応用計量分析２（第4回）

線形代数

担当教員: 梶野 洸（かじの ひろし）

本日の目標

- 線形代数を思い出す
- Python で線形代数の数値計算をやる
- 主成分分析（PCA）を実装する

線形代数の登場人物

- ベクトル $x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$
- 行列 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- リストで書けばいい？

In [2]:

```
x = [1, 0] # x をリストで書いてみた
#print(x)
A = [[1, 0], [0, 1]]
#print(A)
print(x + x) # x + x は、ベクトルでは [2, 0] になってほしいが...
```

```
[1, 0, 1, 0]
```

In [3]:

```
# ベクトルどうしの足し算を関数として定義する必要がある
def add_vectors(x, y):
    z = []
    for i in range(len(x)):
        z.append(x[i] + y[i])
    return z
add_vectors(x, x)
```

Out[3]:

```
[2, 0]
```

線形代数で使う計算

色々あるので全部書くのはめんどくさい…

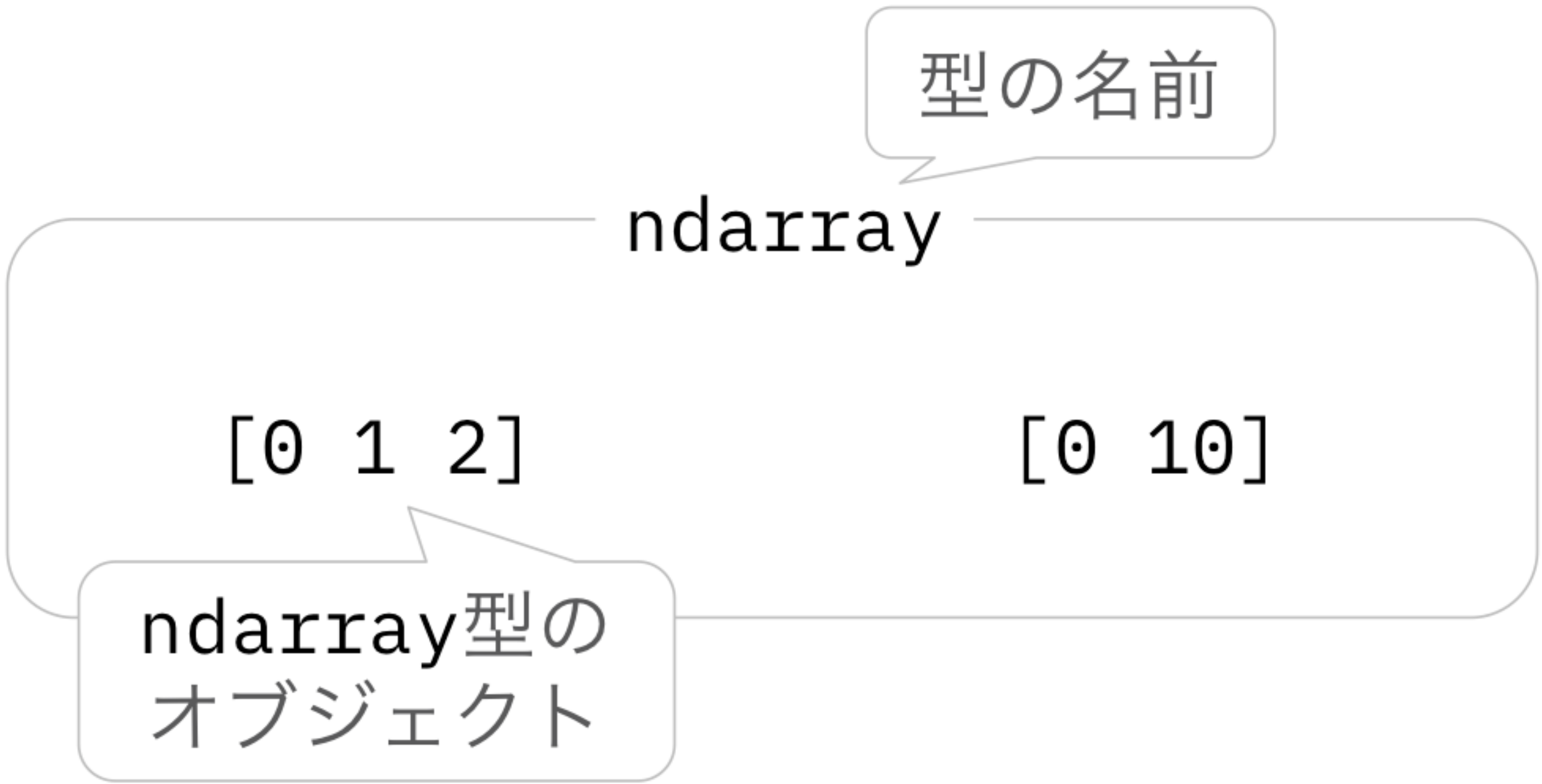
- ベクトル/行列どうしの足し算引き算
- 行列とベクトルの積、行列どうしの積
- ノルム、内積などなど

`numpy` 使う

- 基本的な線形代数の計算が実装されているライブラリ
- リストではなく `numpy.ndarray` というオブジェクトでベクトルを定義する
    - リストどうしの足し算だとリストの連結になってしまう
    - `numpy.ndarray` どうしの足し算だとベクトルの足し算となる！

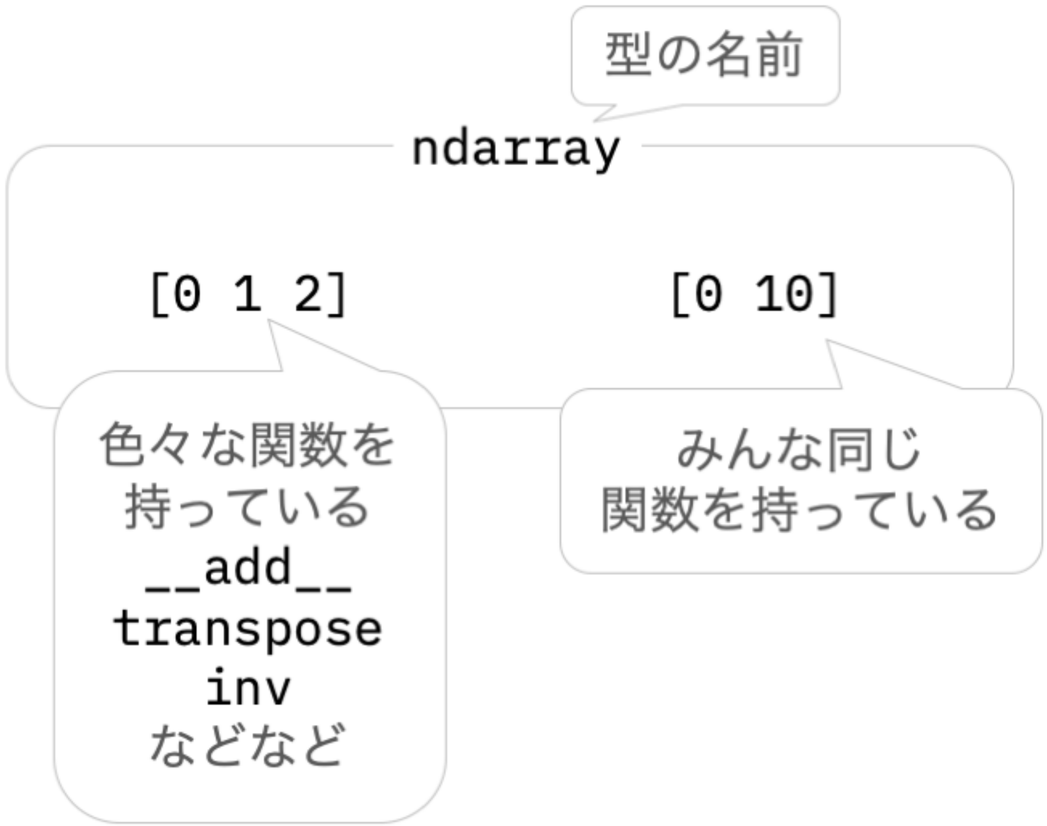
オブジェクト？ `numpy.ndarray`？

- 全てのものはオブジェクトと呼ばれる
    - `1`, `[1,0,3]`, `'hello world'` など
- 数字, 文字列などは、オブジェクトの「型」と呼ばれる
    - 例1. `1` の型は、数字
        - `2` の型も数字なので、 `1` と `2` は同じ型
    - 例2. `[1,0,3]` の型は、リスト
    - `numpy.ndarray` も型
    - オブジェクトの「種類」と理解できる
    - `type` で型を調べられる


型の名前
ndarray
[0 1 2]
[0 10]
ndarray型の
オブジェクト

In [4]:
```python
type(1.0)
```
Out[4]:
```
float
```
In [5]:
```python
type('1.0')
```
Out[5]:
```
str
```
In [6]:
```python
type([1,0])
```
Out[6]:
```
list
```

- それぞれの型には特有の関数がある
    - <オブジェクト>.<関数名>(<引数>) と書くのが基本
    - 読み方: <オブジェクト> に、そのオブジェクトに対して定義されている <関数名> を適用する。その時の引数は <引数> で指定する
    - 別の読み方: <オブジェクト> の中の <関数名> を実行する。その時の引数は <引数> で指定する
    - `A.B` は、 `A` の中の `B` という意味合いで広く使われる
        - `A` がオブジェクトではないこともあるし、 `B` が関数でないこともある
    - 何か値が返ってくる場合もあるし、オブジェクトが変更されるだけで何も返ってこない場合もある


型の名前
ndarray
[0 1 2]
[0 10]
色々な関数を
持っている
__add__
transpose
inv
などなど
みんな同じ
関数を持っている

In [7]:
```
x = [1, 0] # x にリストを入れる
x.append(3) # リストには `append` という関数が用意されている。引数のオブジェクトを末尾に付け足す機能
# x というオブジェクトに対して、 `append` という関数を適用する。その時に引数として 3 を取る
y = [1, 1, 'hello']
y.append(3)
print(x, y)
```

```
[1, 0, 3] [1, 1, 'hello', 3]
```

In [8]:
```
x = [1, 0]
print(x + x) # 足し算も、リスト用に特別に用意されている
print(x.__add__(x)) # 上の書き方っぽくするとこう書ける
# x というオブジェクトに対して、 `__add__` という関数を適用する。その時に引数として x を取る
```

```
[1, 0, 1, 0]
[1, 0, 1, 0]
```

ここまで踏まえた上で numpy を使ってみる

- `numpy.ndarray` 型のオブジェクトを作りたい
  - まず `numpy` を使えるようにしないといけない
    - 標準ライブラリでないのでそのままでは使えないことがある
    - 今回はインストールは不要（repl.it に入っている）
  - `numpy.array(<リスト>)` を実行すると <リスト> を `numpy.ndarray` に変換したものが返ってくる
    - `numpy` の中の `array` という関数を実行している
    - `numpy` はライブラリ

In [9]:

```
import numpy # numpy というライブラリを使うという宣言
x = numpy.array([1, 0]) # numpy.array という関数を使う。リストを入力するとベクトルを出力する（ベクトルは色々線形計算が定義されている）
print(x)
print(type(x))
print(type([1, 0]))
```

```
[1 0]
<class 'numpy.ndarray'>
<class 'list'>
```

In [10]:

```
import numpy as np # numpy を使いたいけど、 numpy という名前だと長いので np という短い名前で呼びたい
x = np.array([1, 0])
print(x)
```

```
[1 0]
```

ベクトル

$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ とする

In [11]:

```
import numpy as np
x = np.array([1.0, 0])
y = np.array([0, 1.0])
print(x, y)
```

```
[1. 0.] [0. 1.]
```

- ベクトルのスカラー倍: $3x$

In [12]:
```
x = np.array([1.0, 0.0])
print(3.0 * x) # 実数との掛け算も自然に定義されている
```

```
[3. 0.]
```

- ベクトル同士の足し算・引き算: $x + y, x - y$
- より一般的に線形結合: $3x - 10y$

In [13]:
```
x = np.array([1.0, 0])
y = np.array([0, 1.0])
# ベクトル演算が自然に定義されている
print(x + y)
print(x - y)
print(3 * x - 10 * y)
```

```
[1. 1.]
[ 1. -1.]
[  3. -10.]
```

- 内積: $x \cdot y$, $(3x - y) \cdot (x + 2y)$

In [14]:
```
x = np.array([1.0, 0.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(x @ y)
print((3 * x - y) @ (x + 2 * y))
print(np.dot(x, y)) # 関数の形で書くこともできる
```

```
0.0
1.0
0.0
```

※内積は、2つベクトルを受け取って、1つのスカラーを返す**関数**としても書ける

- ノルム: $\|2x - y\|_2$

In [15]:
```
x = np.array([1.0, 0.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(((2 * x - y) @ (2 * x - y)) ** (0.5)) # 内積を使って計算した場合
print(np.linalg.norm(2 * x - y)) # numpyの関数を使って計算した場合
```

```
2.23606797749979
2.23606797749979
```

- 要素積（アダマール積）: $x \circ y$

各次元で積を取る演算

In [16]:
```
x = np.array([1.0, 0.0])
y = np.array([0, 1.0])
print(x * y)
```

```
[0. 0.]
```

In [17]:

```
x = np.array([0, 1, 2, 3, 4])
print(x[1]) # 1 番目の要素
print(x[0:2]) # 0 から2番目の要素（2番目は含まない）
print(x[-1]) # 一番最後の要素
print(x[-3:-1]) # 最後から3番目〜1番目の要素（-1番目を含まない）
print(x[-3:]) # 最後から3番目〜最後の要素
```

```
1
[0 1]
4
[2 3]
[2 3 4]
```

ここまでのまとめ

- ベクトルはnumpyの `ndarray` というオブジェクトで定義する
- 普通の数値と同じような演算ができる
- 内積やノルムなど、線形代数特有の計算の関数もある
    - 内積: `np.dot`, `@`
    - ノルム: `np.linalg.norm`
    - アダマール積: `*`
- 構成要素の取り出し方は色々ある

想定QA

Q. 欲しい関数があるかどうか調べたい

A. ググるかライブラリのAPIを見る（numpyは[ここ (https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/)](https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/)）

- "numpy <ほしい機能>" みたいにググる
    - "numpy 内積" とか "numpy inner product" とか
    - 基本的には公式ドキュメントがもっとも正しいはず
    - プログラミングには英語は必須

Q. `np.dot` とか `np.linalg.norm` とかなんやねん

A. ライブラリは階層構造になっている。

- `np.dot` は、`numpy` (`np`と書いてる)直下に定義された `dot` という関数、
- `np.linalg.norm` は、`numpy` の下の `linalg` (linear algebra; 線形代数)という線形代数の関数をまとめた集まりのなかの `norm` という関数と解釈する

演習4.1

1. `input_list` を入力とし、それを `numpy.ndarray` に変換して出力する関数 `list2ndarray` を実装せよ
    - `input_list` はリスト型のオブジェクトで、各要素は `int` または `float` 型と仮定する
2. `x_array`, `y_array` という二つの `numpy.ndarray` を入力とし、 `x_array` と `y_array` の差のl2ノルムを出力する関数 `dist` を実装せよ
    - `x_array`, `y_array` は `numpy.ndarray` 型のオブジェクトで、同じ系列長であると仮定する
3. `x_array` を入力とし、その一番はじめの要素と最後の要素を取り除いた `numpy.ndarray` を出力する関数 `extract` を実装せよ
    - `x_array` は `numpy.ndarray` 型のオブジェクトで系列長は3以上だと仮定する
4. `x_array` と `idx` を入力とし、`x_array` の `idx` 番目の要素を 0 に書き換える関数 `drop` を実装せよ
    - `x_array` は `numpy.ndarray` 型のオブジェクトであると仮定し、`x_array` の系列長を L とする
    - `idx` は `int` 型のオブジェクトでかつ 0 以上 L - 1 以下の値をとると仮定する

行列

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

In [18]:

```
# np.array にリストのリストを渡すと行列
A = np.array([[1.0, 1.0],
                      [0.0, 2.0]])
print(A)
type(A)
```

```
[[1. 1.]
 [0. 2.]]
```

Out[18]:

```
numpy.ndarray
```

行列とベクトルの積

Ax

$x^\top A$

In [19]:
```
x = np.array([1, 0])
print(A @ x)
print(x @ A)
```

```
[1. 0.]
[1. 1.]
```

In [20]:
```
print(A @ np.array([1,2,3,4])) # 2x2の行列に4次元のベクトルは掛けられない
```

```
---------------------------------------------------------------------------
ValueError                                Traceback (most recent call last)
<ipython-input-20-a386da54a8ef> in <module>
----> 1 print(A @ np.array([1,2,3,4])) # 2x2の行列に4次元のベクトルは掛けられない

ValueError: matmul: Input operand 1 has a mismatch in its core dimension 0, wi
th gufunc signature (n?,k),(k,m?)->(n?,m?) (size 4 is different from 2)
```

行列と行列の積

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

In [21]:

```
A = np.array([[1.0, 1.0],
              [0.0, 2.0]])
B = np.array([[0.0, 1.0],
              [1.0, 2.0]])
print(A @ B)
print(B @ A)
```

```
[[1. 3.]
 [2. 4.]]
[[0. 2.]
 [1. 5.]]
```

線形方程式

$A \in \mathbb{R}^{N\times N}, b \in \mathbb{R}^N$ としたとき、$Ax = b$ を満たす $x \in \mathbb{R}^N$ を求める。

A が正則行列（＝逆行列を持つ）のとき、$x = A^{-1}b$ が解。

二通りの実装方法がある

- 逆行列を求めるアルゴリズム(Gauss-Jordanなど)を利用
- 直接線形方程式を解くアルゴリズム(LU分解)を利用

　　！！なるべく直接線形方程式を解くアルゴリズムを利用すべき！！

- LU 分解の方がそもそも速い
    - A の形によっては更に速くなる
- `numpy` では逆行列を求めるのに $AX = I$ を解いている（＝線形方程式を解くのと同じ計算時間がここで必要）
    - さらに $A^{-1}b$ を計算しないといけないので計算時間的に損

（参考）伊理正夫, 藤野和建: 数値計算の常識

演習4.2

1. $D \times D$ 正則行列 A と D 次元ベクトル x を入力として、$\sqrt{x^\top A^{-1} x}$ を出力する関数 `quadratic` を完成させよ。ただし A, x 共に numpy.array として与えられるとする。
2. $D \times D$ 対称行列 A を入力として、A の第二固有値（固有値の中で二番目に大きいもの）を出力する関数 `second_eig` を完成させよ。
3. $D \times D$ 行列 A、D 次元ベクトル x 、自然数 k を入力として、

$$
\begin{aligned}
v_1 &= \frac{A^k x}{\|A^k x\|} \\
\lambda_1 &= v_1^\top A v_1
\end{aligned}
$$

で定義されるλ_1を出力する関数 `power_iter` を完成させよ。

解説: べき乗法

- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ の固有値と対応する固有ベクトルを $\lambda_1, \ldots, \lambda_N, v_1, \ldots, v_N$ とする。
- $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_N|$ とする。

任意のベクトル $x \in \mathbb{R}^N$ は、固有ベクトルで展開できる（固有ベクトルは基底を成す）:

$$x = \sum_{n=1}^{N} c_n v_n$$

A を掛け続けると絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルが（相対的に）強調される:

$$
\begin{aligned}
A^k x = \sum_{n=1}^{N} c_n A^k v_n &= \sum_{n=1}^{N} c_n \lambda_n^k v_n \\
&= \lambda_1^k \sum_{n=1}^{N} c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k v_n \\
&\approx \lambda_1^k c_1 v_1
\end{aligned}
$$

- 適当なベクトルに行列 A を掛け続けると v_1 が求まる
- $\lambda_1 = \dfrac{v_1^\top A v_1}{v_1^\top v_1}$

In [22]:

```python
import numpy as np
A = np.array([[2, 1], [1, 2]])
x = np.array([1, 2])
for i in range(100):
    x = A @ x
    x = x / np.linalg.norm(x) # ベクトルを正規化しないと発散する
print(x@A@x / (x@x), x)
```

```
3.0 [0.70710678 0.70710678]
```

ここまでのまとめ

- ベクトル、行列は numpy を使う
- 固有値・固有ベクトルなどの計算もできる
- 線形方程式も解ける
- 逆行列を求める必要があるか考える（線形方程式を解けばいい場合は線形方程式を解く）

主成分分析, PCA

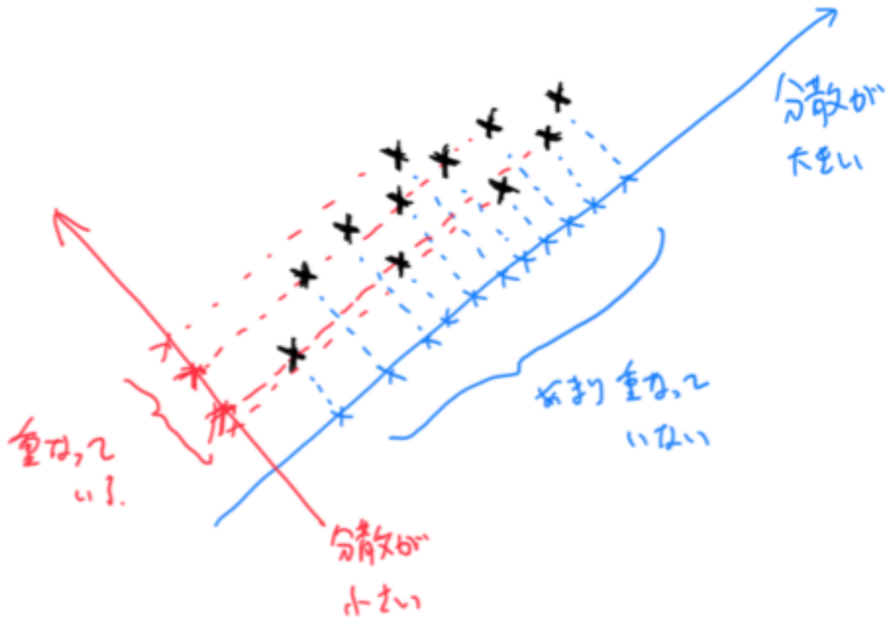
データ $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{R}^D$ があったとき、その"特性"を保ったまま低次元表現を得たい。

- データを目で見たい（100次元だと見られないけど2次元なら）
- 同じ情報量ならば低次元の方が学習しやすい
- 特性の定義によって様々な手法がある
- $K\ (< D)$次元表現を得る

主成分分析（1次元の場合）

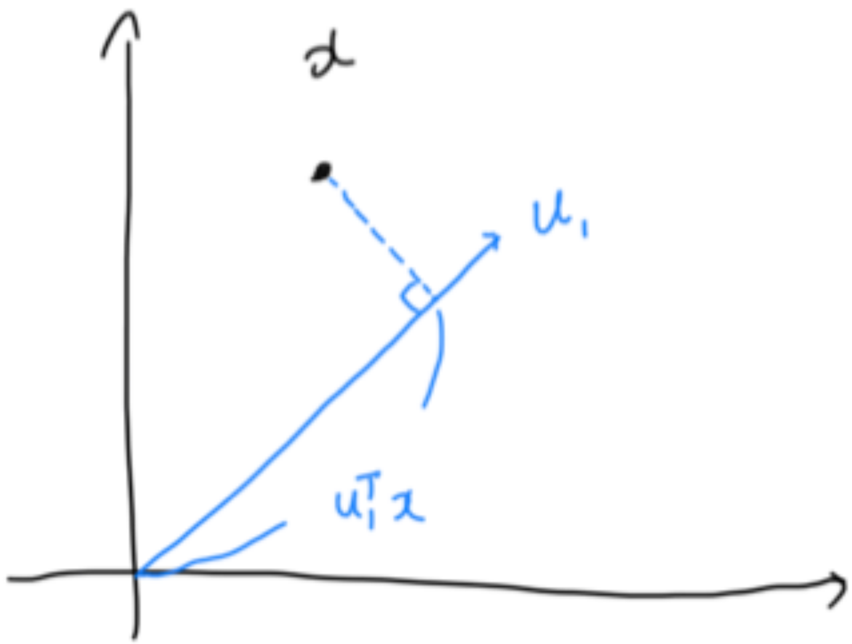
Q. データを1次元に射影するとき、どのように射影すれば一番データの特性を保存できるか？

A. データの分散が最も大きくなる軸に射影すれば良さそう



主成分分析（1次元の場合）の定式化

- $X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix}^\top$
  - データの平均を $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$ とする
- $u_1 \in \mathbb{R}^D$ で定められる軸に射影することを考える
  - $u_1^\top u_1 = 1$ とする
- u_1 で定められる軸上での x_n の座標は $u_1^\top x_n$
- u_1 で定められる軸上での X の分散は $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (u_1^\top x_n - u_1^\top \bar{x})^2$



主成分分析（1次元の場合）の定式化

分散が最大になる方向が知りたいので、以下の最適化問題を解く

$$\text{maximize}_{u_1 \in \mathbb{R}^D} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (u_1^\top x_n - u_1^\top \bar{x})^2$$

$$\text{subject to } u_1^\top u_1 = 1$$

主成分分析（1次元の場合）の解法

まず目的関数を書き換える

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(u_1^\top x_n - u_1^\top \bar{x})^2 &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} u_1^\top (x_n - \bar{x})(x_n - \bar{x})^\top u_1 \\ &= u_1^\top \Sigma u_1\end{aligned}$$

where $\Sigma = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \bar{x})(x_n - \bar{x})^\top$.

すると最適化問題は以下のように書き換わる

$$\begin{aligned}&\text{maximize}_{u_1 \in \mathbb{R}^D}\, u_1^\top \Sigma u_1 \\ &\text{subject to } u_1^\top u_1 = 1\end{aligned}$$

主成分分析（1次元の場合）の解法

ラグランジュ未定乗数法を使う。ラグランジアンは

$$\mathcal{L}(u_1; \lambda_1) = u_1^\top \Sigma u_1 + \lambda_1 (1 - u_1^\top u_1)$$

最適解 $u_1^\star$ で停留点になっていることが必要なので、

$$\frac{\partial}{\partial u_1} \mathcal{L}(u_1^\star; \lambda_1) = \Sigma u_1^\star - \lambda_1 u_1^\star = 0$$

つまり λ_1 は Σ の固有値で $u_1^\star$ はそれに対応する（単位）固有ベクトルであることが必要。また目的関数は

$$u_1^\top \Sigma u_1 = \lambda_1$$

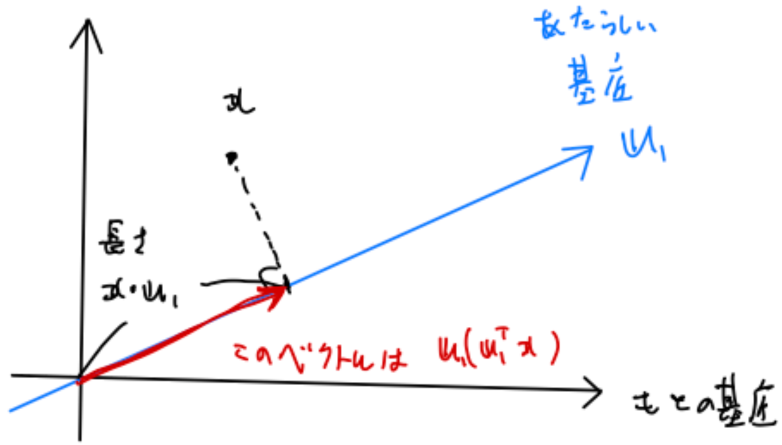
となるため、λ_1 は Σ の最大固有値で、$u_1^\star$ は最大固有値に対応する長さ1の固有ベクトルである。

主成分分析（2次元以上）について

- 第一主成分は分散共分散行列 Σ の最大固有値に対応する固有ベクトルだった。
- Q. データを $K(\geq 2)$ 次元に落としたい場合はどうすればいいのか？
- A. K 次元空間に落とした時の分散を考えれば良さそう
    - Σ の固有値の大きい方から K 個とってきて、対応する固有ベクトルも持ってくる: $\{(\lambda_k, u_k)\}_{k=1}^{K}$
    - $U = \begin{bmatrix} u_1 \dots u_K \end{bmatrix}^\top \in \mathbb{R}^{K \times D}$ として、U で K 次元空間に射影したらいい
    - 証明略

データの再構成

- D次元ベクトル x を K 次元ベクトル z に変換した
- z から x に戻せる？→情報は落ちるけどできなくはない



一般に、

$U = [u_1 \cdots u_K] \in \mathbb{R}^{D \times K}$ としたとき、
(正規直交基底)

$$U^T x = \begin{bmatrix} u_1^T \\ \vdots \\ u_K^T \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} u_1^T x \\ \vdots \\ u_K^T x \end{bmatrix}$$ の

各成分は、基底 u_k 上での x の長さを表す。

$$U U^T x = [u_1 \cdots u_K] \begin{bmatrix} u_1^T x \\ \vdots \\ u_K^T x \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^{K} (\underbrace{u_k^T x}_{u_k\text{で測ったときの}x\text{の長さ}}) u_k$$ は、

基底 U をつかって x を再構成したものに相当する。

アルゴリズム

- 入力: $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{R}^D$, $K \in \mathbb{N}$
- 出力: $z_1, \ldots, z_N \in \mathbb{R}^K$

1. $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$
2. $\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \bar{x})(x_n - \bar{x})^\top$
3. Σ の固有値と対応する固有ベクトル $(\lambda_1, u_1), \ldots, (\lambda_D, u_D)$ を求める（$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_D$）
    - ただし $\|u_d\| = 1$ for all $d = 1, \ldots, D$.
4. $U = \begin{bmatrix} u_1 \ldots u_K \end{bmatrix}^\top$ として、$z_n = Ux_n$ を計算

ここまでのまとめ

- PCA は分散共分散行列を固有値分解すればできる
- 固有値（＋固有ベクトルも）の大きい方から順番にとってくればいい

演習4.3

1. $X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix}^\top$ を入力として、$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)(x_n - \mu)^\top$ を出力する関数 `covariance` を完成させよ。ただし $\mu = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n$ とし、入出力形式は以下の通りとする。

PCA の実装

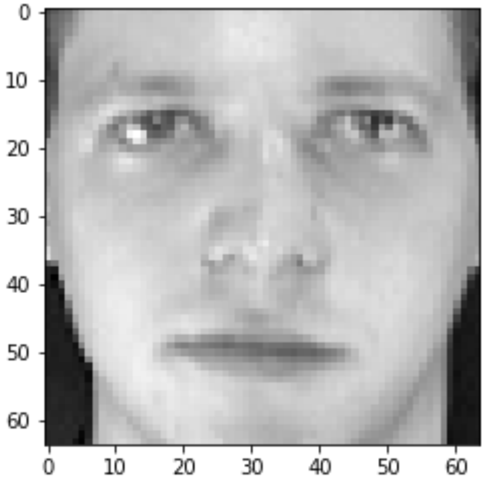
- PCA でデータを2次元で見てみる
- 主成分を見てみる
- 再構成してみる

→ 見て楽しいので画像データを使ってみる

In [23]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import fetch_olivetti_faces

# データを取得
dataset = fetch_olivetti_faces()
num_examples, row_size, col_size = dataset['images'].shape
X = dataset['data']

# 平均0にしておく
X_mean = X.mean(axis=0)
X_centered = X - X_mean
```

In [24]:
```
# 顔データを表示してみる
plt.imshow(dataset['images'][0], cmap=plt.cm.gray)
plt.show()
X_centered.shape
```



Out[24]:
```
(400, 4096)
```


64
=64×64で各値は
色の濃淡を表す行列
64
各行を連結して一本にするとベクトルになる
・・・

演習4.3の解答的なもの

上で定義した `X_centered` に対してPCAのアルゴリズムを適用した時に得られる低次元表現 $Z \in \mathbb{R}^{N \times K}$ と変換に用いる行列 $U \in \mathbb{R}^{K \times D}$ を求めるプログラムを書く

1. $\Sigma = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^\top$ を計算せよ（x_n の平均は0に変換済み）
2. Σ の固有値と対応する固有ベクトル $(\lambda_1, u_1), \ldots, (\lambda_D, u_D)$ を計算せよ（$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_D$）
   - ヒント: 対称行列の固有値分解を行う関数 [https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.eigh.html (https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.eigh.html)](https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.eigh.html)
3. $U = \begin{bmatrix} u_1 \ldots u_K \end{bmatrix}^\top$ として、$z_n = U x_n$ を計算せよ
   - 例えば $K = 20$

1. $\Sigma = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^\top$ を計算せよ

In [25]:
```
sample_size = X_centered.shape[0]
dim = X_centered.shape[1]

# 定義通り地道に sigma を作ってもいい
sigma = np.zeros((dim, dim))
for each_example in range(sample_size):
    sigma = sigma + np.outer(X_centered[each_example], X_centered[each_example])
```

$X = \left[x_1 \ldots, x_N \right]^\top$ としたとき、

$$X^\top X = \sum_{n=1}^{N} x_n x_n^\top$$

という関係を使ってもいい（こっちの方が圧倒的に速い）

In [26]:
```
# sigma には上で計算したものが入っている
print(np.linalg.norm(sigma - X_centered.T @ X_centered))
```

```
0.0015574189977048496
```

1. A の固有値と対応する固有ベクトル $(\lambda_1, u_1), \ldots, (\lambda_D, u_D)$ を計算せよ
$(\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_D)$

In [27]:
```
from numpy.linalg import eigh
eig_val, eig_vec = eigh(sigma)
print(eig_val)
print(eig_vec.shape)
```

```
[-1.40173184e-06 -1.39795718e-06 -1.38039418e-06 ...  2.51554128e+03
  4.41763308e+03  7.51723015e+03]
(4096, 4096)
```

1. $U = \left[u_1 \dots u_K \right]^\top$ として、$z_n = U x_n$ を計算せよ

In [28]:
```
K = 20
U = eig_vec[:, -K:].T
print(U.shape)
z = (U @ X.T).T
print(z.shape)
```

```
(20, 4096)
(400, 20)
```

In [30]:

```
# pca を実行
K=20
z, U = pca(X_centered, K)
print(z.shape, U.shape)
```

```
(400, 20) (20, 4096)
```

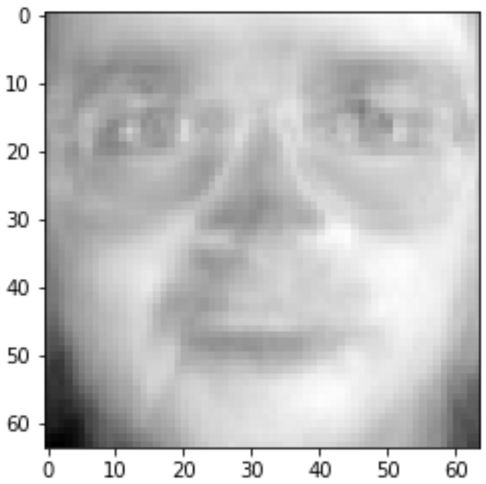
In [31]:

```
# V の行ベクトルが正規直交基底であることを確認
print('distance from the identity:', np.abs(U @ U.T - np.identity(K)).max())
print('mean reconstruction loss: ',((X_centered - (U.T @ z.T).T) * (X_centered -
(U.T @ z.T).T)).mean())
```

```
distance from the identity: 1.1920928955078125e-07
mean reconstruction loss:  0.0045594834
```

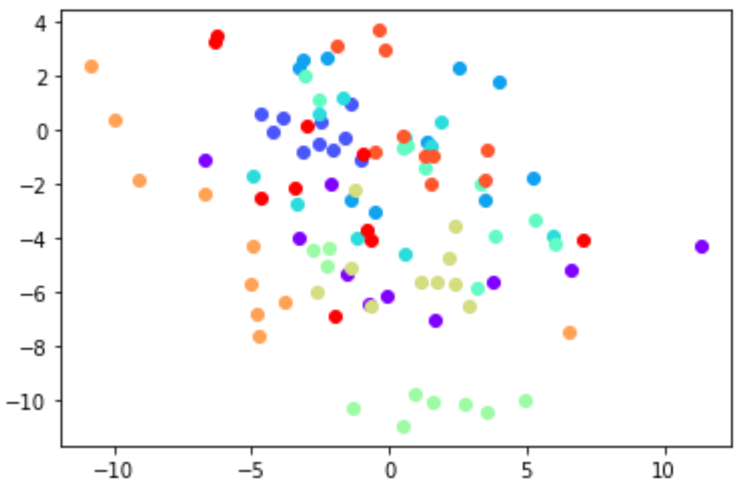
In [32]:

```
# データの貼る空間の固有ベクトルを見てみる
plt.imshow(-U[-1].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray)
plt.show()
```



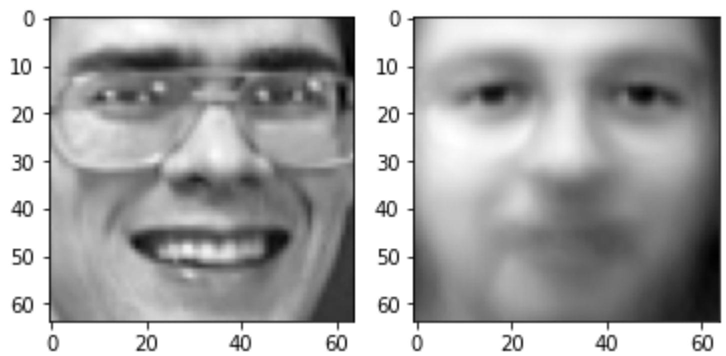
In [33]:

```
# この場合は2次元に落としてもよくわからない...
import matplotlib.cm as cm
import numpy as np

K = 2
z, U = pca(X_centered, K)

colors = cm.rainbow(np.linspace(0, 1, 10))
for each_idx in range(100):
    plt.scatter(z[each_idx, 0], z[each_idx, 1], color=colors[dataset['target'][eac
h_idx]])
plt.show()
```



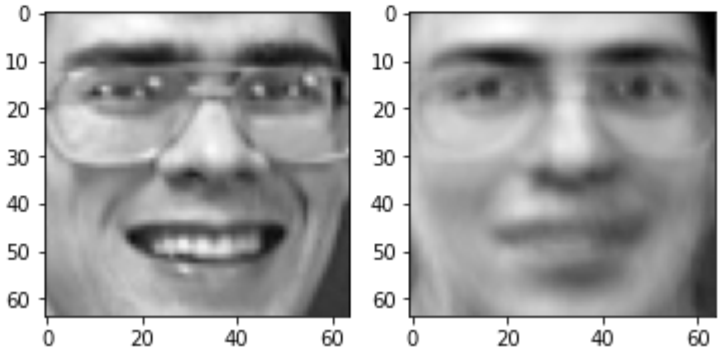
In [34]:

```
# 再構成 (K=2)
K = 2
z, U = pca(X_centered, K)
X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
idx = 190

f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画像
plt.show()
```



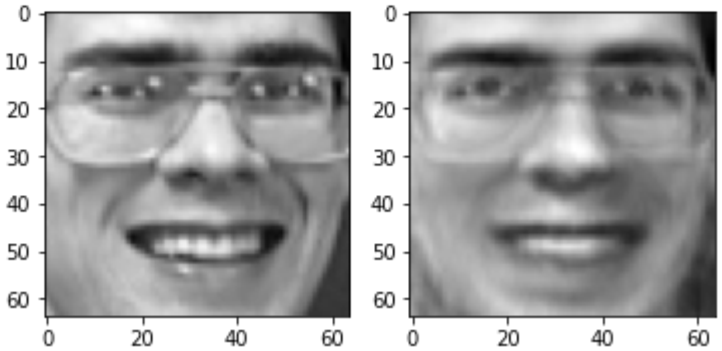
In [35]:

```
# 再構成 (K=20)
K = 20
z, U = pca(X_centered, K)
X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
idx = 190

f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画像
plt.show()
```



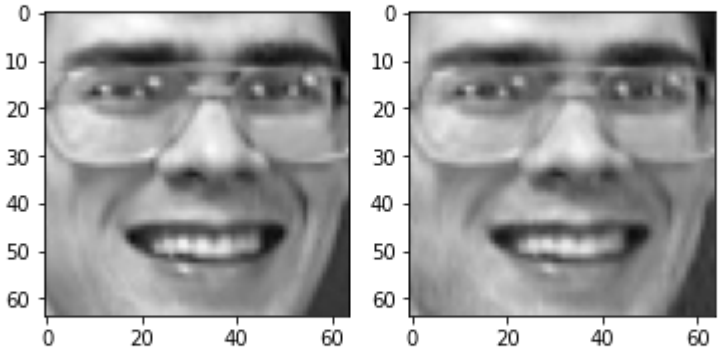
In [36]:

```
# 再構成 (K=50)
K = 50
z, U = pca(X_centered, K)
X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
idx = 190

f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画像
plt.show()
```



In [37]:

```
# 再構成 (K=200)
K = 200
z, U = pca(X_centered, K)
X_rec = (U.T @ z.T).T + X_mean
idx = 190

f, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2)
ax1.imshow(dataset['images'][idx], cmap=plt.cm.gray) # 左が元の画像
ax2.imshow(X_rec[idx].reshape(row_size, col_size), cmap=plt.cm.gray) # 右が再構成画
像
plt.show()
```



まとめ

- 行列、ベクトルは `numpy` を使って実装する
- 線形代数の操作は `numpy` の API を探せば実装されていることが多い
- 主成分分析(principle component analysis; PCA) を実装した
    - データを低次元空間に射影するアルゴリズム
    - 低次元空間での分散を最小化する
    - 固有値分解に帰着される