PCA算法

杨航锋

主成分分析 (PCA) 是一种分析、简化数据集的技术，主成分分析经常用于降低数据集的维数，同时保持数据集中的对方差贡献最大的特征，然后它是一种有损压缩算法。[更多文章见GitHub地址]

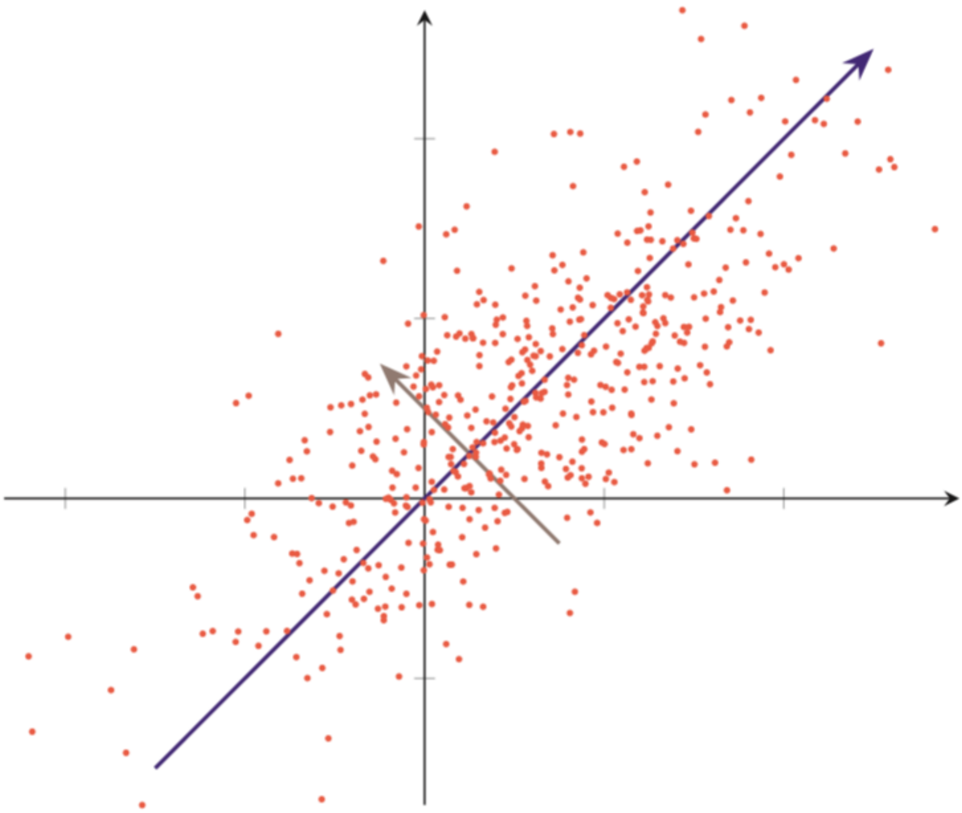
PCA 问题的优化目标：将一组 n 维向量降为 k 维 $(0 < k \leq n)$ ，其目标是选择 k 个单位正交基，使得原始数据变换到该组基上后，各特征两两之间的协方差为 0 ，而特征的方差则尽可能大，当在正交的约束下取最大的 k 个方差。

假设我们有 m 个 n 维数据记录，将其按列排成 $n \times m$ 的矩阵 X ，令 $C = \frac{1}{m}XX^T$ ，则 C 是一个半正定对称矩阵 $(\xi C \xi^T \geq 0)$ ，其对角线分别为各个特征的方差，而 $C_{i,j} = C_{j,i}$ ，分别表示 i、j 两个特征的协方差。 P 是一组基按行组成的矩阵， Y 为 P 对 X 做基变换后的数据即降维后的数据，有 $Y = PX$ 。

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{m}YY^T \\ &= \frac{1}{m}(PX)(PX)^T \\ &= P(\frac{1}{m}XX^T)P^T \\ &= PCP^T \end{aligned}$$

因此原优化目标转化成寻找一个矩阵 P ，满足 PCP^T 是一个对角矩阵，并且对角元素按从大到小依次排列，那么 P 的前 k 行就是要寻找的基，用 P 的前 k 行组成的矩阵乘以 X 就使得 X 从 n 维降到了 k 维并满足原始优化条件，又因为 C 是实对称矩阵故可相似对角化。

极大投影方差法



极大投影方差法的思想是使得在投影后的空间中数据的方差最大，选择数据方差最大的方向进行投影，才能最大化数据的差异性，因此可以保留更多的原始数据信息。假设输入空间 $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^n$ 为 n 维向量的集合，特征向量 $x^{(i)} \in \mathcal{X}$，投影向量为 $u \in \mathbb{R}^d$ 且限制 u 的模长为 1 即 $u^T u = 1$，对原始特征向量 $x^{(i)}$ 进行去中心化处理，使得去中心化后的特征向量 $z^{(i)}$ 各特征分量的均值为 0。

> 令 $\overline{x} = (\overline{x_1}, \overline{x_2}, \cdots, \overline{x_n})$，$\overline{x_i}$ 为第 i 个特征的均值，故有
>
> $$\begin{aligned} 0_n^T &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \\ &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)} - \overline{x}) \\ &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)} - \frac{1}{m} \cdot m \cdot \overline{x} \\ &= \overline{x} - \overline{x} \end{aligned}$$
>
> 为什么限制 u 的模长为 1？
>
> $$(z^{(i)})^T u = |(z^{(i)})^T| \cdot |u| \cdot \cos\theta$$
>
> 这样特征向量 $z^{(i)}$ 在 u 上的投影可以表示为内积的形式。

样本投影后的方差为

$$
\begin{aligned}
\sigma(X, u) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[(z^{(i)})^T u - 0]^2 \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[(z^{(i)})^T u]^T[(z^{(i)})^T u] \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} u^T z^{(i)}(z^{(i)})^T u \\
&= u^T \color{red}{S} u
\end{aligned}
$$

因此优化函数为

$$
\begin{aligned}
&\underset{u}{\arg\max}\ \ u^T S u \\
&s.t.\quad u^T u = 1
\end{aligned}
$$

通过拉格朗日方法转换为无约束问题，其中 λ 为拉格朗日乘子

$$
\underset{u}{\arg\max}\ \ u^T S u + \lambda(1 - u^T u)
$$

对上式求导可得

$$
Su = \lambda u
$$

从上式可知， u 是协方差矩阵 S 的特征向量， λ 为特征值。同时有

$$
\sigma(X, u) = u^T S u = u^T \lambda u = \lambda
$$

λ 也是投影后样本的方差。因此，主成分分析可以转换成一个矩阵特征值分解问题，投影向量 u 为矩阵 S 的最大特征对应的特征向量。

总结一下 PCA 的算法步骤：

假设有 m 条 n 维数据：

1. 将原始数据按列组成 n 行 m 列矩阵 X ；
2. 将 X 的每一行进行零均值化，即减去这一行的均值；
3. 求出协方差矩阵 $C = \frac{1}{m}XX^T$ ；
4. 求出协方差矩阵的特征值及对应的特征向量；
5. 将特征向量按对应特征值大小从上到下按行排列成矩阵，取前 k 行组成矩阵 P ；
6. $Y = PX$ 即为降维到 k 维后的数据。