パターン認識特論

担当:和田　俊和
部屋　A513
Email　twada@ieee.org

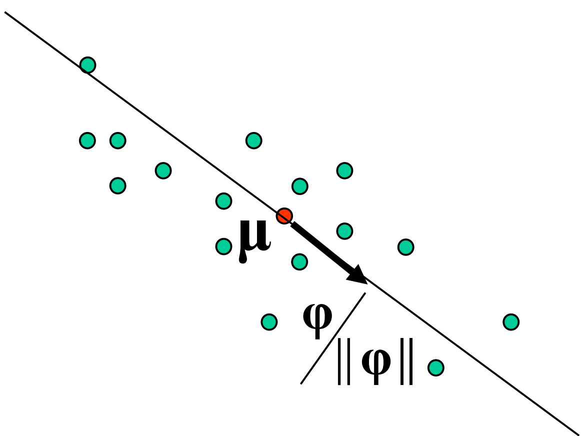
主成分分析

http://vrl.sys.wakayama-u.ac.jp/PRA/

主成分分析1
（正規直交基底をデータから求める）

- 特徴ベクトルの各要素の分散を最大化する。

$$c_i = (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \cdot \boldsymbol{\varphi}$$



$$\bar{c} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \cdot \boldsymbol{\varphi}$$

$$= \left(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu}\right) \cdot \boldsymbol{\varphi}$$

$$\boldsymbol{\mu} = \bar{\mathbf{x}} \Rightarrow \bar{c} = 0$$

主成分分析2

- 特徴ベクトルの各要素の分散

$$V(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})\cdot \boldsymbol{\varphi}\right\}^2$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T \boldsymbol{\varphi}\}^T\{(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T \boldsymbol{\varphi}\}$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\varphi}^T(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T \boldsymbol{\varphi}$$

$$= \boldsymbol{\varphi}^T \Sigma \boldsymbol{\varphi}$$

$$\boxed{\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T}_{\Sigma}}$$

この値を

$\|\boldsymbol{\varphi}\|^2 = 1$

という条件の下で最大化する.

知識:ベクトルの操作に関する公式

内積

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}$$

$$(\alpha\boldsymbol{a}+\beta\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{x}$$

転置

$$(A\boldsymbol{b})^T=\boldsymbol{b}^T A^T \qquad (\boldsymbol{a}^T)^T=\boldsymbol{a}$$

微分

$$\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{b}}\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a} \qquad \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{a}}\boldsymbol{a}^T A\boldsymbol{a}=2A\boldsymbol{a}$$

$$\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{a}}\|\boldsymbol{a}\|^2=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{a}}\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{a}=2\boldsymbol{a}$$

主成分分析3
ラグランジェの未定係数法

$$F(\boldsymbol{\varphi},\lambda)=\boldsymbol{\varphi}^T\Sigma\boldsymbol{\varphi}-\lambda(\|\boldsymbol{\varphi}\|^2-1)$$

この式を最大化するのが解.

$\Rightarrow \boldsymbol{\varphi}$ と λ で微分し，それらを0と置く

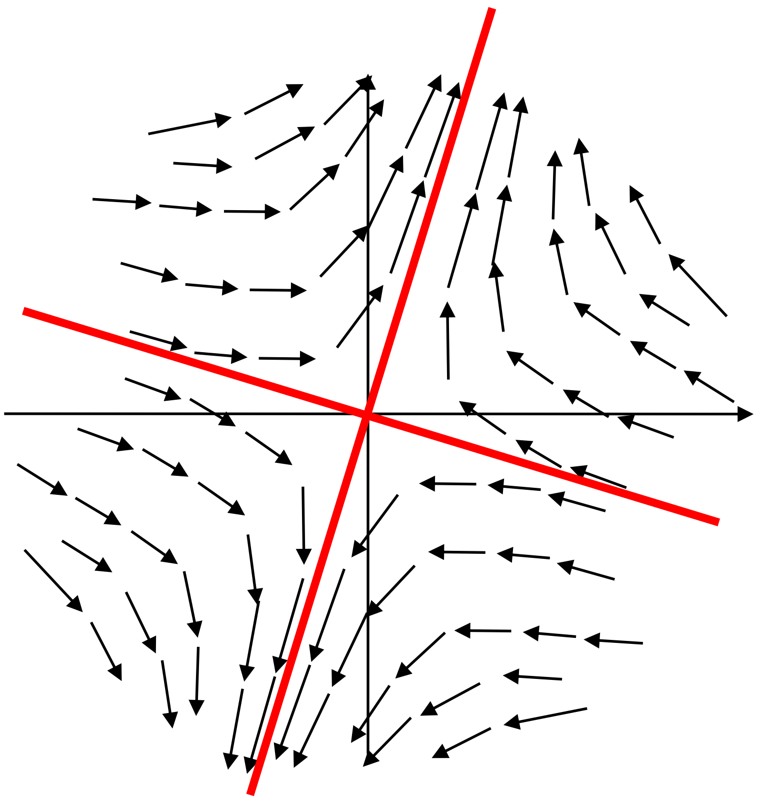
$$\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\varphi}}F(\boldsymbol{\varphi},\lambda)=2\left(\Sigma\boldsymbol{\varphi}-\lambda\boldsymbol{\varphi}\right)=0 \qquad \frac{\partial}{\partial\lambda}F(\varphi,\lambda)=\underbrace{\|\varphi\|^2-1}=0$$

$$\lambda\boldsymbol{\varphi}=\sum\boldsymbol{\varphi}$$

固有値問題になる

$\lambda\boldsymbol{\varphi} = \Sigma\boldsymbol{\varphi}$　固有値問題の例

- 線形変換 $\Sigma\varphi$
- φを起点として終点を$\Sigma\varphi$とするベクトルを描く.
- 右図に固有ベクトルの方向を書き加えると,



知識：固有値問題の解き方

固有方程式　$\lambda\varphi = \Sigma\varphi$

特性方程式　$| S - / I | = 0$

各固有値が求められれば，それに対応する固有ベクトルが求められる．

実例

- $x_1 = (2,4,3)^T$, $x_2 = (2,2,4)^T$, $x_3 = (1,1,2)^T$, $x_4 = (3,1,3)^T$

$$\bar{x} = (2,2,3),\quad \Sigma = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^T$$

$$= \frac{1}{4}\left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \frac{1}{4}\left\{ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 6 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$ ←これが，共分散行列

計算結果

$$\bar{x} = (2,2,3) \qquad S = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 6 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

- 特性方程式
- 固有値（本当の固有値はこれを4で割る）

$$\lambda^3 - 10\lambda^2 + 26\lambda - 16 = 0$$

$$\lambda'_1 = 6.24914053821955$$

$$\lambda'_2 = 2.8536345106709$$

$$\lambda'_3 = 0.8972249509336$$

- 固有ベクトル：次ページ

固有ベクトルの導出

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 6 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \lambda' \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 2x+z \\ 6y+z \\ x+y+2z \end{pmatrix} = \lambda' \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$(2-\lambda')x = (6-\lambda')y \Leftrightarrow \boxed{x:y = 6-\lambda' : 2-\lambda'}$$

$$(2\lambda'-8)x = (6-\lambda')(2-\lambda')z$$

$$\Leftrightarrow \boxed{x:z = (6-\lambda')(2-\lambda') : 2\lambda'-8}$$

$$\boxed{x:y:z = (6-\lambda')(2-\lambda') : (2-\lambda')^2 : 2\lambda'-8}$$

固有ベクトル

$$\boldsymbol{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} 0.056802 \\ 0.968772 \\ 0.241360 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} 0.744880 \\ -0.202092 \\ 0.635855 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\varphi}_3 = \begin{pmatrix} -0.664776 \\ -0.143667 \\ 0.733098 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 6.24914053821955/4$$

$$\lambda_2 = 2.85363451069709/4$$

$$\lambda_3 = 0.8972249509336/4$$

$\Sigma = \lambda_1 \boldsymbol{\varphi}_1 \boldsymbol{\varphi}_1^T + \lambda_2 \boldsymbol{\varphi}_2 \boldsymbol{\varphi}_2^T + \lambda_3 \boldsymbol{\varphi}_3 \boldsymbol{\varphi}_3^T$を計算すると

$\Sigma = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 6 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$が得られ、上記結果が正しいことが確認できる。

直交展開

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} = 1.9375\boldsymbol{\varphi}_1 - 0.4042\boldsymbol{\varphi}_2 - 0.2873\boldsymbol{\varphi}_3 + \bar{\boldsymbol{x}}$$

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} = 0.2414\boldsymbol{\varphi}_1 + 0.6359\boldsymbol{\varphi}_2 + 0.7331\boldsymbol{\varphi}_3 + \bar{\boldsymbol{x}}$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = -1.2669\boldsymbol{\varphi}_1 - 1.1786\boldsymbol{\varphi}_2 + 0.0753\boldsymbol{\varphi}_3 + \bar{\boldsymbol{x}}$$

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} = -0.9120\boldsymbol{\varphi}_1 + 0.9470\boldsymbol{\varphi}_2 - 0.5211\boldsymbol{\varphi}_3 + \bar{\boldsymbol{x}}$$

Octaveを使えば，簡単に計算できる．

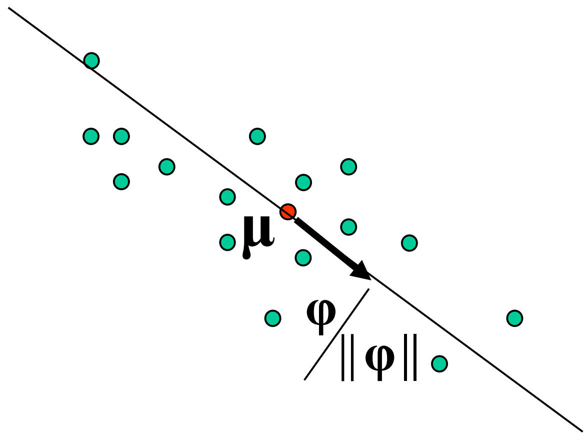
http://www.octave.org/

```
octave:1> sigma=[2,0,1;0,6,1;1,1,2]
sigma =

  2  0  1
  0  6  1
  1  1  2

octave:2> [v,lambda]=eig(sigma)
v =

  -0.664776   0.744880   0.056802
  -0.143667  -0.202092   0.968772
   0.733098   0.635855   0.241360
```

```
lambda =

  0.89722  0.00000  0.00000
  0.00000  2.85363  0.00000
  0.00000  0.00000  6.24914

octave:3> v*lambda*v'
ans =

   2.0000e+00  -4.1975e-16   1.0000e+00
  -4.8881e-16   6.0000e+00   1.0000e+00
   1.0000e+00   1.0000e+00   2.0000e+00

octave:4>
```

主成分分析

- 共分散行列Σの性質　σ_i^2 分散,　σ_{ij} 共分散



$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix}$$

対称行列なので次式による
対角化が　可能

$$\Sigma = V \Lambda V^T$$

$$V = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_2 & \cdots & \boldsymbol{\varphi}_N \end{bmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

主成分分析

- 共分散行列Σの分解

$$\Sigma = V\Lambda V^T$$

$$V = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_2 & \cdots & \boldsymbol{\varphi}_N \end{bmatrix} \quad V^T = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T \\ \boldsymbol{\varphi}_2^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varphi}_N^T \end{bmatrix} \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

- 行列式

$$|\Sigma| = \det\Sigma = \prod_{i=1}^{N} \lambda_i$$

- トレース（行列の対角要素の和）

$$\mathrm{trace}\Sigma = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i$$

直交行列

正規直交基底を並べてできる行列は直交行列

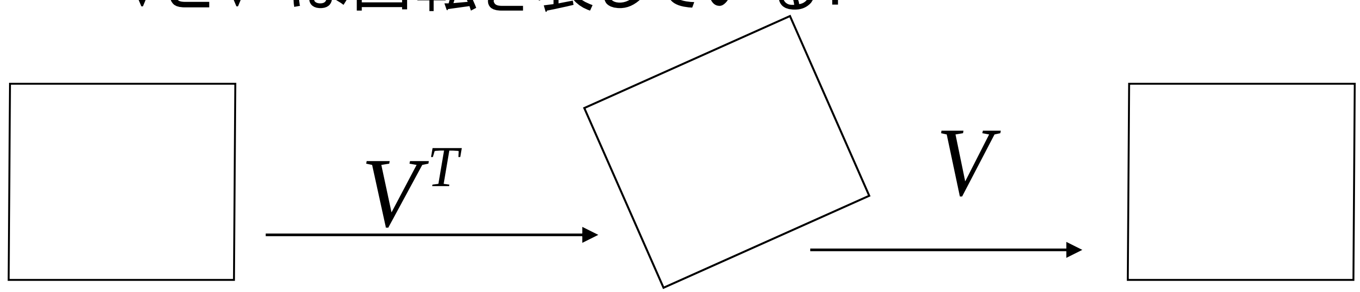
$$V = \begin{bmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \cdots & \varphi_N \end{bmatrix}$$

$$V^T = \begin{bmatrix} \varphi_1^T \\ \varphi_2^T \\ \vdots \\ \varphi_N^T \end{bmatrix}$$

$$V^T V = I \quad \Rightarrow \quad V^T = V^{-1}$$

$$\| V\mathbf{x} \| = \| \mathbf{x} \|$$

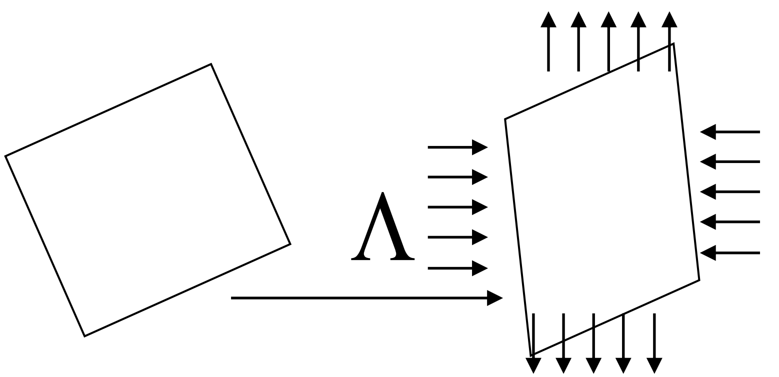
VとV^{T}は回転を表している:



対角行列

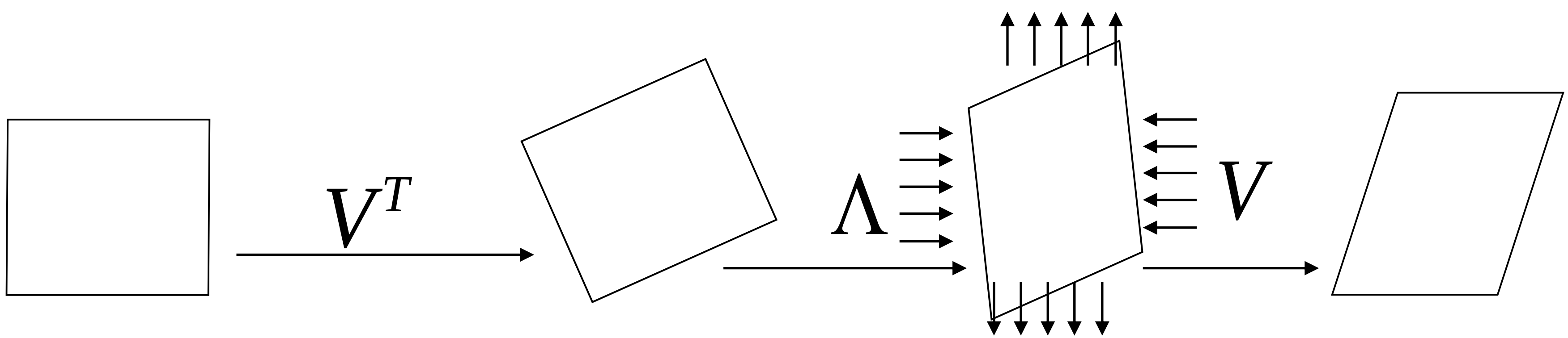
対角行列は各軸ごとの伸縮を表している

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$



共分散行列が表す幾何学的変換

$$\Sigma = V \Lambda V^T$$



主成分分析によって何が分かるか

- 分散の大きくなる軸の向き $\boldsymbol{\varphi}_i$
- その軸方向の偏差 $\sqrt{\lambda_i}$ 分散 λ_i
- 共分散行列のランクがrである場合、次式が成り立つ

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{r} \left(\boldsymbol{\varphi}_i \cdot \left(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}} \right) \right) \boldsymbol{\varphi}_i + \bar{\mathbf{x}}$$

「固有値＝軸上の分散」の確認

$$V(\varphi_i) = \varphi_i^T \Sigma \varphi_i = \varphi_i^T V \Lambda V^T \varphi_i$$

$$= \varphi_i^T \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_i \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \lambda_i & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1^T & \cdots & \varphi_i^T & \cdots & \varphi_N^T \end{bmatrix} \varphi_i$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \lambda_i & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \end{bmatrix} = \lambda_i$$

Karhunen-Loeve 展開

- r未満の数qに対する直交展開

$$\boldsymbol{x}' = \sum_{i=1}^{q} (\boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{x}) \boldsymbol{\varphi}_i$$

を計算する際に誤差||**x**-**x**’||を最小化する基底

- 自己相関行列 $R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i^T$ に対する固有値問題になる.

次回以降の講義

- 識別（統計的手法、判別分析、線形識別関数とニューラルネットワーク、最近傍識別）
- クラスタリング（K-means、ＥＭアルゴリズム）
- より進んだ識別手法：ＳＶＭ、ＢＯＯＳＴＩＮＧなど