数理統計 補助資料
～多変量解析のための固有値分解～

2024年度2学期:　　月曜1限, 水曜3限

担当教員:　　　　石垣　司

多変量解析

複数の変数から発生したデータを利用して, 変数間の関係性を分析する手法の総称

- **可視化: データが含む情報を効率的に提示する手段**
- **予測・分類: 未知データの予測や分類**
- **仮説検証: データと計量モデルを用いて仮説の正しさを検証**
- **発見: データ中に存在する(かもしれない)パターンを発見**



本授業で扱う手法

- **線形重回帰分析, 主成分分析, 線形判別分析, ベイジアンネットワークなど**

復習: 固有値と固有ベクトル

固有値問題

- $N \times N$ **の正方行列** A **に対して, 方向を変化させないベクトルの組** $\{\boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_N\}$ **とスカラーの組** $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$
$$A\boldsymbol{p}_i = \lambda_i \boldsymbol{p}_i$$
を求める問題
- λ_i **を** A **の固有値,** $\boldsymbol{p}_i$ **を** λ_i **に対する固有ベクトルと呼ぶ**

固有方程式 $|A - \lambda I| = 0$ **の解は固有値となる**

- **固有値が求まれば, それに対応する固有ベクトルも求まる**

問題: 次の行列の固有値と固有ベクトルを求めなさい

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

2次形式と行列による表現

2次形式: 変数の2次の項のみで構成される多項式

- M **個の変数:** $\boldsymbol{x} = [x_1 \ \ldots \ x_M]^T$
- $M \times M$ **個の係数:** $A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & \cdots & a_{MM} \end{bmatrix}$
- **多項式による表現:** $f(x_1, \ldots, x_M) = \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} a_{ij} x_i x_j = a_{11}x_1^2 +, \ldots, + a_{MM}x_M^2 +, \ldots, + 2a_{12}x_1x_2 +, \ldots, + 2a_{(M-1)M}x_{M-1}x_M$
- **例:** $f(x, y) = ax^2 + 2bxy + cy^2$

2次形式の行列表現 $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$

$$f(x, y) = ax^2 + 2bxy + cy^2 = [x \quad y] \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$$

対称行列と2次形式

対称行列： $A = A^T$ **を満たす正方行列**

- **例：** $A = \begin{bmatrix} x & a & b \\ a & y & c \\ b & c & z \end{bmatrix}$
- **特に,** $A \in \mathbb{R}^{M \times M}$ **のとき実対称行列とよぶ**

定理：行列 A **を実対称行列とすると任意の2次形式は** $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ **と表現でき, その実対称行列** A **はただ1つに定まる**

定理：実対称行列の異なる固有値に対する固有ベクトルは直交する

2次形式と行列の定値性

零ベクトル以外の任意の $\boldsymbol{x}$ **について次の条件を満たすとき, 対称行列** A **を次のように呼ぶ**

- $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$ **のとき,** A **は正定値行列**
- $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$ **のとき,** A **は半正定値行列**
- $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \leq 0$ **のとき,** A **は半負定値行列**
- $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} < 0$ **のとき,** A **は負定値行列**

定理：対称行列 A **が半正定値行列のとき,** A **のすべての固有値は非負の値をとる**

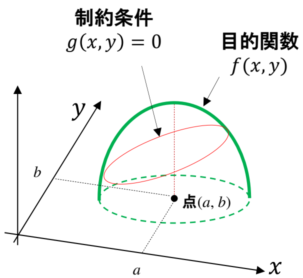
- **正定値行列のときは, すべての固有値は正の値**
- **半負定値行列のときは, すべての固有値は非正の値**
- **負定値行列のときは, すべての固有値は負の値**

制約付き最適化問題の性質

制約無し最適化問題の解との関係

制約付き最大化問題の解 $f(a_1, \cdots, a_N)$
制約無し最大化問題の解 $f(b_1, \cdots, b_N)$

- $f(a_1, \cdots, a_N) \leq f(b_1, \cdots, b_N)$

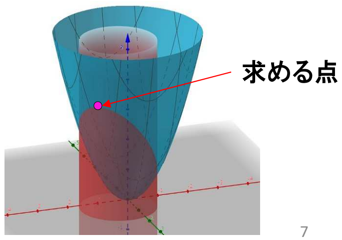


制約付き最適化問題では
点(a,b)が最適点ではない

具体例

- $\max_{x,y} \; x^2 + y^2$
- $\mathrm{s.t.}\; x^2 + y^2 - x - y - 1 = 0$

制約無しの場合 $x^2 + y^2$ **の最大化は** ∞
制約付きの場合は解あり



ラグランジュ未定乗数法

目的関数 $f(x_1, \cdots, x_N)$
制約条件 $g(x_1, \cdots, x_N) = 0$

ラグランジュ関数 $L = f(x_1, \cdots, x_N) - \lambda g(x_1, \cdots, x_N)$

- **ラグランジュ乗数：** $\lambda \in \mathbb{R}$
- f, g **は一階微分可能**
- $\frac{\partial L(a_1, \cdots, a_N)}{\partial x_i}$ **は** L **を** x_i **で偏微分し, その後** $(a_1, \cdots, a_N)$ **を代入を表記**

制約条件を満たす $f(x_1, \cdots, x_N)$ **が点** $(a_1, \cdots, a_N)$ **で極値をとり,**
かつ, $\left[\frac{\partial g(a_1, \cdots, a_N)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial g(a_1, \cdots, a_N)}{\partial x_N}\right]^T \neq \boldsymbol{0}$ **ならば**

$$\Rightarrow \frac{\partial L(a_1, \cdots, a_N)}{\partial x_1} =, \cdots, \frac{\partial L(a_1, \cdots, a_N)}{\partial x_N} = \frac{\partial L(a_1, \cdots, a_N)}{\partial \lambda} = 0$$

$f(x_1, \cdots, x_N)$ **が制約条件の下で極値となるための必要条件**

2次形式の最適化問題と固有値問題

目的関数が2次形式の制約付き最適化問題

目的関数 $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$

制約条件 $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} = 1$

– **固有値問題に帰着する** check!

定理：A が半正定値対称行列のとき, 最も大きな（小さな）値をもつ固有値に対する固有ベクトルが $x^T A x$ を最大（最小）とし, その固有値の値は $x^T A x$ に一致する

分散共分散行列

#メモ 図のデータは分散共分散行列 V の多変量正規分布から1000個の乱数を発生

分散共分散行列 V

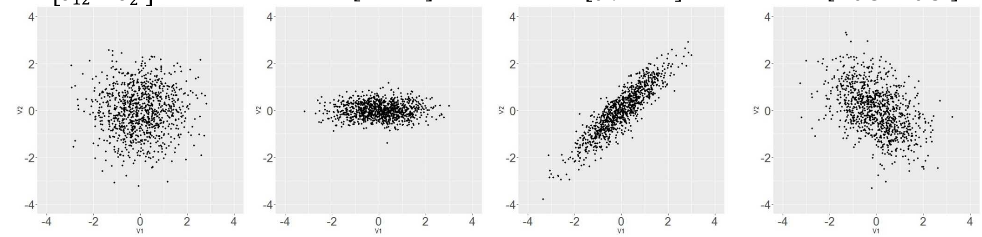
– $x_1, \ldots, x_M$ **を確率変数, 期待値を E で表すとき、**

$$V = \begin{bmatrix} E[(x_1 - E[x_1])(x_1 - E[x_1])] & \cdots & E[(x_M - E[x_M])(x_1 - E[x_1])] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E[(x_M - E[x_M])(x_1 - E[x_1])] & \cdots & E[(x_M - E[x_M])(x_M - E[x_M])] \end{bmatrix}$$

対角成分は各 x_i の分散(σ_i^2)

対角成分以外の要素は各 x_i と x_j の共分散(σ_{ij})（変数間の線形関係の強さを表す）

$V = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & 0.9 \\ 0.9 & 1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$

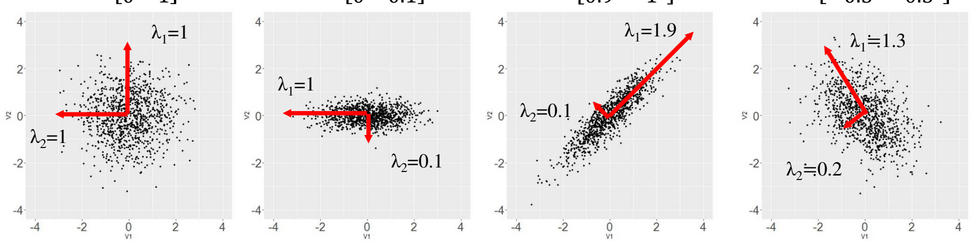


分散共分散行列と固有値問題

分散共分散行列 V は半正定値対称行列

– **各固有ベクトルは直交する**

$V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & 0.9 \\ 0.9 & 1 \end{bmatrix}$ $V = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$



$\boldsymbol{p}_1 = k\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{p}_2 = k\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{p}_1 = k\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}, \boldsymbol{p}_2 = k\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{p}_1 = k\begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.7 \end{bmatrix}, \boldsymbol{p}_2 = k\begin{bmatrix} -0.7 \\ 0.7 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{p}_1 = k\begin{bmatrix} -0.85 \\ 0.53 \end{bmatrix}, \boldsymbol{p}_2 = k\begin{bmatrix} -0.53 \\ -0.85 \end{bmatrix}$

– **V の最大固有値に対応する固有ベクトルは, データと直線のズレの2乗の期待値を最小にする直線と同じ方向を向く**

演習問題

1. **対称行列 $A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$ に関する次の2次形式の制約付き最適化問題を解き, $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ を最大化するベクトル $\boldsymbol{x}_1$ と最小化するベクトル $\boldsymbol{x}_2$ をそれぞれ求めなさい。**

– **目的関数** $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$

– **制約条件** $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} = 1$