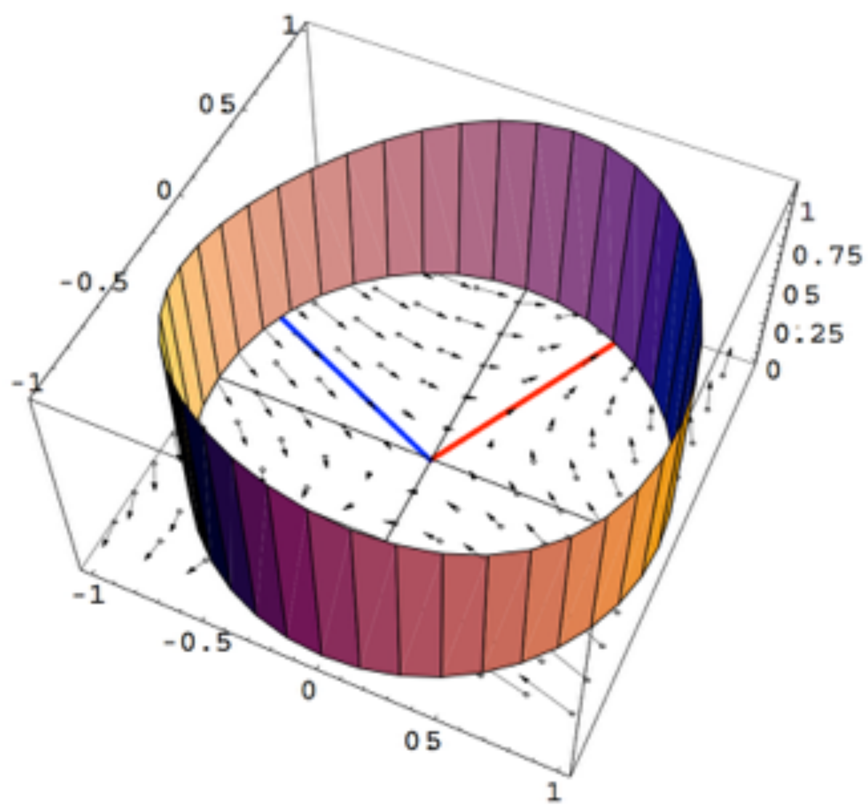
f はベクトルと行列を用いると次のように書き直せる.

$$\begin{aligned} f &= \left(\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4 & -1 \\ 1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \right) \end{aligned}$$

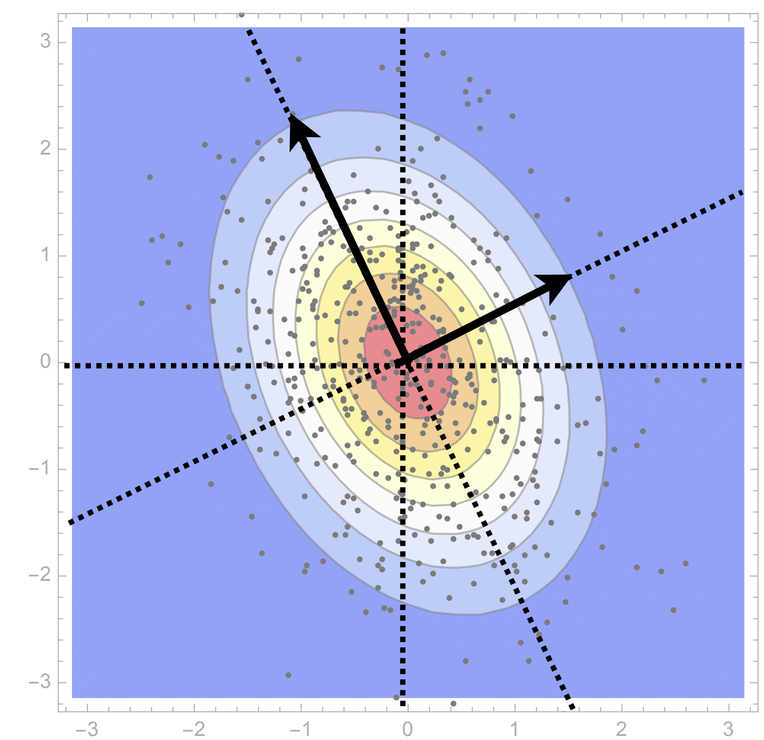
f の標準形は次のようになる.

$$f = 6x'^2 + 3y'^2 + 3z'^2$$

二次形式の最大最小



x′x = 1の上での x′Axの値



|x| = 1の単位ベクトルのうち
x′Axの値が最大となるのは、
Aの最大固有値に対応する
固有ベクトルの方向！

分散共分散行列は「正定値行列(positive-definite matrix)」

- どんなxに対しても２次形式 x′Ax > 0
- すべての固有値が正

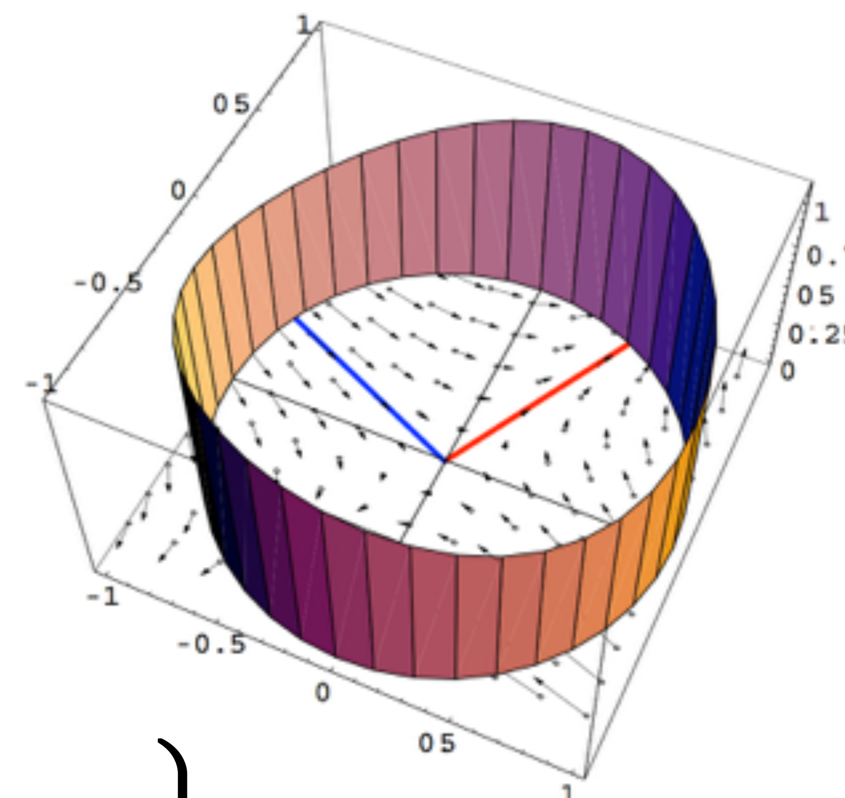
Rayleigh-Ritzの定理と二次形式の最大・最小

対称行列 A に対して、Rayleigh商 $\dfrac{\boldsymbol{u}' A \boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}' \boldsymbol{u}}$

固有値　$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$

正規直交固有ベクトル　$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$

$\|\boldsymbol{u}\|^2 = 1$ 上での $\boldsymbol{u}' A \boldsymbol{u}$ の値



$$\lambda_1 = \max_{\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{u}' A \boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}' \boldsymbol{u}}$$

$$\lambda_n = \min_{\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{u}' A \boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}' \boldsymbol{u}}$$

$$\lambda_k = \max_{\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{u}' A \boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}' \boldsymbol{u}} \,\middle|\, \boldsymbol{u} \perp \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{k-1} \right\}$$