# Principal components analysis

## 主成分分析PCA

### PCA作用

真实数据存在各种问题

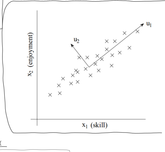
1. 有无用的特征

前面讲过一节模型选择和正则化，那一节中我们解决了这个问题，去除无用特征

2. 有多余的特征

举例来说，拿到一个“汽车”的数据集，其中两个特征为“千米/每小时”和“英里/每小时”，显然这两个特征作用重复了，有一个多余的，可以去掉。或者说可以把两个特征合为一个特征

再举一个例子，有一个数据集，其中的 $x1(i)$ 指代的是飞行员 $i$ 的飞行技能的度量，而 $x2(i)$ 指代的是该飞行员对飞行的喜爱程度，无线电通控直升机是很难操作的，只有那些非常投入，并且特别热爱飞行的学生，才能成为好的飞行员。所以，上面这两个属性 $x1$ 和 $x2$ 之间的相关性是非常强的。所以我们可以认为在数据中沿着对角线方向（也就是下图中的 $u1$ 方向）表征了一个人对飞行投入程度的内在“驾动力（karma）”，只有少量的噪音脱离这个对角线方向。如下图所示，我们怎么来自动去计算出 $u1$ 的方向呢？




3. 特征数>>样本数

上述的第一个问题已经解决，而第二第三个问题可以通过PCA来解决。

PCA就是用来进行特征降维的，减少噪音和冗余，减少过度拟合的可能性。

PCA 的思想是将 n 维特征映射到 k 维上（k<n），这 k 维是全新的正交特征，这 k 维特征称为主元，是重新构造出来的 k 维特征，而不是简单地从 n 维特征中去除其余 n-k 维特征。

### PCA算法

摘自puluotianyi的中文笔记（10）主成分分析，大佬写的非常棒

网址：https://github.com/zhoucz97/CS229/tree/master/4.%E7%A5%9E%E7%BB%8F%E7%BD%91%E7%BB%9C%E5%92%8C%E6%B7%B1%E5%BA%A6%E5%AD%A6%E4%B9%A0%E7%AC%AC%E4%BA%8C%E9%83%A8%E5%88%86

❶ 假设我们得到了二维数据集，共10个数据，每个数据由两个特征 $x$ 和 $y$ 构成：

| | $x$ | $y$ |
|---|---|---|
| | 2.5 | 2.4 |
| | 0.5 | 0.7 |
| | 2.2 | 2.9 |
| | 1.9 | 2.2 |
| Data = | 3.1 | 3.0 |
| | 2.3 | 2.7 |
| | 2 | 1.6 |
| | 1 | 1.1 |
| | 1.5 | 1.6 |
| | 1.1 | 0.9 |

我们可以认为x是10篇文档中“learn”的TF-IDF值，y是“study”的TF-IDF值。或者可以认为x是10辆汽车的“千米/小时”速度，y是“英里/小时”速度等等。总之x和y强相关，并且是作用极其类似的两个特征，可以用PCA将其降维

❷ 将均值设为0.即求出均值，然后每个数据减去均值。。这里 $x$ 的均值是 1.81，$y$ 的均值是 1.91

| | $x$ | $y$ |
|---|---|---|
| | .69 | .49 |
| | -1.31 | -1.21 |
| | .39 | .99 |
| | .09 | .29 |
| DataAdjust = | 1.29 | 1.09 |
| | .49 | .79 |
| | .19 | -.31 |
| | -.81 | -.81 |
| | -.31 | -.31 |
| | -.71 | -1.01 |

这里应该还有一步求方差，为了省事，我们忽略这步

❸ 求出特征的协方差矩阵

$$cov = \begin{pmatrix} .616555556 & .615444444 \\ .615444444 & .716555556 \end{pmatrix}$$

分别为$\begin{matrix} cov(x,x) & cov(x,y) \\ cov(y,x) & cov(y,y) \end{matrix}$

协方差大于0表示x,y其中一个增加，则另一个也增加

❹ 求出协方差的特征值，特征向量

$$eigenvalues = \begin{pmatrix} .0490833989 \\ 1.28402771 \end{pmatrix}$$

$$eigenvectors = \begin{pmatrix} -.735178656 & -.677873399 \\ .677873399 & -.735178656 \end{pmatrix}$$

0.49特征值对应特征向量为(-.735, -.677)T

❺ 将特征值按大到小排序，选出最大的k个，以及这k个特征值对应的特征向量作为列向量组成的特征矩阵

我们这里选择1.284以及特征向量(.677873399, -.735178656)

❻ 将样本点投影到选取的特征向量上（即降维步骤）

把原n个特征降维到k个新特征

$$\mathrm{FinalData(m*k)} = \mathrm{DataAdjust(m*n)} \times \mathrm{EigenVectors(n*k)}$$

这里是

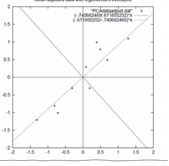
FinalData(10*1) = DataAdjust(10*2 矩阵)× 特征向量(-.677873399, -0.735178656)T

得到结果是

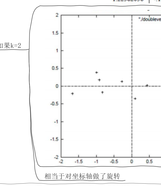
Transformed Data (Single eigenvector)

| |
|---|
| x' |
| -.827970186 |
| 1.77758033 |
| -.992197494 |
| -.274210416 |
| -1.67580142 |
| -.912949103 |
| .0991094375 |
| 1.14457216 |
| .438046137 |
| 1.22382056 |

这样就得到了“learn”和“study”融合起来的一个新的特征



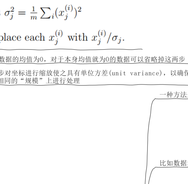

### 上述过程图示



+号表示预处理后的样本点，两个对角线就是正交的特征向量

| | | |
|---|---|---|
| | .827970186 | -.175115307 |
| | 1.77758033 | .142857227 |
| | -.992197494 | .384374989 |
| | -.274210416 | .130417207 |
| Transformed Data= | -1.67580142 | -.209498461 |
| | -.912949103 | .175282444 |
| | .0991094375 | -.349824698 |
| | 1.14457216 | .0464172582 |
| | .438046137 | .0177646297 |
| | 1.22382056 | -.162675287 |

如果k=2




相当于对坐标轴做了旋转

为什么求协方差的特征向量就是最理想的 k 维向量？下面PCA算法给出解释

### PCA算法

❶ 预处理（正则化）

1. Let $\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}$.
2. Replace each $x^{(i)}$ with $x^{(i)} - \mu$.
3. Let $\sigma_j^2 = \frac{1}{m}\sum_i (x_j^{(i)})^2$
4. Replace each $x_j^{(i)}$ with $x_j^{(i)}/\sigma_j$.

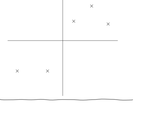
(1)(2)步设数据的均值为0，对于本身均值就为0的数据可以省略掉这两步

（3）（4）步对坐标进行缩放使之具有单位方差(unit variance)，以确保不同的属性可以在相同的“规模”上进行处理

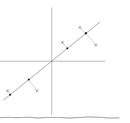
❷ 预处理完毕，接下来应该要找出数据大致的朝向，也就是变化的主轴(main axis of variation)$u$。

一种方法是找出一个单位向量(unit vector)$u$，并使得数据在$u$上的投影的方差最大

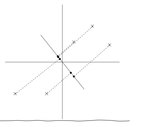
比如数据集中有5个数据



假设$u$的朝向如图，我们可以看到投影后的数据仍然有很大的方差



反例如下（方差很小）



我们想要找到使得投影后的数据方差很大的单位向量$u$。

❸ 形式化计算$u$

注意：给定一个向量$u$和数据$x$，$x$在$u$上的投影的长度可以用$x^Tu$来表示

也就是说，若$x(i)$是我们数据集的一个点，则这个点在$u$上的投影(首定也是一个点)就是从原点到$x^Tu$的距离

**因此，要最大化投影的方差（使点的投影离原点最远），就要最大化下列公式**

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)T}u)^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} u^T x^{(i)} x^{(i)T} u$$

$$= u^T\left(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}x^{(i)T}\right)u.$$

注：两个概念

主特征值：矩阵的特征值中，模最大的那个（实数矩阵中就是绝对值最大的那个）

主特征向量：主特征值对应的特征向量

用$\lambda$来表示$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)}u)^2$，$\Sigma$表示$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}x^{(i)T}$

公式解释

$$\lambda = u^T\Sigma u$$

我们将上述公式记为

因为$u$是单位向量，所以$||u|| = 1$，即$uTu=uuT=1$

上述公式两边左乘$u$

$$u\lambda = \lambda u = uu^T\Sigma u = \Sigma u$$

$$\Rightarrow \Sigma u = \lambda u$$

**我们发现，原始公式左边那一坨就是右边的中间一坨的特征值，而$u$就是对应的特征向量。**

**我们的问题就变成了，找出$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}x^{(i)T}$的最大特征向量！（主特征向量）**

简单总结，如果我们要找1维度的子空间来近似拟合数据，就要选择$\Sigma$表示$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}x^{(i)T}$的主向量，如果要将数据投影到k维度的子空间中，就要找前k个的特征值对应的特征向量组成数据新的正交基

如果用新的正交基来表示$x(i)$，只需要计算

$$y^{(i)} = \begin{bmatrix} u_1^T x^{(i)} \\ u_2^T x^{(i)} \\ \vdots \\ u_k^T x^{(i)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^k.$$

单位向量$u1,...,uk$叫做数据集的前k个主成分（principal components）