

「データ解析」（下平英寿）　講義資料９

主成分分析

- 目標： 主成分分析について理解する.
  1. データ行列を低次元に射影する.「情報圧縮」に相当.
  2. バイプロットによる表示.
  3. 固有値，固有ベクトル，および特異値分解との関係.

1　１次元への射影

1.1　データ行列の中心化

- データ行列

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{\left.\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}\right\} n}_{p} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_p]$$

$\boldsymbol{x}^{(i)}$ は行ベクトル，$\boldsymbol{x}_j$ は列ベクトル

- 各列の平均を引き去って「中心化」してあるものと仮定して議論を進める

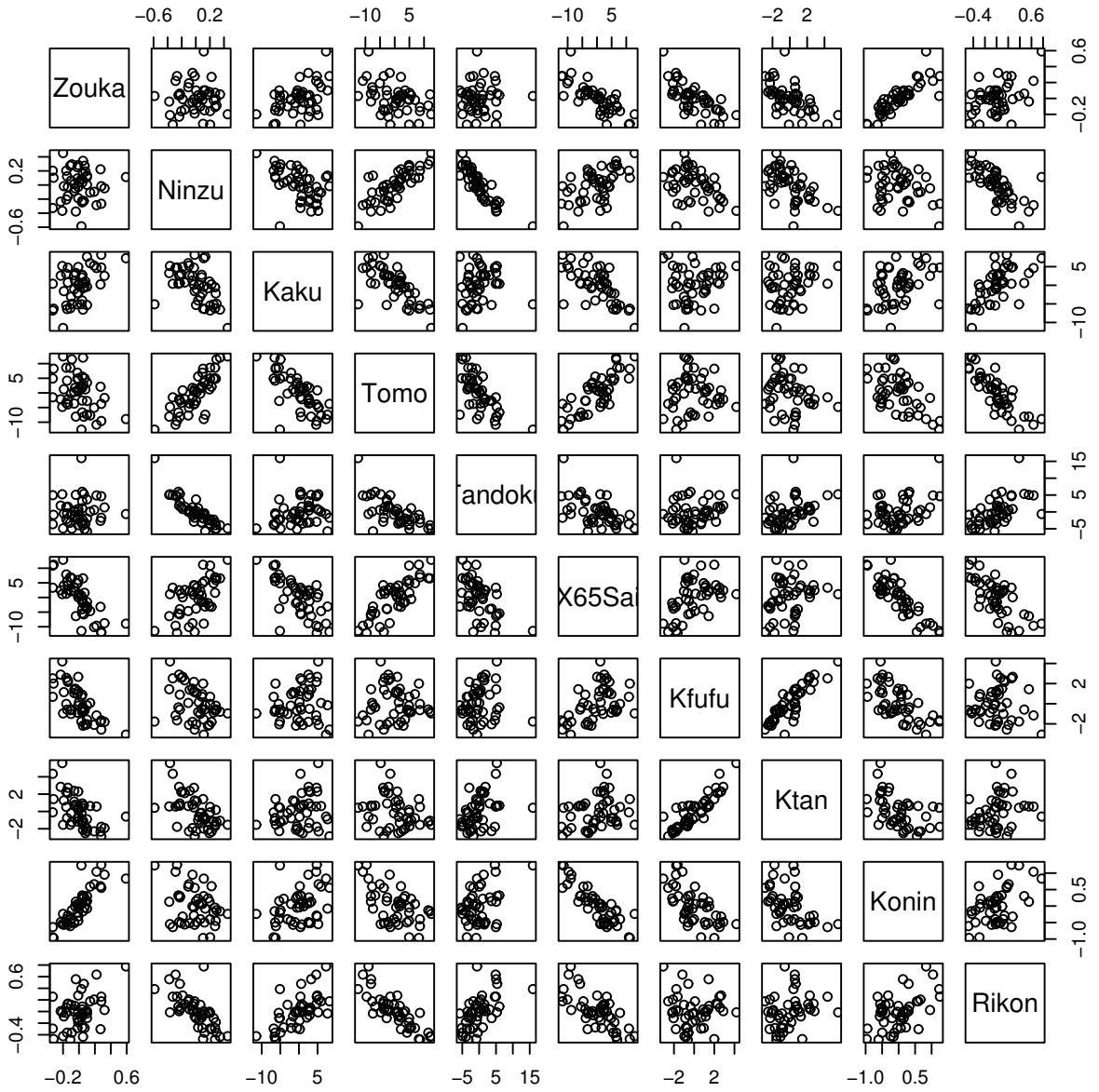
$$\boldsymbol{X} \leftarrow \boldsymbol{X} - \tfrac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n'\boldsymbol{X}$$

R では `dat <- scale(dat,center=T,scale=F)` または `dat <- scale(dat,scale=F)` とする.

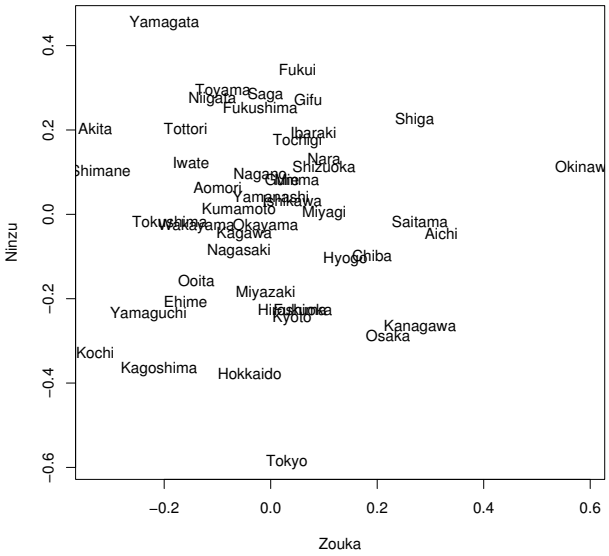
```
# run0087.R
# 主成分分析：データ行列の中心化
dat <- read.table("dat0002.txt") # 10変量データセット
cat("# データ行列の次元と変数名\n")
dim(dat); names(dat)
cat("# 平均と分散\n")
mean(dat); apply(dat,2,var)
cat("# 中心化する\n")
xx <- scale(dat,scale=F) # 中心化
cat("# 平均と分散\n")
apply(xx,2,mean); apply(xx,2,var)
```

```
plot87 <- function(x,y,dat) {
  plot(dat[,x],dat[,y],type="n",xlab=x,ylab=y)
  text(dat[,x],dat[,y],rownames(dat))
  invisible(cbind(dat[,x],dat[,y]))
}
pairs(xx)
dev.copy2eps(file="run0087-s0.eps")
plot87("Zouka","Ninzu",xx)
dev.copy2eps(file="run0087-s1.eps")
plot87("X65Sai","Tomo",xx)
dev.copy2eps(file="run0087-s2.eps")
```

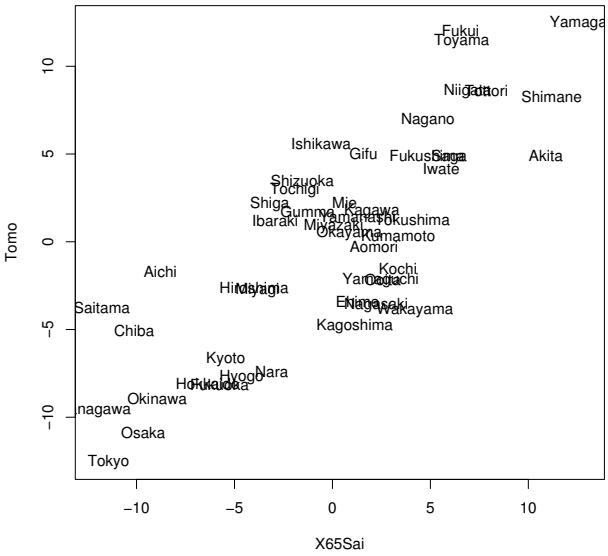
```
> source("run0087.R",print=T)
# データ行列の次元と変数名
[1] 47 10
 [1] "Zouka"   "Ninzu"   "Kaku"    "Tomo"    "Tandoku" "X65Sai"  "Kfufu"
 [8] "Ktan"    "Konin"   "Rikon"
# 平均と分散
      Zouka       Ninzu        Kaku        Tomo     Tandoku      X65Sai
 0.07957447  2.79680851 57.25978723 34.63319149 24.88893617 36.86638298
      Kfufu        Ktan       Konin       Rikon
 8.46042553  6.81085106  5.63787234  1.84404255
      Zouka       Ninzu        Kaku        Tomo     Tandoku      X65Sai
 0.03241721  0.04867872 20.38998474 38.09756568 15.61066623 38.51346272
      Kfufu        Ktan       Konin       Rikon
 2.81379547  3.43402969  0.29180842  0.08022895
# 中心化する
# 平均と分散
        Zouka          Ninzu          Kaku          Tomo       Tandoku
 4.724353e-18  1.889741e-17 -2.403751e-14 -4.686558e-15 -3.401534e-15
       X65Sai          Kfufu          Ktan         Konin         Rikon
-3.325945e-15  1.946434e-15 -1.644075e-15  1.889741e-17 -9.921142e-17
      Zouka       Ninzu        Kaku        Tomo     Tandoku      X65Sai
 0.03241721  0.04867872 20.38998474 38.09756568 15.61066623 38.51346272
      Kfufu        Ktan       Konin       Rikon
 2.81379547  3.43402969  0.29180842  0.08022895
```



run0087-s0



run0087-s1



run0087-s2

1.2 １次元へ射影（その１）

- 単位方向ベクトル $\boldsymbol{v}$, $\|\boldsymbol{v}\| = 1$.

$$\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_p \end{bmatrix}, \quad \sum_{j=1}^{p} v_j^2 = 1.$$

- データ行列の i 行目のベクトルを $\boldsymbol{v}$ に射影したものを y_i とする.

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{\left.\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}\right\} n}_{p} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_p]$$

$$y_i = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}, \quad i = 1, \dots, n \quad \text{をまとめて} \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}$$

- $\boldsymbol{x}^{(i)}$ に相当する射影ベクトルは $y_i\boldsymbol{v}'$. 射影誤差は, $\|\boldsymbol{x}^{(i)} - y_i\boldsymbol{v}'\|^2$ である. これを $i = 1, \dots, n$ に関して足し合わせたものを最小化するような $\boldsymbol{v}$ を求めたい.

$$\text{目的関数} = \sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{x}^{(i)} - y_i\boldsymbol{v}'\|^2$$

  として数値的最適化を試みる.

- optim を呼び出す際に $\|\boldsymbol{v}\| = 1$ という制約を表現するため, $(v_1, v_2, \dots, v_{p-1})$ をパラメータにして, 残りの v_p は

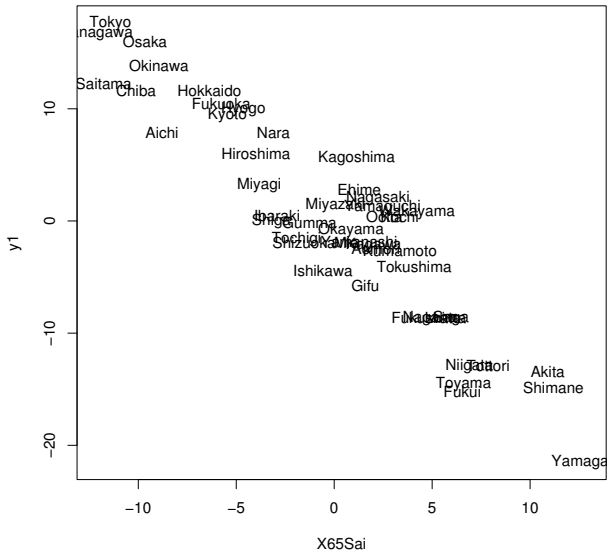
$$v_p = \sqrt{1 - v_1^2 - \cdots - v_{p-1}^2}$$

  から求める.

```
# run0088.R
# 主成分分析：１次元へ射影（その１）
# dat にデータ行列をいれておく
xx <- scale(dat,scale=F) # 中心化
vv88 <- function(v) {
  vp <- sqrt(1-sum(v*v)) # 長さ１になるように最後の要素を計算
  c(v,vp) # 単位方向ベクトル
}
rss88 <- function(v) { # 射影誤差
  vv <- vv88(v) # 単位方向ベクトル
```

```
  y <- as.vector(xx %*% vv) # 射影成分を並べたベクトル
  yy <- y %o% vv # 射影を並べた行列
  sum((yy-xx)^2)
}
cat("初期値\n")
v0 <- rep(0,ncol(xx)-1) # 初期ベクトル
print(vv88(v0))
a <- optim(v0,rss88,control=list(trace=T,parscale=rep(0.1,9)),method="BFGS")
cat("最適値\n")
v1 <- a$par # 最適値
vv1 <- vv88(v1)
y1 <- xx %*% vv1 # 射影成分を並べたベクトル
print(vv1); print(y1)
plot87("X65Sai","y1",data.frame(xx,y1))
dev.copy2eps(file="run0088-s1.eps")
```

```
> source("run0088.R")
初期値
 [1] 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1
initial  value 5484.690809
iter  10 value 1491.049652
iter  20 value 1471.466930
final  value 1471.432185
converged
最適値
 [1]  0.01136277 -0.01802609  0.37297844 -0.63150376  0.27614300 -0.61797792
 [7] -0.03022154  0.01706924  0.04054889  0.02520826

                    [,1]
  Hokkaido   11.65828547
  Aomori     -2.50544628
  Iwate      -8.60336604
  Miyagi      3.17586794
  Akita     -13.45533682
... 中略 ...
  Kumamoto   -2.68197069
  Ooita       0.43197427
  Miyazaki    1.43301856
  Kagoshima   5.64047806
  Okinawa    13.85237567
There were 50 or more warnings (use warnings() to see the first 50)
```



run0088-s1

- y1: 射影誤差最小になる１次元射影．X65Sai： データセットの１０変量のなかで分散最大の変量.

1.3 １次元へ射影（その２）

- 単位方向ベクトル $\boldsymbol{v}$ へ射影したときの誤差が目的関数

$$\text{目的関数} = \sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{x}^{(i)} - y_i \boldsymbol{v}'\|^2$$

- 目的関数は，行列 $\boldsymbol{X} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{v}'$ のすべての成分の２乗和に相当するので,

$$\text{目的関数} = \mathrm{tr}((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{v}')'(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{v}'))$$

一般に二つの行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ のトレースが $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A})$ を満たすことに注意すると

$$\text{目的関数} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - 2\boldsymbol{y}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}$$

ここで $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}$ に注意すると

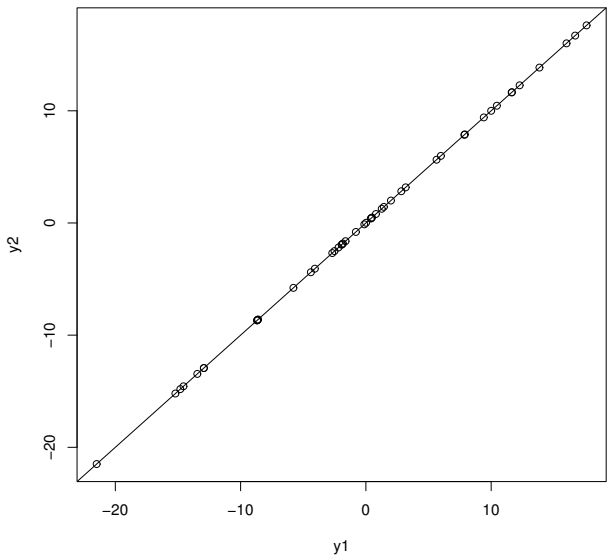
$$\text{目的関数} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}$$

つまり射影誤差の最小化は，$\|\boldsymbol{y}\|^2$ の最大化に等しい.

```
# run0089.R
# 主成分分析：１次元へ射影（その２）
# dat にデータ行列をいれておく
xx <- scale(dat,scale=F) # 中心化
rss89 <- function(v) { # 射影誤差
  vv <- vv88(v) # 単位方向ベクトル
```

```
  y <- as.vector(xx %*% vv) # 射影成分を並べたベクトル
  sum(y*y)
}
v0 <- rep(0,ncol(xx)-1) # 初期ベクトル
a <- optim(v0,rss89,control=list(trace=T,parscale=rep(0.1,9),fnscale=-1),
           method="BFGS")
v2 <- a$par # 最適値
vv2 <- vv88(v2)
y2 <- xx %*% vv2 # 射影成分を並べたベクトル
print(vv2); print(y2)
plot(y1,y2); abline(0,1)
dev.copy2eps(file="run0089-s1.eps")
```

```
> source("run0089.R")
initial  value -3.690532
iter  10 value -3997.331688
iter  20 value -4016.914410
final  value -4016.949156
converged
 [1]  0.01136275 -0.01802609  0.37297844 -0.63150376  0.27614300 -0.61797792
 [7] -0.03022154  0.01706924  0.04054890  0.02520826

                   [,1]
  Hokkaido   11.65828547
  Aomori     -2.50544628
  Iwate      -8.60336604
  Miyagi      3.17586794
  Akita     -13.45533682
... 中略 ...
  Kumamoto   -2.68197069
  Ooita       0.43197427
  Miyazaki    1.43301856
  Kagoshima   5.64047806
  Okinawa    13.85237566
There were 50 or more warnings (use warnings() to see the first 50)
```



run0089-s1

- y1: 射影誤差の最小化， y2: 射影分散の最大化．両者は当然等価．

1.4 データ行列の標準化

- 単位の異なる変量を同等に扱うのは不自然．例えばデータ行列のある列だけ長さの単位をメートルからセンチに変えれば分散は 10000 倍になり，固有ベクトルがその列の方向に大幅に引っ張られることになる．

- データ行列の各列を分散が 1 になるようにあらかじめ「標準化」しておく．平均は 0 にしておく（中心化）．

$$\sigma_{x_1}^2 = \frac{1}{n-1}\|\boldsymbol{x}_1\|^2, \ldots, \sigma_{x_p}^2 = \frac{1}{n-1}\|\boldsymbol{x}_p\|^2$$

として

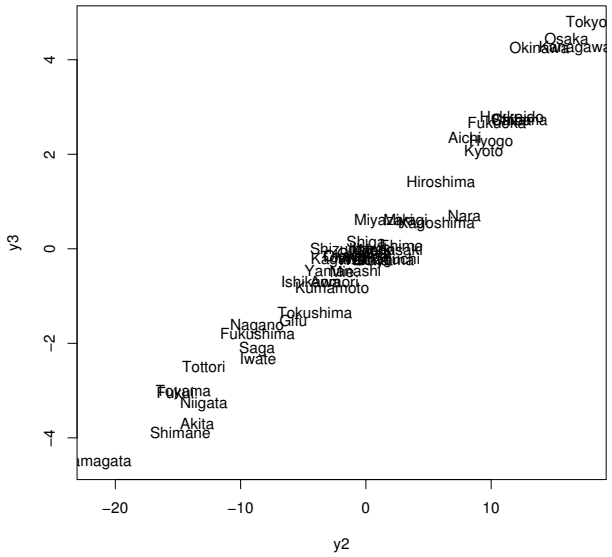
$$\boldsymbol{x}_j \leftarrow \frac{1}{\sigma_{x_j}}\boldsymbol{x}_j, \ldots, j = 1, \ldots, p$$

R では，`dat <- scale(dat,center=T,scale=T)` または `dat <- scale(dat)` とする．

```
# run0090.R
# 主成分分析：標準化と１次元へ射影（その３）
# dat にデータ行列をいれておく
cat("# 標準化する\n")
xx <- scale(dat) # 標準化
cat("# 平均と分散\n")
print(apply(xx,2,mean)); print(apply(xx,2,var))
v0 <- rep(0,ncol(xx)-1) # 初期ベクトル
a <- optim(v0,rss89,control=list(trace=T,parscale=rep(0.1,9),fnscale=-1),
           method="BFGS")
v3 <- a$par # 最適値
```

```
vv3 <- vv88(v3)
y3 <- xx %*% vv3 # 射影成分を並べたベクトル
print(vv3); print(y3)
plot87("y2","y3",data.frame(y2,y3))
dev.copy2eps(file="run0090-s1.eps")
```

```
> source("run0090.R")
# 標準化する
# 平均と分散
        Zouka          Ninzu          Kaku          Tomo       Tandoku
 9.448707e-18  7.086530e-17 -5.333795e-15 -7.511722e-16 -8.828635e-16
       X65Sai          Kfufu          Ktan         Konin         Rikon
-5.433006e-16  1.256678e-15 -9.838466e-16  2.834612e-17 -2.645638e-16
  Zouka   Ninzu    Kaku    Tomo Tandoku  X65Sai   Kfufu    Ktan   Konin   Rikon
      1       1       1       1       1       1       1       1       1       1
initial  value -46.000000
iter  10 value -233.768184
final  value -233.772458
converged
 [1]  0.295696345 -0.320641482  0.316998519 -0.404836235  0.292854163
 [6] -0.423040588 -0.115958345  0.004907643  0.350365331  0.380025111

                  [,1]
  Hokkaido   2.786454587
  Aomori    -0.691447996
  Iwate     -2.330034159
  Miyagi     0.584675209
  Akita     -3.705964602
... 中心化 ...
  Kumamoto  -0.824326719
  Ooita     -0.216327708
  Miyazaki   0.588026248
  Kagoshima  0.526326431
  Okinawa    4.256887557
Warning messages:
1: NaNs produced in: sqrt(1 - sum(v * v))
2: NaNs produced in: sqrt(1 - sum(v * v))
3: NaNs produced in: sqrt(1 - sum(v * v))
4: NaNs produced in: sqrt(1 - sum(v * v))
5: NaNs produced in: sqrt(1 - sum(v * v))
```



run0090-s1

- y2: 中心化と 1 次元射影，y3: 標準化と 1 次元射影.
- このデータセットでは，y2 と y3 が（スケールの違いを除いて），だいたい同じ変量になっている．一般には，大幅に異なることもある.
- このデータセットでも，後ほど説明するバイプロットでは，中心化と標準化の差がはっきり分かる.

1.5 １次元射影と固有ベクトル

- １次元射影の成分を並べたベクトル

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}, \quad \|\boldsymbol{v}\| = 1$$

- 射影誤差の最小化は，$\|\boldsymbol{y}\|^2$ の最大化に等価.

$$\boldsymbol{v}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \to \text{最大}, \quad \text{ただし} \boldsymbol{v}'\boldsymbol{v} = 1$$

- ラグランジュの未定乗数法

$$f(\boldsymbol{v}, \lambda) = \boldsymbol{v}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} - \lambda(\boldsymbol{v}'\boldsymbol{v} - 1)$$

に関して，

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = 2\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} - 2\lambda\boldsymbol{v} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \lambda} = \boldsymbol{v}'\boldsymbol{v} - 1 = 0$$

を解くと，

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}, \quad \|\boldsymbol{v}\| = 1$$

となる．したがって $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有ベクトル (長さ 1) を $\boldsymbol{v}$，その固有値を λ とすれば $\boldsymbol{v}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}$ の極値をとる．さらに

$$\|\boldsymbol{y}\|^2 = \boldsymbol{v}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}'\boldsymbol{v} = \lambda$$

に注意すれば，最大固有値の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}$ に選べば $\|\boldsymbol{y}\|^2$ の最大化である.

- $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有ベクトルを求める代わりに，分散共分散行列 $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有ベクトルを求めてもよい．この場合，固有値 λ は y の分散 $\frac{1}{n-1}\|\boldsymbol{y}\|^2$ に相当する．

$$\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \lambda, \quad \frac{1}{n-1}\|\boldsymbol{y}\|^2 = \lambda$$

- データ行列が標準化してある場合，$\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の対角成分は1である．したがって，$\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ は相関行列である．

```
# run0091.R
# 主成分分析：固有ベクトルと１次元へ射影（その４）
# dat にデータ行列をいれておく
cat("中心化と分散共分散行列\n")
xx1 <- scale(dat,scale=F) # 中心化
cv1 <- var(xx1) # 分散共分散行列
print(cv1[1:5,1:5])
cat("射影\n")
vv4 <- eigen(cv1)$vectors[,1]
y4 <- xx1 %*% vv4 # 射影成分を並べたベクトル
print(vv4); print(y4)
plot(y2,y4); abline(0,1)
dev.copy2eps(file="run0091-s1.eps")

cat("標準化と分散共分散行列\n")
xx2 <- scale(dat) # 標準化
cv2 <- var(xx2) # 分散共分散行列
print(cv2[1:5,1:5])
cat("射影\n")
vv5 <- eigen(cv2)$vectors[,1]
y5 <- xx2 %*% vv5 # 射影成分を並べたベクトル
print(vv5); print(y5)
plot(y3,y5); abline(0,1)
dev.copy2eps(file="run0091-s2.eps")
```

```
> source("run0091.R")
中心化と分散共分散行列
                Zouka          Ninzu         Kaku         Tomo       Tandoku
Zouka     0.0324172063 -0.0002253006   0.4004043  -0.4600704   0.03378432
Ninzu    -0.0002253006  0.0486787234  -0.4910355   1.0861604  -0.77806434
Kaku      0.4004042553 -0.4910354764  20.3899847 -19.8413384   2.76414107
Tomo     -0.4600703515  1.0861604070 -19.8413384  38.0975657 -16.64777044
Tandoku   0.0337843201 -0.7780643386   2.7641411 -16.6477704  15.61066623
射影
```

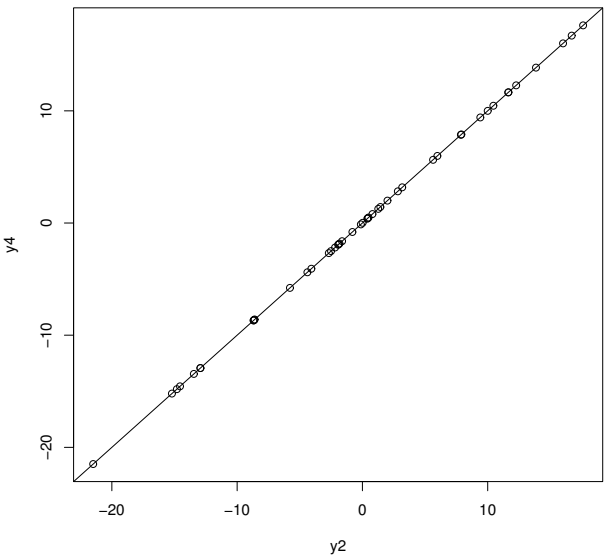
```
 [1]  0.01136942 -0.01795377  0.37199395 -0.63202407  0.27540588 -0.61839763
 [7] -0.03000842  0.01690031  0.04037257  0.02518684

                   [,1]
  Hokkaido   11.65835480
  Aomori     -2.50270706
  Iwate      -8.60116971
  Miyagi      3.18132115
  Akita     -13.45275717
... 中略 ...
  Kumamoto   -2.68249847
  Ooita       0.43037858
  Miyazaki    1.42728153
  Kagoshima   5.63355258
  Okinawa    13.85336913
```

標準化と分散共分散行列

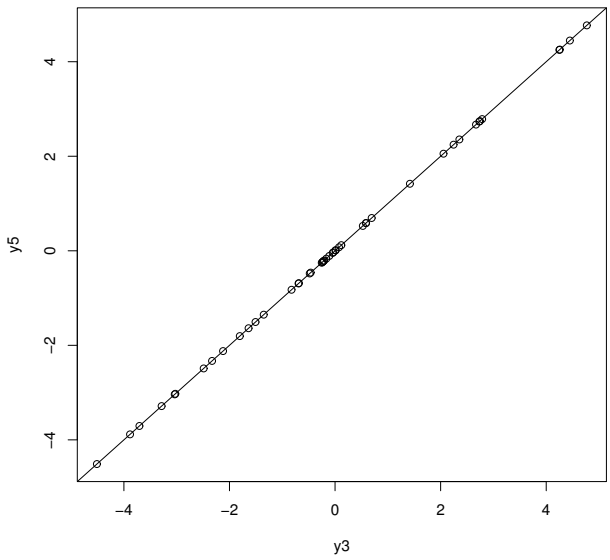
```
               Zouka        Ninzu       Kaku       Tomo     Tandoku
Zouka    1.000000000 -0.005671593  0.4924957 -0.4139881  0.04749159
Ninzu   -0.005671593  1.000000000 -0.4928728  0.7975828 -0.89255544
Kaku     0.492495698 -0.492872775  1.0000000 -0.7118917  0.15493197
Tomo    -0.413988084  0.797582772 -0.7118917  1.0000000 -0.68264788
Tandoku  0.047491586 -0.892555440  0.1549320 -0.6826479  1.00000000
```

射影

```
 [1]  0.295767123 -0.320622346  0.317007066 -0.404902395  0.292784563
 [6] -0.423035736 -0.116099424  0.004891482  0.350352254  0.379936774

                   [,1]
  Hokkaido   2.786102464
  Aomori    -0.691408625
  Iwate     -2.329945642
  Miyagi     0.584889550
  Akita     -3.706011732
... 中略 ...
  Kumamoto  -0.824440839
  Ooita     -0.216636720
  Miyazaki   0.587668313
  Kagoshima  0.525797839
  Okinawa    4.257244335
```



run0091-s1



run0091-s2

- xx1: 中心化したデータ行列，y4: 固有ベクトルから求めた射影成分で y2 に等しい．
- xx2: 標準化したデータ行列，y5: 固有ベクトルから求めた射影成分で y3 に等しい．
- optim による数値的最適化よりも eigen によって固有ベクトルを求めたほうが安全．eigen ではすべての固有値，固有ベクトルを求めている．もし最大固有値，固有ベクトルだけに興味があるなら，eigen よりもずっと効率の良い簡単なアルゴリズムがある．しかし主成分分析では後ほど述べるようにすべての固有値・固有ベクトルを求めるので，eigen でよい．

2 主成分分析

2.1 主成分

- 主成分分析 (principal component analysys) 略して PCA
- 主成分 (principal component)　略して PC ?
- 中心化 (もしくは標準化) したデータ行列 $\boldsymbol{X}$ の主成分 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_p$ を

$$\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j$$

で定義する．ただし，$\boldsymbol{X}$ の分散共分散行列 $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有値を大きい順に並べたものを

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$$

これに対応する固有ベクトル（長さ１）を

$$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p$$

とする．

- 固有ベクトルを並べた行列を $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_p)$，主成分を並べた行列を $\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_p)$ とすれば，

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$$

とまとめてかける．なお，$\boldsymbol{V}'\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}_p$ であるから $\boldsymbol{V}$ は直交行列である．

- データ行列は p 個の変量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p$ を並べたものである．これらの線形結合によって p 個の新たな合成変量 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_p$ をつくったことになる．

- 誤差を最小にする 1 次元射影は $\boldsymbol{v}_1$ 方向.
  $\boldsymbol{v}_1$ に直交するベクトルのうちで「誤差」を最小にするのは $\boldsymbol{v}_2$
  $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ に直交するベクトルのうちで「誤差」を最小にするのは $\boldsymbol{v}_3$
  $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{r-1}$ に直交するベクトルのうちで「誤差」を最小にするのは $\boldsymbol{v}_r$

- $-\boldsymbol{v}_j$ も固有値 λ_j の固有ベクトルであるから，主成分には符号の任意性がある．もし $\lambda_j = \lambda_{j+1} = \cdots = \lambda_{j+s-1}$ なら，s 個の固有ベクトル $\boldsymbol{v}_j, \boldsymbol{v}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_{j+s-1}$ の線形結合も固有ベクトルになるので，これに対応して主成分も任意性が出てくる．

- $\frac{1}{n-1}\|\boldsymbol{y}_j\|^2 = \lambda_j$ であるから，固有値 λ_j は主成分 $\boldsymbol{y}_j$ の分散を表す.

- 主成分は互いに無相関である．$j \neq k$ に対して，

$$\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{y}_j'\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{v}_j' \tfrac{1}{n-1}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{v}_j'(\lambda_k \boldsymbol{v}_k) = \lambda_k(\boldsymbol{v}_j'\boldsymbol{v}_k) = 0$$

行列表現をすれば，まとめて

$$\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{V}'(\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}) = \boldsymbol{V}'(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}) = (\boldsymbol{V}'\boldsymbol{V})\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\Lambda}$$

ただし，

$$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_p)$$

$$\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}$$

- 最初の s 個の主成分 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_s$ の分散が，データ行列全体の分散に占める割合を累積寄与率と呼ぶ

$$\text{累積寄与率} = \frac{\lambda_1 + \cdots + \lambda_s}{\lambda_1 + \cdots + \lambda_p}$$

ただし $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_p)$ は直交行列 $\boldsymbol{V}'\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}_p$ であるから，

$$\tfrac{1}{n-1}\|\boldsymbol{y}_1\|^2 + \cdots \tfrac{1}{n-1}\|\boldsymbol{y}_p\|^2 = \lambda_1 + \cdots + \lambda_p = \tfrac{1}{n-1}\|\boldsymbol{x}_1\|^2 + \cdots \tfrac{1}{n-1}\|\boldsymbol{x}_p\|^2$$

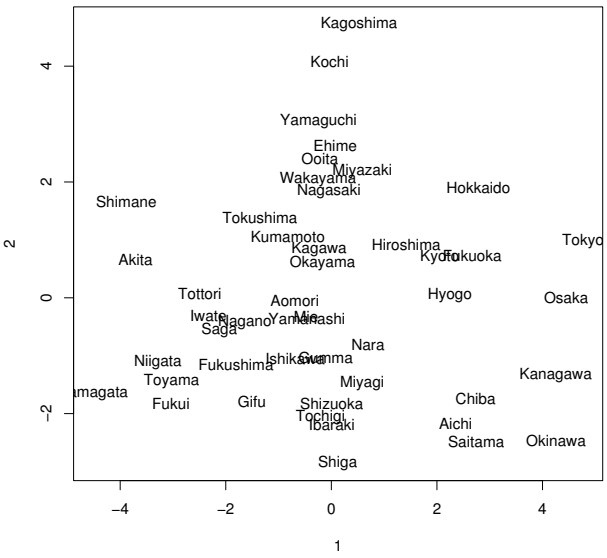
に注意.

```
# run0092.R
# 主成分分析：　固有値計算と主成分のプロット
# dat にデータ行列をいれておく
xx <- scale(dat) # 標準化
cv <- var(xx) # 分散共分散行列
```

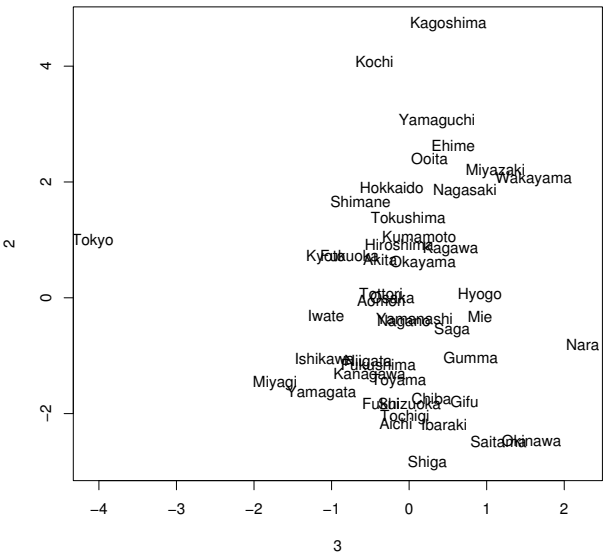
```
ei <- eigen(cv) # 固有値・固有ベクトルの計算
cat("固有値・固有ベクトル\n"); print(ei)
yy <- xx %*% ei$vectors # 主成分の計算
cat("主成分 (j=1,2,3)\n");
print(yy[1:5,1:3]); cat("...中略...");print(yy[43:47,1:3])
cat("累積寄与率\n"); print(cumsum(ei$values)/sum(ei$values))
plot87(1,2,yy); dev.copy2eps(file="run0092-s12.eps")
plot87(3,2,yy); dev.copy2eps(file="run0092-s32.eps")
```

```
> source("run0092.R")
固有値・固有ベクトル
$values
 [1] 5.082010125 3.242444357 0.972143003 0.296220616 0.183723802 0.105492588
 [7] 0.069482231 0.040804337 0.004685194 0.002993747

$vectors
              [,1]         [,2]         [,3]         [,4]         [,5]         [,6]
 [1,]  0.295767123 -0.36968439  0.19576528 -0.04636798 -0.45947416 -0.4430828
 [2,] -0.320622346 -0.35106560  0.21773744  0.25344748 -0.09954994 -0.2758407
 [3,]  0.317007066  0.08151896  0.67161335 -0.26049107  0.12136382  0.1105754
 [4,] -0.404902395 -0.14719065 -0.04845855 -0.12678763 -0.49057241  0.5048437
 [5,]  0.292784563  0.25225052 -0.59572756 -0.08998077 -0.08942551 -0.1551038
 [6,] -0.423035736  0.13105592  0.01173140  0.22435679 -0.21049410 -0.1097970
 [7,] -0.116099424  0.50208804  0.23242591 -0.32499549 -0.23263024  0.1842378
 [8,]  0.004891482  0.53295684  0.11006284  0.11905701 -0.42833091 -0.4154770
 [9,]  0.350352254 -0.28167026 -0.16433590 -0.24944893 -0.45577002  0.2262201
[10,]  0.379936774  0.12448481  0.11261775  0.78053172 -0.16114483  0.4082188
             [,7]         [,8]         [,9]         [,10]
 [1,]  0.37046813 -0.355427558 -0.12537732 -0.220561681
 [2,] -0.12828778 -0.008206181  0.31505999  0.678618353
 [3,]  0.08173173  0.301075804 -0.37532331  0.329834356
 [4,]  0.46610554  0.285662073 -0.02422848  0.031511329
 [5,]  0.27896238 -0.012690537 -0.22194288  0.573031579
 [6,] -0.31026888 -0.155758165 -0.75927002 -0.003168112
 [7,] -0.06312723 -0.628746682  0.25088481  0.156440462
 [8,] -0.07072873  0.503104190  0.23128954 -0.148138209
 [9,] -0.65991845  0.102702973  0.02193357  0.057104391
[10,]  0.06159877 -0.133972676  0.02990653  0.054692995

主成分 (j=1,2,3)

                [,1]         [,2]         [,3]
```

```
  Hokkaido  2.7861025  1.89461503 -0.2238884
  Aomori   -0.6914086 -0.05387806 -0.3578183
  Iwate    -2.3299456 -0.30950523 -1.0709220
  Miyagi    0.5848895 -1.47909319 -1.7287915
  Akita    -3.7060117  0.65345189 -0.3730114
...中略...
                 [,1]      [,2]      [,3]
  Kumamoto  -0.8244408  1.054473 0.1318475
  Ooita     -0.2166367  2.406109 0.2644958
  Miyazaki   0.5876683  2.187817 1.1148241
  Kagoshima  0.5257978  4.720755 0.5059443
  Okinawa    4.2572443 -2.458857 1.5793804
累積寄与率
 [1] 0.5082010 0.8324454 0.9296597 0.9592818 0.9776542 0.9882034 0.9951517
 [8] 0.9992321 0.9997006 1.0000000
```



run0092-s12



run0092-s32

- 第３主成分までの累積寄与率は 0.93．３個の主成分だけで，データ行列１０変量の全分散の９３%を表現していることになる．

2.2 r 次元への射影と誤差＊

- r 次元部分空間へデータ行列を射影する．r 個の互いに直交する単位ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r$ とする．

$$\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j, \quad \boldsymbol{V}_r = [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r], \quad \boldsymbol{V}_r'\boldsymbol{V}_r = \boldsymbol{I}_r$$

$$y_{ij} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j, \quad i = 1, \ldots, n,\ j = 1, \ldots, r$$

- 射影誤差は次のように表現される.

$$\begin{aligned}
\text{誤差} &= \sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{x}^{(i)} - \sum_{j=1}^{r} y_{ij}\boldsymbol{v}'_j\|^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{x}^{(i)}(\boldsymbol{I}_p - \boldsymbol{V}_r\boldsymbol{V}'_r)\|^2 \\
&= \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{I}_p - \boldsymbol{V}_r\boldsymbol{V}'_r)^2\boldsymbol{X}') \\
&= \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}' - \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_r\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{X}') \\
&= \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_r) \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p} x_{ij}^2 - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r} y_{ij}^2
\end{aligned}$$

- 誤差最小の r 次元射影

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_r) \to \text{最大}, \quad \text{ただし}\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{V}_r = \boldsymbol{I}_r$$

ラグランジュの未定乗数を $r \times r$ 対称行列 $\boldsymbol{\Lambda}$ として,

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{V}_r, \boldsymbol{\Lambda}) &= \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{v}'_i\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i - \sum_{i=1}^{r}\lambda_{ii}(\boldsymbol{v}'_i\boldsymbol{v}_i - 1) - 2\sum_{i=1}^{r}\sum_{j>i}^{r}\lambda_{ij}\boldsymbol{v}'_i\boldsymbol{v}_j \\
&= \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_r - \boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{V}'_r\boldsymbol{V}_r - \boldsymbol{I}_r)\right)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}_i} = 2\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i - 2\sum_{j=1}^{r}\lambda_{ij}\boldsymbol{v}_j, \quad \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{V}_r} = 2\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_r - 2\boldsymbol{V}_r\boldsymbol{\Lambda}$$

ところで $\boldsymbol{\Lambda}$ の固有ベクトルを並べた $r \times r$ 直交行列 $\boldsymbol{Q}$ を用いると

$$\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$$

そこで $\boldsymbol{V}_r \leftarrow \boldsymbol{V}_r\boldsymbol{Q}$ と置き換えると

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i = \lambda_i\boldsymbol{v}_i, \quad i = 1, \ldots, r$$

$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有ベクトルの任意の組み合わせを $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r$ に用いれば

$$\text{誤差} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}) - (\lambda_1 + \cdots + \lambda_r)$$

は極値を取る．$\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ は対応する固有値である．誤差最小にするには固有値の大きいほうから r 個の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r$ として用いる.

- 以上の議論より，最初の r 個の主成分を用いる主成分分析は誤差最小の r 次元射影を求めていることが分かる.

2.3 主成分得点と主成分負荷

- **主成分得点**
  主成分を標準偏差で割って分散を 1 に標準化する.

$$\boldsymbol{z}_j = \frac{\boldsymbol{y}_j}{\sqrt{\lambda_j}}, \quad j = 1, \ldots, p$$

$$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_p] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}^{(1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}^{(n)} \end{bmatrix}$$

各個体 $\boldsymbol{x}^{(i)}$, $i = 1, \ldots, n$ に対応して $\boldsymbol{z}^{(i)}$ を主成分得点と呼ぶ．行列表現すると，

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}$$

ただし

$$\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \mathrm{diag}(\lambda_1^{-1/2}, \ldots, \lambda_p^{-1/2})$$

- $\boldsymbol{Z}$ の分散共分散行列は $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{I}_p$ である．

$$\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}(\tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y})\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \boldsymbol{I}_p$$

- **主成分負荷**
  データセットの変量 $\boldsymbol{x}_j$ と標準化した主成分 $\boldsymbol{z}_k$ の共分散 $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{x}_j'\boldsymbol{z}_k$ を並べた行列を $\boldsymbol{B}$ とする．

$$\boldsymbol{B} = \tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{Z}, \quad \boldsymbol{B} = [\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_p] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^{(1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}^{(p)} \end{bmatrix}$$

  各変量 $\boldsymbol{x}_j$, $j = 1, \ldots, p$ に対応して $\boldsymbol{b}^{(j)}$ を主成分負荷と呼ぶ．

- $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{I}_p$ であるから $\boldsymbol{B}$ は次式を満たす．

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{B}'$$

  つまり $\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{Z}(\boldsymbol{b}^{(j)\prime})$ と考えると，$\boldsymbol{x}_j$ を目的変数，$\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_p$ を説明変数とした回帰分析の回帰係数が $\boldsymbol{b}^{(j)}$．

- **バイプロット**
  (i) 主成分得点の図と (ii) 主成分負荷の図を並べたもの（もしくは重ねがきした図）．通常，最初の 2 個の主成分に対応して 2 次元で描かれる．つまり，(i) n 個の個体（例：４７都道府県）に対応して $\boldsymbol{z}_1$ を横軸，$\boldsymbol{z}_2$ を縦軸にプロット．(ii) p 個の変量に対応して，$\boldsymbol{b}_1$ を横軸，$\boldsymbol{b}_2$ を縦軸にプロット．

- もし p 次元のバイプロットを描けば，元のデータ行列 $\boldsymbol{X}$ を完全に表現することになる．

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{B}' = \boldsymbol{z}_1\boldsymbol{b}_1' + \cdots + \boldsymbol{z}_p\boldsymbol{b}_p'$$

  であるから，このうち最初の r 個の成分だけを使うと

$$\boldsymbol{X} \approx \boldsymbol{z}_1\boldsymbol{b}_1' + \cdots + \boldsymbol{z}_r\boldsymbol{b}_r'$$

  という近似をしていることになる．たとえば $r = 2$ として 2 次元だけで近似的に $\boldsymbol{X}$ を表す．

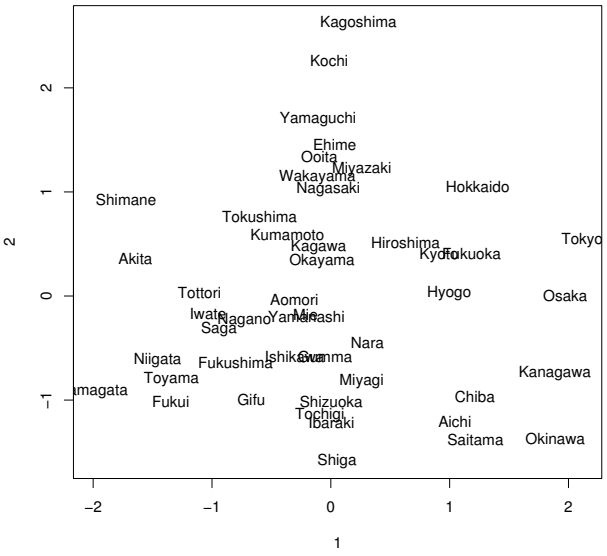
```
# run0093.R
# 主成分分析：主成分得点と主成分負荷
# dat にデータ行列をいれておく
xx <- scale(dat) # 標準化
cv <- var(xx) # 分散共分散行列
ei <- eigen(cv) # 固有値・固有ベクトルの計算
yy <- xx %*% ei$vectors # 主成分
lam2 <- diag(1/sqrt(ei$values)) # Lambda^{-1/2}
zz <- yy %*% lam2 # 主成分得点
n <- nrow(xx)
bb <- crossprod(xx,zz)/(n-1) # =t(xx) %*% zz /(n-1)
cat("主成分 Y (i=1:5, j=1:3)\n");
print(yy[1:5,1:3]);
cat("累積寄与率\n"); print(cumsum(ei$values)/sum(ei$values))
cat("主成分得点 Z (i=1:5, j=1:3)\n");
print(zz[1:5,1:3]);
cat("主成分負荷 B (j=1:3)\n");
print(bb[,1:3]);
plot87(1,2,zz); dev.copy2eps(file="run0093-z12.eps")
plot87(3,2,zz); dev.copy2eps(file="run0093-z32.eps")
plot87(1,2,bb); dev.copy2eps(file="run0093-b12.eps")
plot87(3,2,bb); dev.copy2eps(file="run0093-b32.eps")
plot(xx,zz %*% t(bb)); abline(0,1);
dev.copy2eps(file="run0093-zzbb.eps")
plot(xx,zz[,1:3] %*% t(bb[,1:3])); abline(0,1);
dev.copy2eps(file="run0093-zzbb3.eps")
```

```
> source("run0093.R")
主成分 Y (i=1:5, j=1:3)

                [,1]        [,2]       [,3]
  Hokkaido  2.7861025  1.89461503 -0.2238884
  Aomori   -0.6914086 -0.05387806 -0.3578183
  Iwate    -2.3299456 -0.30950523 -1.0709220
  Miyagi    0.5848895 -1.47909319 -1.7287915
  Akita    -3.7060117  0.65345189 -0.3730114
累積寄与率
 [1] 0.5082010 0.8324454 0.9296597 0.9592818 0.9776542 0.9882034 0.9951517
 [8] 0.9992321 0.9997006 1.0000000
主成分得点 Z (i=1:5, j=1:3)
```

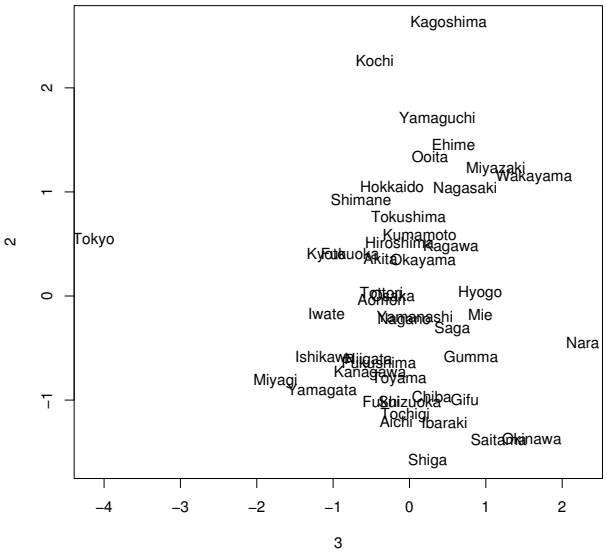
```
                [,1]        [,2]       [,3]
  Hokkaido  1.2358886  1.05216708 -0.2270735
  Aomori   -0.3067023 -0.02992097 -0.3629087
  Iwate    -1.0335418 -0.17188253 -1.0861574
  Miyagi    0.2594514 -0.82140865 -1.7533860
  Akita    -1.6439516  0.36289197 -0.3783180
```

主成分負荷 B (j=1:3)

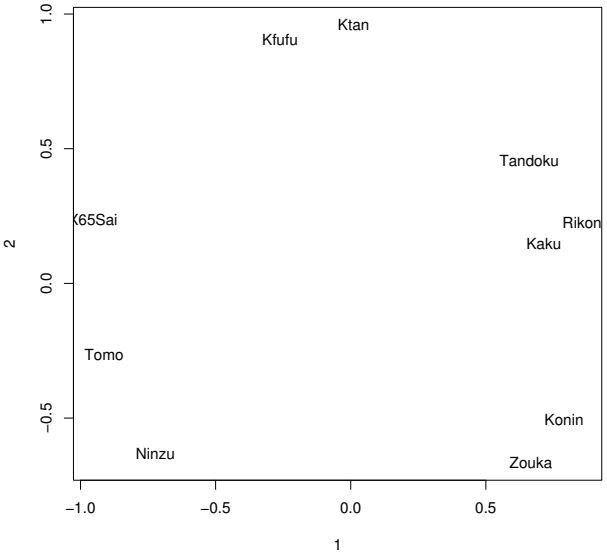
```
                [,1]       [,2]        [,3]
  Zouka    0.66675712 -0.6656829  0.19301931
  Ninzu   -0.72278903 -0.6321564  0.21468326
  Kaku     0.71463899  0.1467895  0.66219271
  Tomo    -0.91278419 -0.2650431 -0.04777883
  Tandoku  0.66003344  0.4542222 -0.58737137
  X65Sai  -0.95366275  0.2359896  0.01156684
  Kfufu   -0.26172658  0.9040993  0.22916570
  Ktan     0.01102702  0.9596841  0.10851900
  Konin    0.78981009 -0.5071977 -0.16203078
  Rikon    0.85650341  0.2241572  0.11103808
> xx[1:5,1:5]
              Zouka       Ninzu       Kaku        Tomo    Tandoku
Hokkaido -0.2197998 -1.70785546  0.7264297 -1.31120683  1.2809468
Aomori   -0.5530447  0.28641054 -0.6776146 -0.04102046 -0.2047404
Iwate    -0.8307487  0.55835591 -1.4150701  0.67831979 -0.1060320
Miyagi    0.5577715  0.01446518 -1.1736808 -0.44605438  0.9367331
Akita    -1.8304833  0.92094973 -1.5014387  0.79658969 -0.9235397
> (zz %*% t(bb))[1:5,1:5]

                Zouka       Ninzu       Kaku        Tomo    Tandoku
  Hokkaido -0.2197998 -1.70785546  0.7264297 -1.31120683  1.2809468
  Aomori   -0.5530447  0.28641054 -0.6776146 -0.04102046 -0.2047404
  Iwate    -0.8307487  0.55835591 -1.4150701  0.67831979 -0.1060320
  Miyagi    0.5577715  0.01446518 -1.1736808 -0.44605438  0.9367331
  Akita    -1.8304833  0.92094973 -1.5014387  0.79658969 -0.9235397
> (zz[,1:3] %*% t(bb[,1:3]))[1:5,1:5]

                Zouka       Ninzu       Kaku        Tomo       Tandoku
  Hokkaido  0.07979833 -1.60716974  0.8872948 -1.39611986  1.427021885
  Aomori   -0.25462645  0.16268536 -0.4638890  0.30522271 -0.002862345
  Iwate    -0.78435141  0.62250946 -1.4830853  1.04085217 -0.122267219
  Miyagi    0.38135141 -0.04469257 -1.0962395  0.06466023  0.828033361
  Akita    -1.41071007  0.87760716 -1.3720826  1.42246661 -0.698016283
```



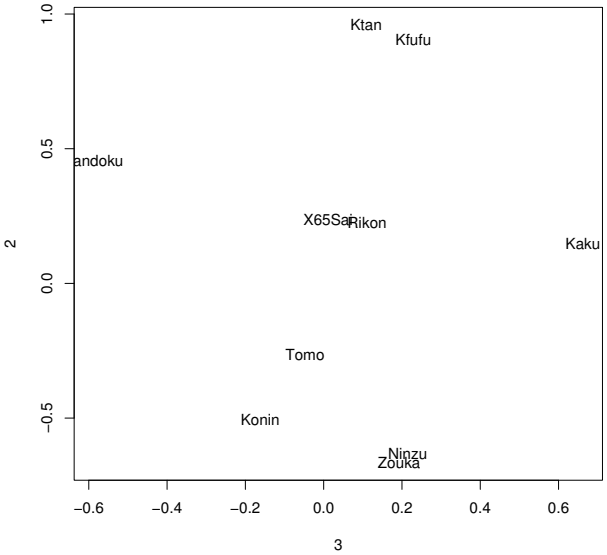
run0093-z12



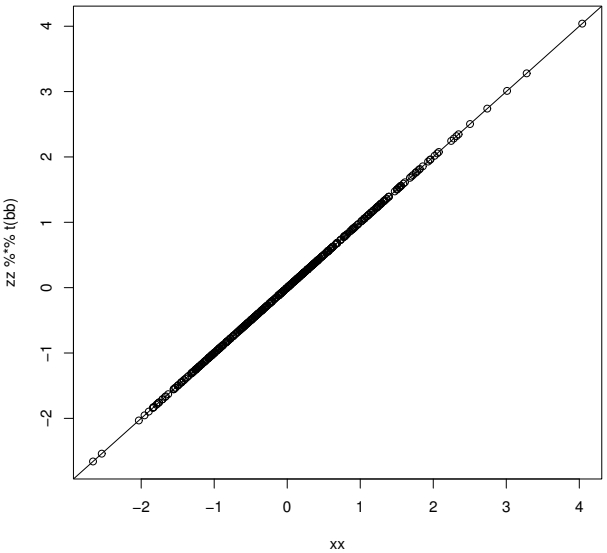
run0093-z32



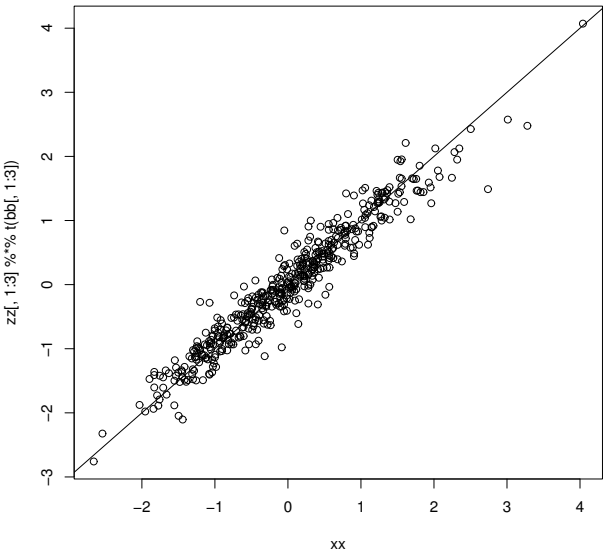
run0093-b12



run0093-b32



run0093-zzbb



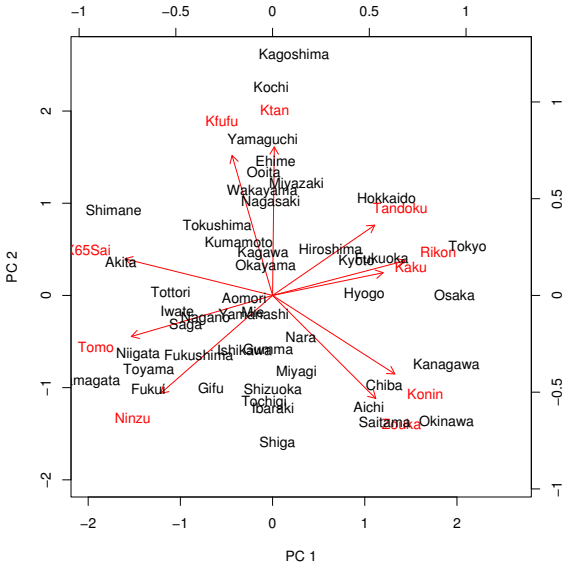
run0093-zzbb3

- z12,z32: 主成分得点のプロット（$\boldsymbol{Z}$ の最初の 3 次元）
- b12,b32: 主成分負荷のプロット（$\boldsymbol{B}$ の最初の 3 次元）
- zzbb: 横軸=$\boldsymbol{X}$ のすべての要素．縦軸=$\boldsymbol{ZB}'$ のすべての要素．当然一致している．
- zzbb3: 横軸=$\boldsymbol{X}$ のすべての要素．縦軸= $\boldsymbol{z}_1\boldsymbol{b}_1' + \cdots + \boldsymbol{z}_r\boldsymbol{b}_r'$ で $r = 3$ としたもの．近似になっている．

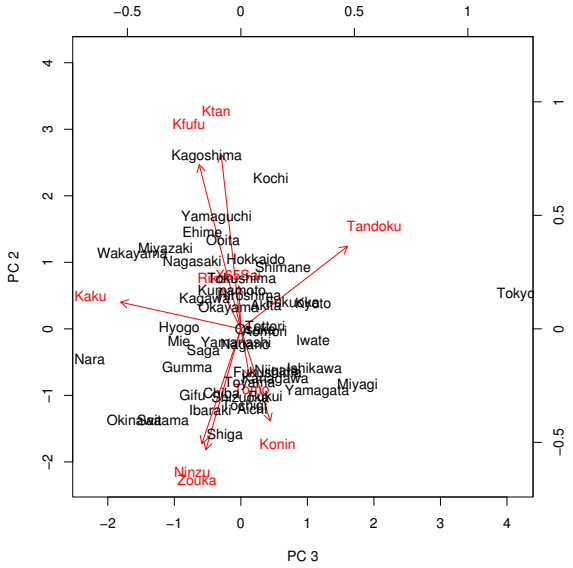
2.4 バイプロット

```
# run0095.R
# 主成分分析：バイプロット
mybiplot <- function(x,y,choices=1:2,scale=c(1,1),
                     col.arg=c(1,2),cex.arg=c(1,1),magnify=1,
                     xadj.arg=c(0.5,0.5),yadj.arg=c(0.5,0.5),
                     xnames=NULL,ynames=NULL) {
  if(length(choices) != 2) stop("choices must be length 2")
  if(length(scale) != 2) stop("scale must be length 2")
#  x <- x[,choices] %*% diag(scale)
#  y <- y[,choices] %*% diag(1/scale)
  x <- x[,choices] * rep(scale,rep(dim(x)[1],2))
  y <- y[,choices] * rep(1/scale,rep(dim(y)[1],2))
  if(is.null(xnames)) nx <- dimnames(x)[[1]]
  else nx <- as.character(xnames)
  if(is.null(ynames)) ny <- dimnames(y)[[1]]
  else ny <- as.character(ynames)
  if(is.null(dimnames(x)[[2]])) nd <- paste("PC",choices)
  else nd <- dimnames(x)[[2]]
  rx <- range(x); ry <- range(y)
  oldpar <- par(pty="s")
  a <- min(rx/ry); yy <- y*a
  plot(x,xlim=rx*magnify,ylim=rx*magnify,type="n",xlab=nd[1],ylab=nd[2])
  ly <- pretty(rx/a)
  ly[abs(ly) < 1e-10] <- 0
  axis(3,at = ly*a ,labels = ly)
  axis(4,at = ly*a ,labels = ly)
  text(yy,ny,col=col.arg[2],cex=cex.arg[2],adj=yadj.arg)
  arrows(0,0,yy[,1]*0.8,yy[,2]*0.8,col=col.arg[2],length=0.1)
  text(x,nx,col=col.arg[1],cex=cex.arg[1],adj=yadj.arg)
  par(oldpar)
  invisible(list(x=x,y=y))
}
```

```
mybiplot(zz,bb); dev.copy2eps(file="run0095-b12.eps")
mybiplot(zz,bb,choices=3:2,scale=c(-1,1));
dev.copy2eps(file="run0095-b32.eps")
```



run0095-b12



run0095-b32

- 主成分得点と主成分負荷のプロットを重ね描きした.（最初の 3 次元）
- PC1 都市型 vs 農村型？
  ＋離婚, ＋核家族, ＋単独, ＋結婚, ＋自然増加
  － 65 歳以上, －共働き, －人数
- PC2 高齢化?
  ＋高齢単身, ＋高齢夫婦, －人数, －自然増加, －結婚
- PC3 核家族?
  ＋核家族, －単独

2.5 princomp 関数の利用

```
# run0096.R
# 主成分分析：princomp の利用
# dat にデータ行列をいれておく
cat("中心化だけの場合\n")
a <- princomp(dat)
print(summary(a))
biplot(a); dev.copy2eps(file="run0096-b1.eps")
cat("標準化した場合\n")
a <- princomp(dat,cor=T)
```

```
print(summary(a))
biplot(a); dev.copy2eps(file="run0096-b2.eps")
```

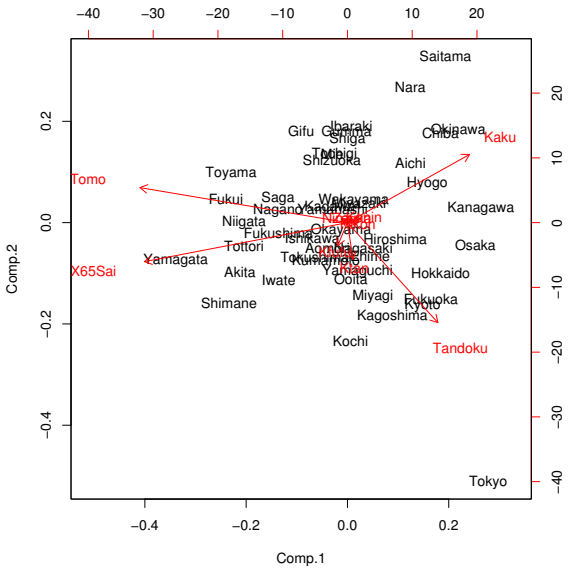
```
> source("run0096.R")
```

中心化だけの場合

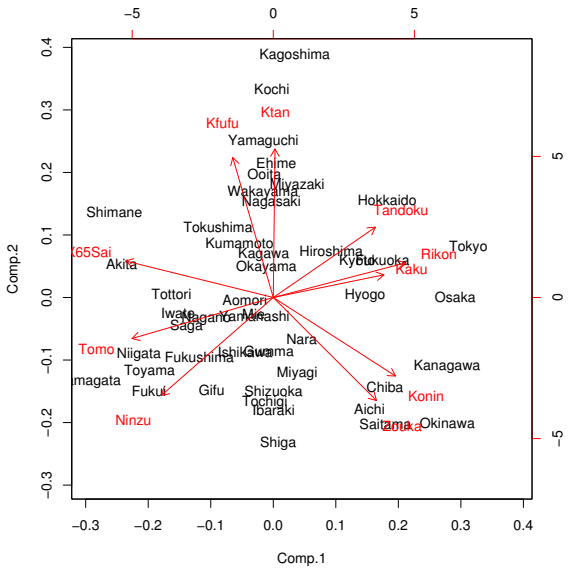
```
Importance of components:
                          Comp.1    Comp.2    Comp.3    Comp.4      Comp.5
Standard deviation     9.244846 3.9138023 3.5816103 1.6736088 0.480409023
Proportion of Variance 0.731902 0.1311751 0.1098526 0.0239862 0.001976405
Cumulative Proportion  0.731902 0.8630771 0.9729296 0.9969158 0.998892254
                             Comp.6       Comp.7       Comp.8       Comp.9
Standard deviation     0.2511406295 0.2109142320 0.1324913693 6.337712e-02
Proportion of Variance 0.0005401166 0.0003809477 0.0001503241 3.439684e-05
Cumulative Proportion  0.9994323705 0.9998133182 0.9999636423 9.999980e-01
                            Comp.10
Standard deviation     1.513181e-02
Proportion of Variance 1.960810e-06
Cumulative Proportion  1.000000e+00
```

標準化した場合

```
Importance of components:
                          Comp.1    Comp.2    Comp.3     Comp.4     Comp.5
Standard deviation     2.254331 1.8006789 0.9859731 0.54426153 0.42863015
Proportion of Variance 0.508201 0.3242444 0.0972143 0.02962206 0.01837238
Cumulative Proportion  0.508201 0.8324454 0.9296597 0.95928181 0.97765419
                             Comp.6      Comp.7      Comp.8       Comp.9
Standard deviation     0.32479623 0.263594823 0.202000833 0.0684484764
Proportion of Variance 0.01054926 0.006948223 0.004080434 0.0004685194
Cumulative Proportion  0.98820345 0.995151672 0.999232106 0.9997006253
                            Comp.10
Standard deviation     0.0547151456
Proportion of Variance 0.0002993747
Cumulative Proportion  1.0000000000
```



run0096-b1



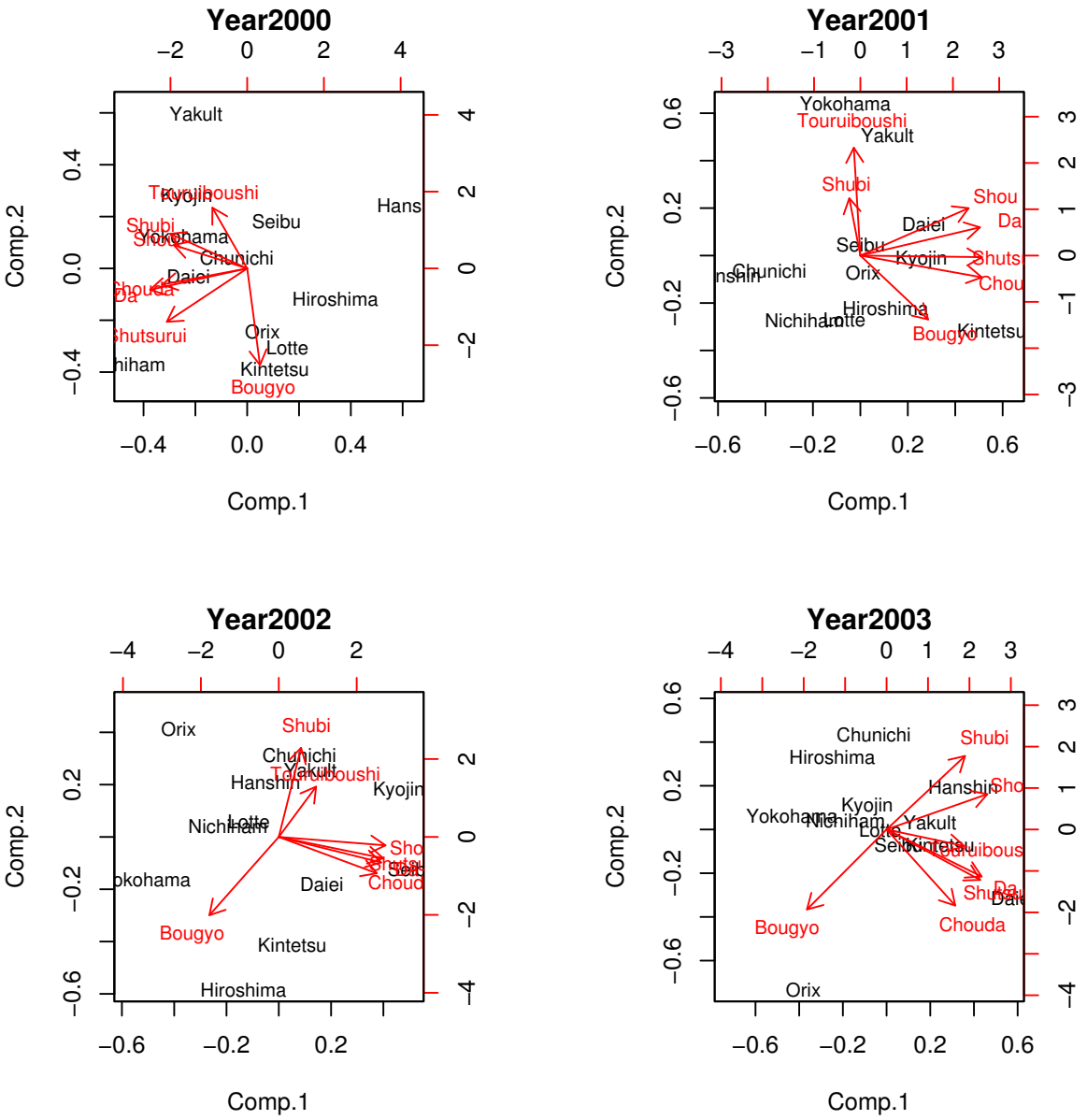
run0096-b2

- 左図：princomp() では，データ行列の分散行列から主成分を求める．したがって,「中心化」だけをしたことになる．
- 右図：princomp(,cor=T) とすると，データ行列の相関行列から主成分を求める．したがって,「標準化」したことになる．
- summary() では，寄与率，累積寄与率を表示する．

2.6 プロ野球データの分析

```
# run0097.R
# 主成分分析：プロ野球データ
dageki <- read.table("teamdageki.txt",header=T,sep="\t") # チーム打撃データ
toushu <- read.table("teamtoushu.txt",header=T,sep="\t") # チーム投手データ
x0 <- data.frame(dageki,toushu) # 上記二つをまとめる
team <- c("Kyojin", "Yakult", "Yokohama", "Chunichi", "Hanshin",
 "Hiroshima", "Lotte", "Nichiham", "Seibu", "Kintetsu", "Orix",
 "Daiei","Taiyo")
names(team) <- c("巨人", "ヤクルト", "横浜", "中日", "阪神",
  "広島", "ロッテ", "日本ハム", "西武", "近鉄", "オリックス",
  "ダイエー","大洋")
item <- c("Daritsu","Choudaritsu","Shutsuruiritsu","Shubiritsu",
 "Touruiboushiritsu","Shouritsu","Bougyoritsu") # 分析する変数
na <- substr(item,1,nchar(item)-5) # 名前から"ritsu"を省略する
names(na) <- item
year <- 2000:2003 # 分析するシーズン
par(mfrow=c(2,2),pty="s") # 2 x 2の４枚のグラフ
x <- list(); pc <- list();
```

```
for(i in year) {
  j <- paste("Year",i,sep="");
  x[[j]] <- k <- x0[x0$Year == i,c("Team",item)];
  x[[j]]$Team <- NULL;
  rownames(x[[j]]) <- team[as.character(k$Team)];
  colnames(x[[j]]) <- na[colnames(x[[j]])];
  pc[[j]] <- princomp(x[[j]],cor=T);
  biplot(pc[[j]],main=paste("Year =",i))} # まず一度バイプロットを描く
ex <- list(Year2000=c(-1,1),Year2001=c(-1,-1),
   Year2002=c(-1,1),Year2003=c(-1,1)) # 軸の符号をそろえる
for(i in year) {
  j <- paste("Year",i,sep="");
  pc[[j]]$scores[,1:2] <-
    pc[[j]]$scores[,1:2] %*% diag(ex[[j]]);
  pc[[j]]$loadings[,1:2] <-
    pc[[j]]$loadings[,1:2] %*% diag(ex[[j]]);
  biplot(pc[[j]],main=j)} # もう一度バイプロットを描きなおす
dev.copy2eps(file="run0097.eps") # EPS ファイルに書き出す.
par(mfrow=c(1,1),pty="s")
```



run0097

- プロ野球１２球団の主成分分析．2000 年から 2003 年シーズンのバイプロットを示してある．分析に用いた変数は打率 (Da)，長打率 (Chouda)，出塁率 (Shutsurui)，守備率 (Shubi)，盗塁防止率 (Touruiboshi)，勝率 (Shou)，防御率 (Bougyo)．
- リーグ優勝チーム：2000 年=巨人，ダイエー．2001 年=ヤクルト，近鉄．2002 年=巨人，西武．2003 年=阪神，ダイエー．
- データファイルの出典は「こじきろ プロ野球個人記録」(`http://kamakura.cool.ne.jp/kojikiro/index.htm`)

2.7 特異値分解 (SVD)

- データ行列を特異値分解 (singular value decomposition) する.

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{\left.\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}\right\} n}_{p} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_p]$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}' \\ &= d_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1' + \cdots + d_p\boldsymbol{u}_p\boldsymbol{v}_p' \end{aligned}$$

$$\underset{n \times p}{\boldsymbol{U}} = [\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_p], \quad \underset{p \times p}{\boldsymbol{V}} = [\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_p]$$

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_p \end{bmatrix}, \quad d_1 \geq \cdots \geq d_p \geq 0$$

- データ行列の特異値分解をすることは，主成分分析の計算をすることにほぼ等価．ただし $\boldsymbol{X}$ の中心化または標準化をあらかじめしておく.

- 分散共分散行列は

$$\boldsymbol{\Sigma} = \tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{V}'$$

- 固有ベクトルは $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_p$，固有値は

$$\lambda_1 = \tfrac{1}{n-1}d_1^2, \dots, \lambda_p = \tfrac{1}{n-1}d_p^2$$

- 主成分 $\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j$, $j = 1, \dots, p$ をならべて

$$\boldsymbol{Y} = [\boldsymbol{y}_1, \dots, \boldsymbol{y}_p] = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}$$

- 主成分得点をならべた行列は，$\boldsymbol{\Lambda} = \tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{D}^2$ とおいて

$$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1, \dots, \boldsymbol{z}_p] = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \sqrt{n-1}\,\boldsymbol{U}$$

- 主成分負荷をならべた行列は

$$\boldsymbol{B} = \tfrac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{Z} = \tfrac{1}{\sqrt{n-1}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}$$

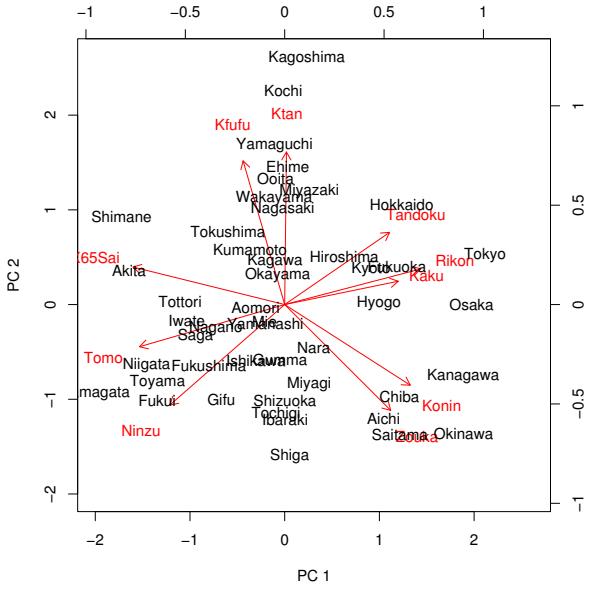
```
# run0098.R
# 主成分分析：特異値分解
# dat にデータ行列をいれておく
xx <- scale(dat) # 標準化
a <- svd(xx) # 特異値分解
rownames(a$u) <- rownames(xx)
rownames(a$v) <- colnames(xx)
cat("特異値分解\n")
print(names(a)) # 要素
cat("d の次元", length(a$d),"\n")
cat("u の次元", dim(a$u),"\n")
cat("v の次元", dim(a$v),"\n")
cat("xx[1:5,1:5]\n")
print(xx[1:5,1:5])
cat("(a$u %*% diag(a$d) %*% t(a$v))[1:5,1:5]\n")
print((a$u %*% diag(a$d) %*% t(a$v))[1:5,1:5])
cat("累積寄与率 cumsum(a$d^2)/sum(a$d^2)\n")
print(cumsum(a$d^2)/sum(a$d^2))
n <- nrow(xx)
zz <- sqrt(n-1)*a$u # 主成分得点
bb <- (1/sqrt(n-1))* a$v %*% diag(a$d) # 主成分負荷
mybiplot(zz,bb); dev.copy2eps(file="run0098-b12.eps")
```

```
> source("run0098.R")
特異値分解
[1] "d" "u" "v"
d の次元 10
u の次元 47 10
v の次元 10 10
xx[1:5,1:5]
              Zouka       Ninzu       Kaku        Tomo    Tandoku
Hokkaido -0.2197998 -1.70785546  0.7264297 -1.31120683  1.2809468
Aomori   -0.5530447  0.28641054 -0.6776146 -0.04102046 -0.2047404
Iwate    -0.8307487  0.55835591 -1.4150701  0.67831979 -0.1060320
Miyagi    0.5577715  0.01446518 -1.1736808 -0.44605438  0.9367331
Akita    -1.8304833  0.92094973 -1.5014387  0.79658969 -0.9235397
(a$u %*% diag(a$d) %*% t(a$v))[1:5,1:5]

               Zouka       Ninzu       Kaku        Tomo    Tandoku
  Hokkaido -0.2197998 -1.70785546  0.7264297 -1.31120683  1.2809468
  Aomori   -0.5530447  0.28641054 -0.6776146 -0.04102046 -0.2047404
```

```
  Iwate    -0.8307487  0.55835591 -1.4150701  0.67831979 -0.1060320
  Miyagi    0.5577715  0.01446518 -1.1736808 -0.44605438  0.9367331
  Akita    -1.8304833  0.92094973 -1.5014387  0.79658969 -0.9235397
```

累積寄与率 `cumsum(a$d^2)/sum(a$d^2)`

```
 [1] 0.5082010 0.8324454 0.9296597 0.9592818 0.9776542 0.9882034 0.9951517
 [8] 0.9992321 0.9997006 1.0000000
```



run0098-b12

3 課題

3.1 課題 9-1

中心化または標準化されたデータ行列を入力とし，以下の量をリスト形式で返す関数を作成せよ．

- `lambda`: データ行列の分散共分散行列 $\frac{1}{n-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ の固有値を並べたベクトル．
- `z`: 主成分得点の行列 $\boldsymbol{Z}$．
- `b`: 主成分負荷の行列 $\boldsymbol{B}$．

3.2 課題 9-2

上の課題で作成した関数を用いて，自分で選んだデータ行列の主成分分析を行う．累積寄与率とバイプロットを示し，各軸の解釈を行え．バイプロットには `mybiplot` 関数 (run0095.R) を利用してよい．

3.3 課題 9-3

上の課題で行った主成分分析の結果がデータのバラツキによってどれほど影響を受けるのかをブートストラップ法で調べよ．