机器学习-第十一章 降维

黄海广 副教授

2022年01月

本章目录

1.降维概述

01 降维概述

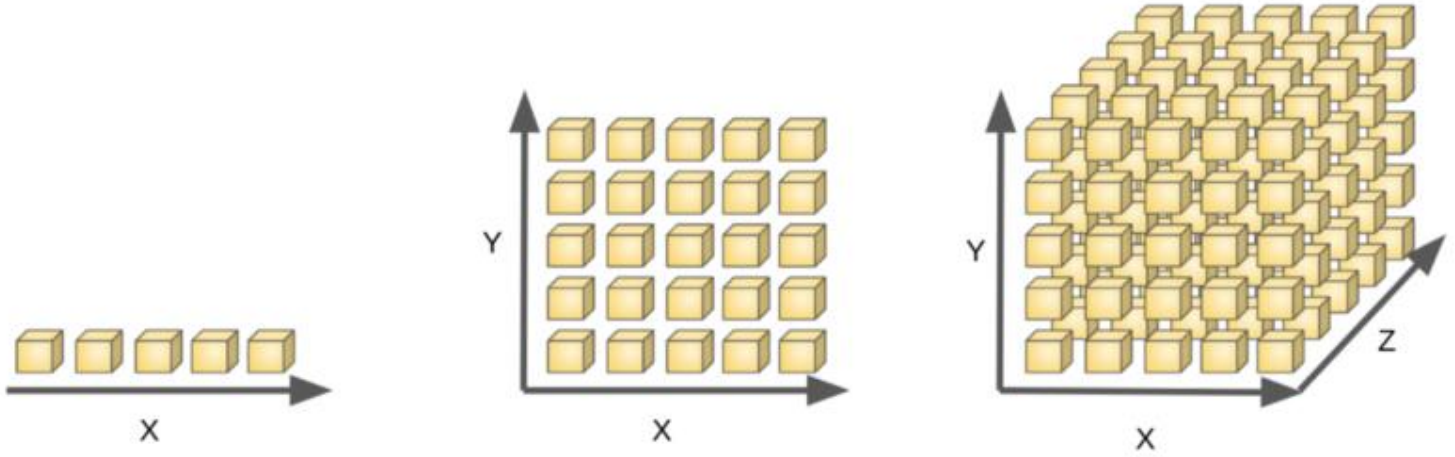
02 SVD(奇异值分解)

03 PCA(主成分分析)

1.降维概述

维数灾难(Curse of Dimensionality)：通常是指在涉及到向量的计算的问题中，随着维数的增加，计算量呈指数倍增长的一种现象。

在很多机器学习问题中，训练集中的每条数据经常伴随着上千、甚至上万个特征。要处理这所有的特征的话，不仅会让训练非常缓慢，还会极大增加搜寻良好解决方案的困难。这个问题就是我们常说的维数灾难。



1.降维概述

维数灾难

维数灾难涉及数字分析、抽样、组合、机器学习、数据挖掘和数据库等诸多领域。在机器学习的建模过程中，通常指的是随着特征数量的增多，计算量会变得很大，如特征达到上亿维的话，在进行计算的时候是算不出来的。有的时候，维度太大也会导致机器学习性能的下降，并不是特征维度越大越好，模型的性能会**随着特征的增加先上升后下降。**

1.降维概述

什么是降维?

降维(Dimensionality Reduction)是将训练数据中的样本(实例)从高维空间转换到低维空间，该过程与信息论中有损压缩概念密切相关。同时要明白的，**不存在完全无损的降维。**

有很多种算法可以完成对原始数据的降维，在这些方法中，降维是通过对原始数据的线性变换实现的。

1.降维概述

为什么要降维

- 高维数据增加了运算的难度
- 高维使得学习算法的泛化能力变弱（例如，在最近邻分类器中，样本复杂度随着维度成指数增长），维度越高，算法的搜索难度和成本就越大。
- 降维能够增加数据的可读性，利于发掘数据的有意义的结构

1.降维概述

降维的主要作用

1.减少冗余特征，降低数据维度

2.数据可视化

1.降维概述

减少冗余特征

假设我们有两个特征：

x_1:长度用厘米表示的身高；x_2：是用英寸表示的身高。

这两个分开的特征x_1和x_2，实际上表示的内容相同，这样其实可以减少数据到一维，只有一个特征表示身高就够了。

很多特征具有**线性关系**，具有线性关系的特征很多都是冗余的特征，去掉冗余特征对机器学习的计算结果不会有影响。

1.降维概述

数据可视化

t-distributed Stochastic Neighbor Embedding(t-SNE)

t-SNE（TSNE）将数据点之间的相似度转换为概率。原始空间中的相似度由高斯联合概率表示，嵌入空间的相似度由“学生t分布”表示。

虽然Isomap，LLE和variants等数据降维和可视化方法，更适合展开单个连续的低维的manifold。但如果要准确的可视化样本间的相似度关系，如对于下图所示的S曲线（不同颜色的图像表示不同类别的数据），t-SNE表现更好。因为**t-SNE主要是关注数据的局部结构**。

1.降维概述

降维的优缺点

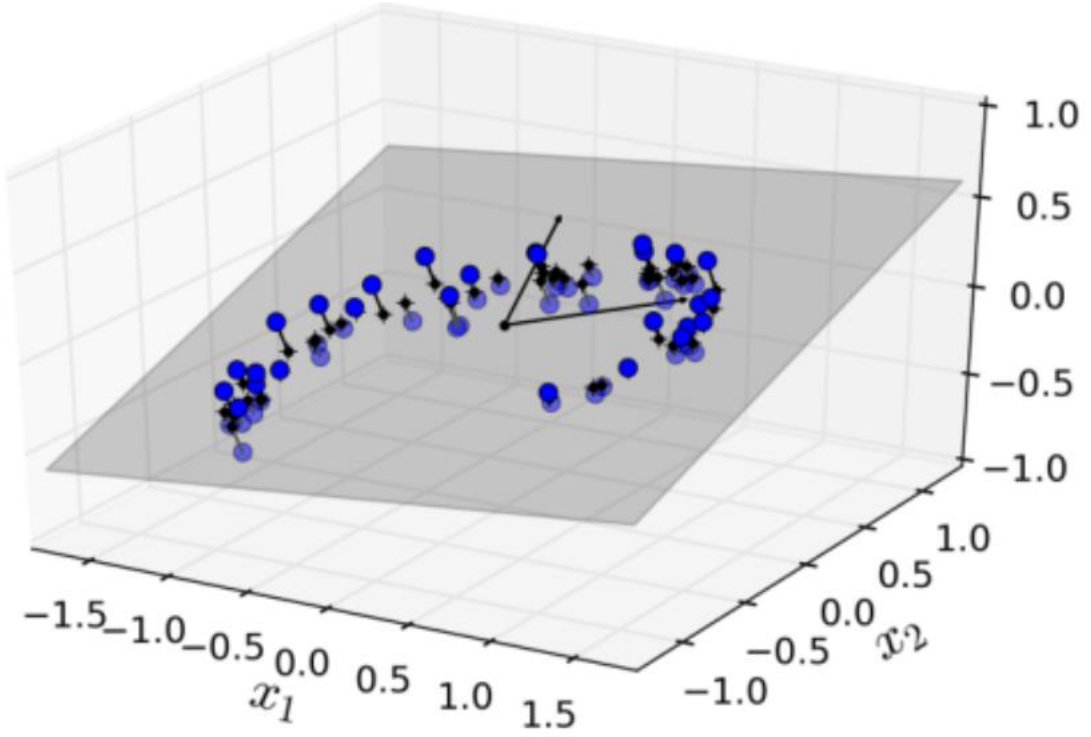
降维的优点：

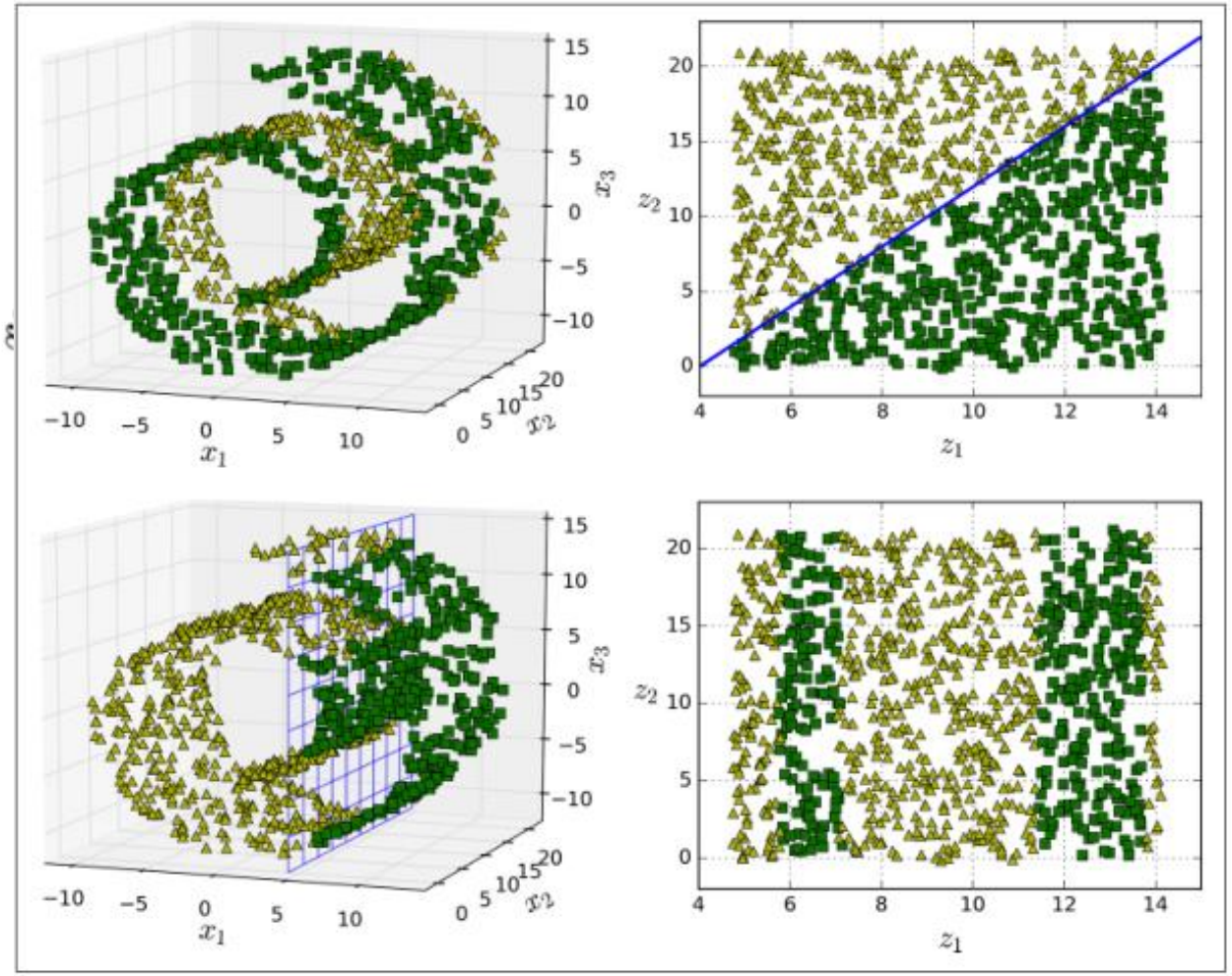
- 通过减少特征的维数，数据集存储所需的空间也相应减少，减少了特征维数所需的计算训练时间；
- 数据集特征的降维有助于快速可视化数据；
- 通过处理多重共线性消除冗余特征。

降维的缺点：

- 由于降维可能会丢失一些数据；
- 在主成分分析(PCA)降维技术中，有时需要考虑多少主成分是难以确定的，往往使用经验法则

1.降维概述


1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
x_1
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
x_2


15
10
5
0
−5
−10
x_3
−10
−5
0
5
10
x_1
0
5
10
15
20
x_2
20
15
10
5
0
z_2
4
6
8
10
12
14
z_1

2.SVD(奇异值分解)

2.SVD(奇异值分解)

奇异值分解 (Singular Value Decomposition，以下简称 SVD)是在机器学习领域广泛应用的算法，它不光可以用于降维算法中的特征分解，还可以用于推荐系统，以及自然语言处理等领域。是很多机器学习算法的基石。

SVD可以将一个矩阵 A分解为三个矩阵的乘积：

一个正交矩阵 U(orthogonal matrix)，

一个对角矩阵Σ (diagonal matrix)，

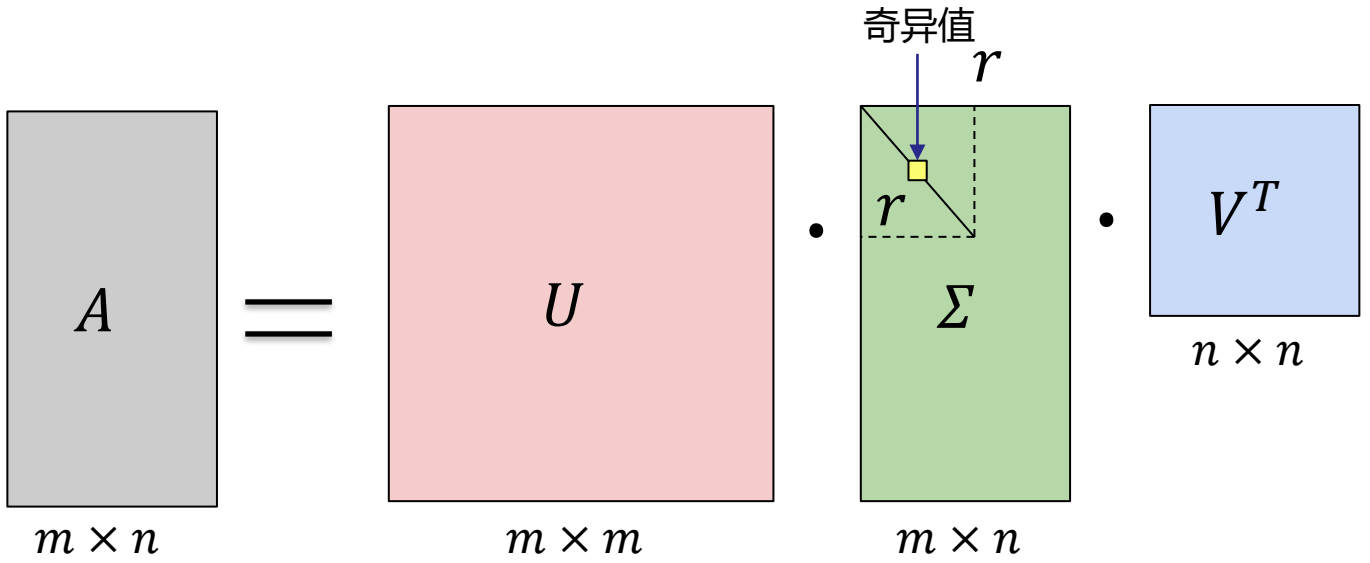
一个正交矩阵V的转置。

2.SVD(奇异值分解)

假设矩阵 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，通过SVD是对矩阵进行分解，

那么我们定义矩阵 A 的 SVD 为：

$$A = U\Sigma V^T$$



2.SVD(奇异值分解)

符号定义

$$A = U\Sigma V^T = u_1\sigma_1 v_1^T + \cdots + u_r\sigma_r v_r^T$$

其中U是一个$m \times m$的矩阵，每个特征向量u_i叫做A 的左奇异向量。

Σ是一个$m \times n$的矩阵，除了主对角线上的元素以外全为 0，主对角线上的每个元素都称为奇异值 σ。

V是一个$n \times n$的矩阵，每个特征向量v_i叫做 A 的右奇异向量。

U 和 V都是酉矩阵，即满足:$U^T U = I, V^T V = I$。

r为矩阵A的秩(rank)。

2.SVD(奇异值分解)

SVD求解 U矩阵求解

方阵AA^T 为$m \times m$的一个方阵，那么我们就可以进行特征分解，得到的特征值和特征向量满足下式：

$$(AA^T)u_i = \lambda_i u_i$$

可以得到矩阵AA^T 的 m 个特征值和对应的 m个特征向量u了。

2.SVD(奇异值分解)

SVD求解 U矩阵求解

将AA^T的所有特征向量组成一个 $m \times m$的矩阵U，就是我们 SVD 公式里面的 U 矩阵了。

一般我们将U中的每个特征向量叫做A 的**左奇异向量**。

注意：$AA^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U(\Sigma\Sigma^T)U^T$

上式证明使用了$V^TV = I, \Sigma^T = \Sigma$。可以看出的$AA^T$特征向量组成的矩阵就是我们 SVD 中的 U 矩阵。

2.SVD(奇异值分解)

V矩阵求解

如果我们将 A 的转置和 A 做矩阵乘法，那么会得到$n \times n$ 的一个方阵 $A^T A$。既然 $A^T A$是方阵，那么我们就可以进行特征分解，得到的特征值和特征向量满足下式：

$$(A^T A)v_i = \lambda_i v_i$$

2.SVD(奇异值分解)

2.V矩阵求解

这样我们就可以得到矩阵 A^TA的 n个特征值和对应的n个特征向量v了。将 A^TA的所有特征向量组成一个 $n \times n$ 的矩阵V，就是我们 SVD 公式里面的 V 矩阵了。一般我们将 V中的每个特征向量叫做 A 的右奇异向量。

注意：由于$A^TA = (U\Sigma V^T)^T(U\Sigma V^T) = V(\Sigma^T\Sigma)V^T$

上式证明使用了$U^TU = I, \Sigma^T = \Sigma$。可以看出$A^TA$的特征向量组成的矩阵就是我们 SVD 中的 V 矩阵。

2.SVD(奇异值分解)

Σ 矩阵求解

进一步我们还可以看出我们的特征值矩阵等于奇异值矩阵的平方，也就是说特征值和奇异值满足如下关系：$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$

这样也就是说，我们可以不用 $\sigma_i = \frac{Av_i}{u_i}$ 来计算奇异值，也可以通过求出 $A^T A$的特征值取平方根来求奇异值。

2.SVD(奇异值分解)

3.Σ 矩阵求解

由于奇异值矩阵Σ除了对角线上是奇异值，而其他位置都是 0，那我们只需要求出每个奇异值 σ就可以了。

我们注意到:

$A = U\Sigma V^T$，则：$AV = U\Sigma V^T V$

由于：$V^T V = I$，则：$AV = U\Sigma$

得到：$Av_i = \sigma_i u_i$，$\sigma_i = Av_i / u_i$

这样我们可以求出我们的每个奇异值，进而求出奇异值矩阵 Σ。

2.SVD(奇异值分解)

SVD计算案例

设矩阵 A定义为：$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$　　则A的秩$r = 2$。

$$A^T A = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 & 20 \\ 20 & 25 \end{bmatrix}$$

$$AA^T = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 12 \\ 12 & 41 \end{bmatrix}$$

两者都有相同的迹，都是50。

2.SVD(奇异值分解)

SVD计算案例

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$

进而求出 $A^T A$ 的特征值和特征向量：

$$\begin{vmatrix} 25-\lambda & 20 \\ 20 & 25-\lambda \end{vmatrix} = (25-\lambda)^2 - 400 = (\lambda - 45)(\lambda - 5) = 0$$

求解得到特征值：$\lambda_1 = 45$，$\lambda_2 = 5$

由$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$，可以得到奇异值为：$\sigma_1 = \sqrt{45}$，$\sigma_2 = \sqrt{5}$

2.SVD(奇异值分解)

接着求出 AA^T的特征值和特征向量：

同理求得：$\lambda_1 = 45$，$\lambda_2 = 5$

$$v_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix},\ v_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

利用$Av_i = \sigma_i u_i, i = 1,2$，求奇异值：

$$Av_1 = \begin{bmatrix} \frac{3}{\sqrt{2}} \\ \frac{9}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{45} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} \end{bmatrix} = \sigma_1 u_1,\ Av_2 = \begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{5} \begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} \end{bmatrix} = \sigma_2 u_2$$

2.SVD(奇异值分解)

最终得到 A 的奇异值分解为：

$$U=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}}\\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}}\end{bmatrix},\ \Sigma=\begin{bmatrix}\sqrt{45} & 0\\ 0 & \sqrt{5}\end{bmatrix},\ V=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

$$A=U\Sigma V^T=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}}\\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{45} & 0\\ 0 & \sqrt{5}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^T=\begin{bmatrix}3 & 0\\ 4 & 5\end{bmatrix}$$

同理：

$$A=U\Sigma V^T=\sigma_1 u_1 v_1^T+\sigma_2 u_2 v_2^T+\cdots+\sigma_r u_r v_r^T$$

2.SVD(奇异值分解)

SVD分解可以将一个矩阵进行分解，对角矩阵对角线上的特征值递减存放，而且奇异值的减少特别的快，在很多情况下，前 10%甚至 1%的奇异值的和就占了全部的奇异值之和的 99%以上的比例。

也就是说，对于奇异值，它跟我们特征分解中的特征值类似，我们也可以用最大的 k 个的奇异值和对应的左右奇异向量来近似描述矩阵。

也就是说：

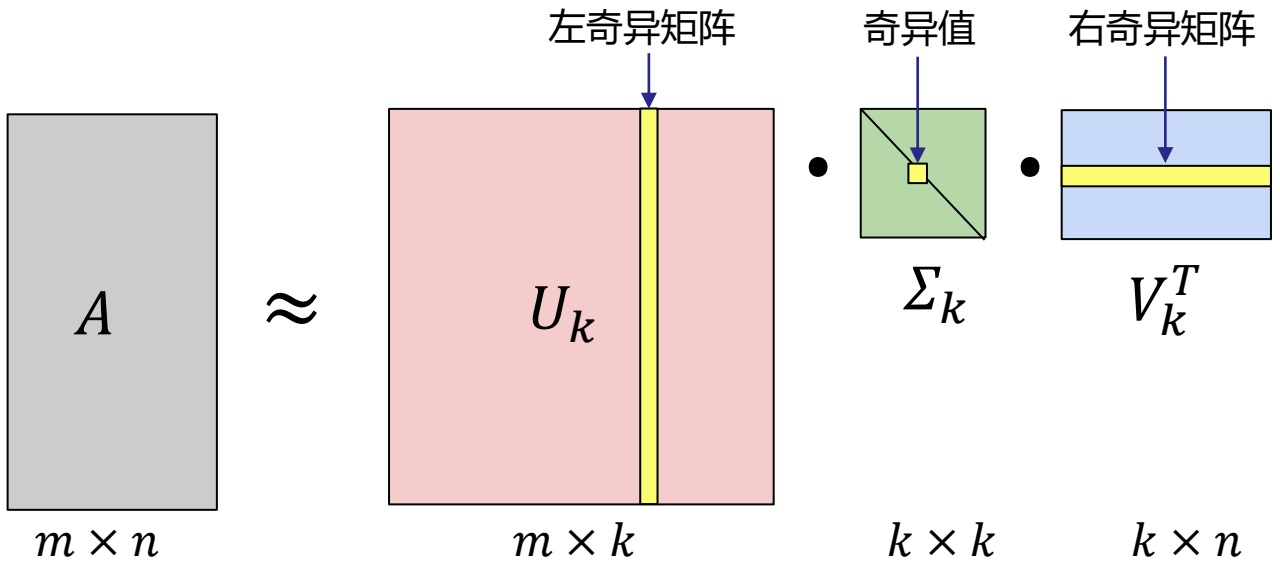
$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n} \approx U_{m\times k}\Sigma_{k\times k}V^T_{k\times n}$$

2.SVD(奇异值分解)

其中 k 要比 n小很多，也就是一个大的矩阵A可以用三个小的矩阵 $U_{m\times k}, \sum_{k\times k}, V^T_{k\times n}$来表示。

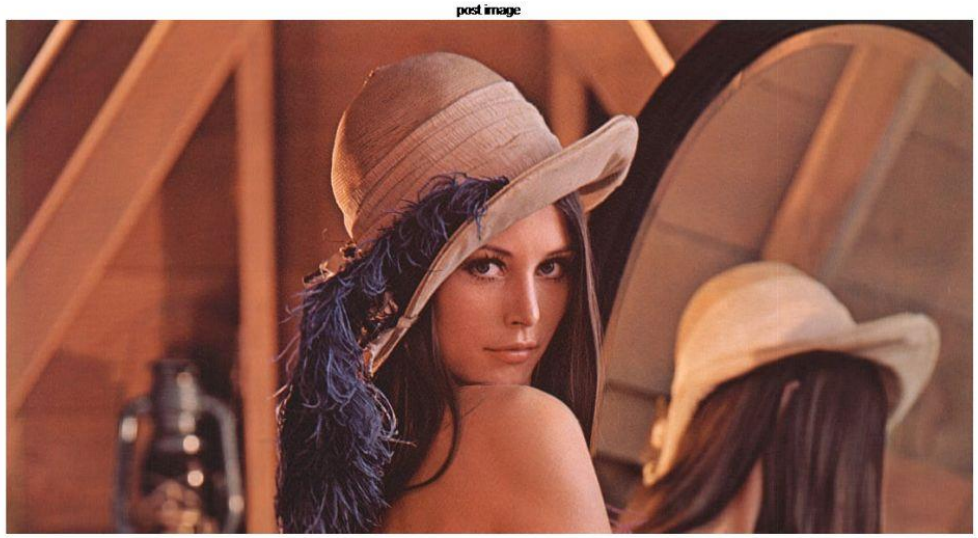
$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n} \approx U_{m\times k}\Sigma_{k\times k}V^T_{k\times n}$$

如图所示，现在我们的矩阵A 只需要黄色的部分的三个小矩阵就可以近似描述了。

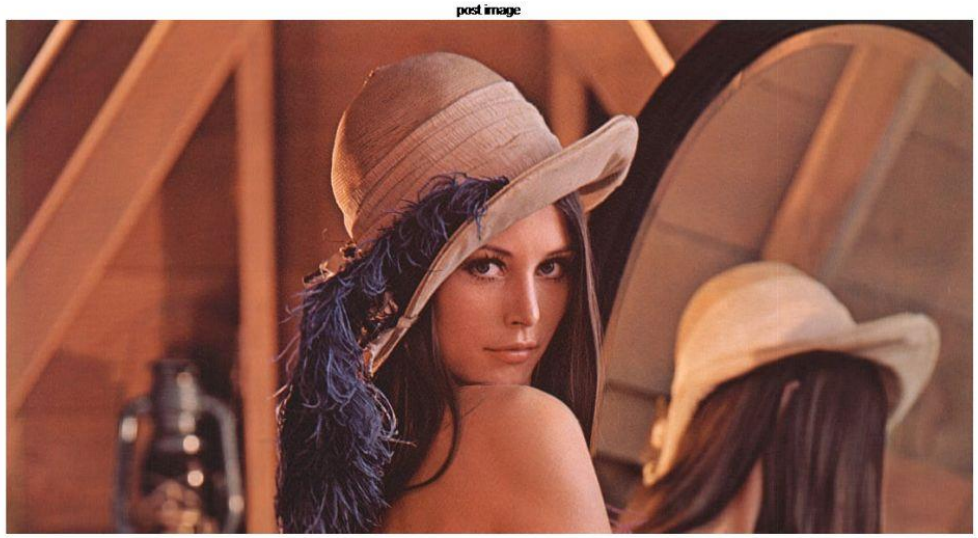


2.SVD(奇异值分解)

SVD案例



原始图像



处理后的图像

$m = 575,\ \ n = 1081,\ \ k = 150$

原始维度$A = 575 \times 1081 \times 3 = 1864725$

设$k = 150$，则经过SVD分解后的矩阵及维度：

$U_{m\times k} = 575 \times 150$，$\sum_{k\times k} = 150 \times 150$，$V^T_{k\times n} = 1081 \times 150$

则原始图像经过压缩后的维度：$3 \times (575 \times 150 + 150 \times 150 + 1081 \times 150) = 812700$

3.PCA(主成分分析)

01 降维概述

02 SVD(奇异值分解)

03 PCA(主成分分析)

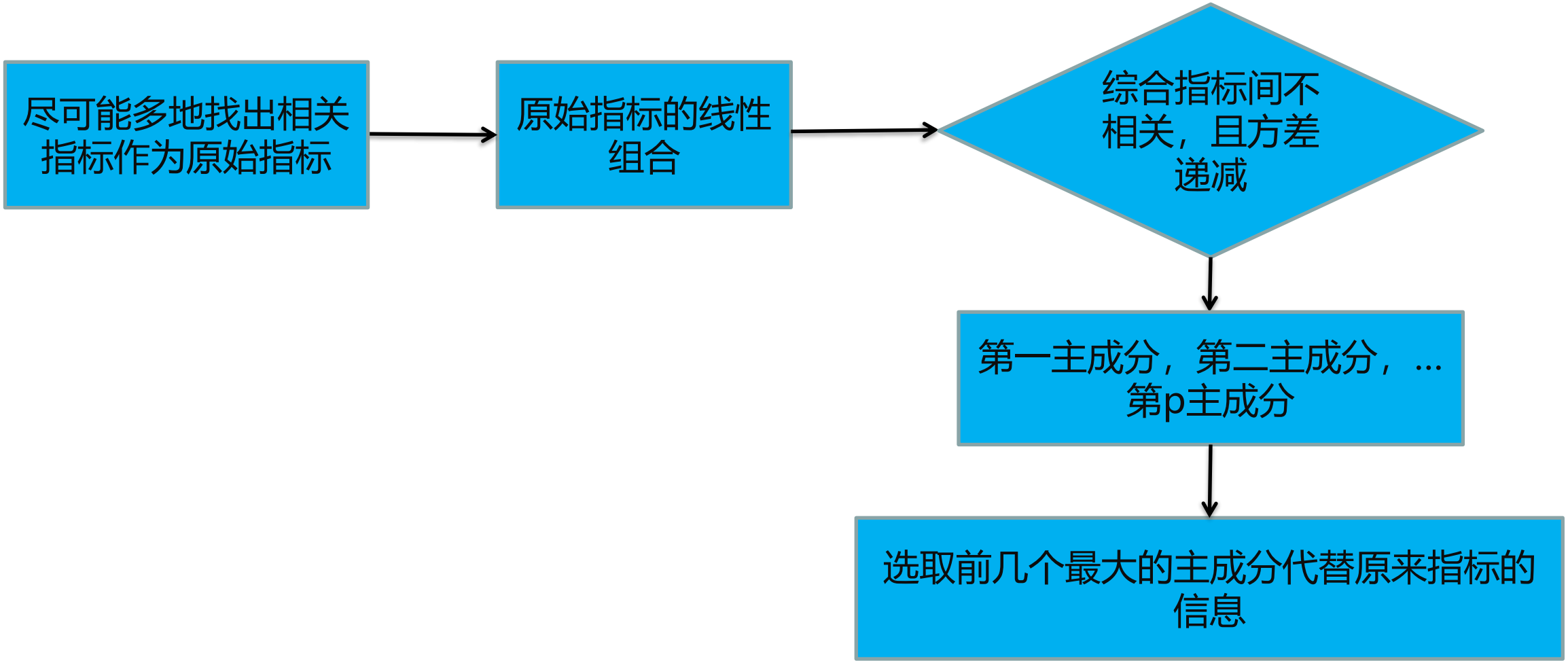
3.PCA(主成分分析)

主成分分析（Principal Component Analysis,PCA）是一种降维方法，通过将一个大的特征集转换成一个较小的特征集，这个特征集**仍然包含了原始数据中的大部分信息**，从而降低了原始数据的维数。

减少一个数据集的特征数量自然是以牺牲准确性为代价的，但降维的诀窍是用一点准确性换取简单性。因为更小的数据集更容易探索和可视化，并且对于机器学习算法来说，分析数据会更快、更容易，而不需要处理额外的特征。

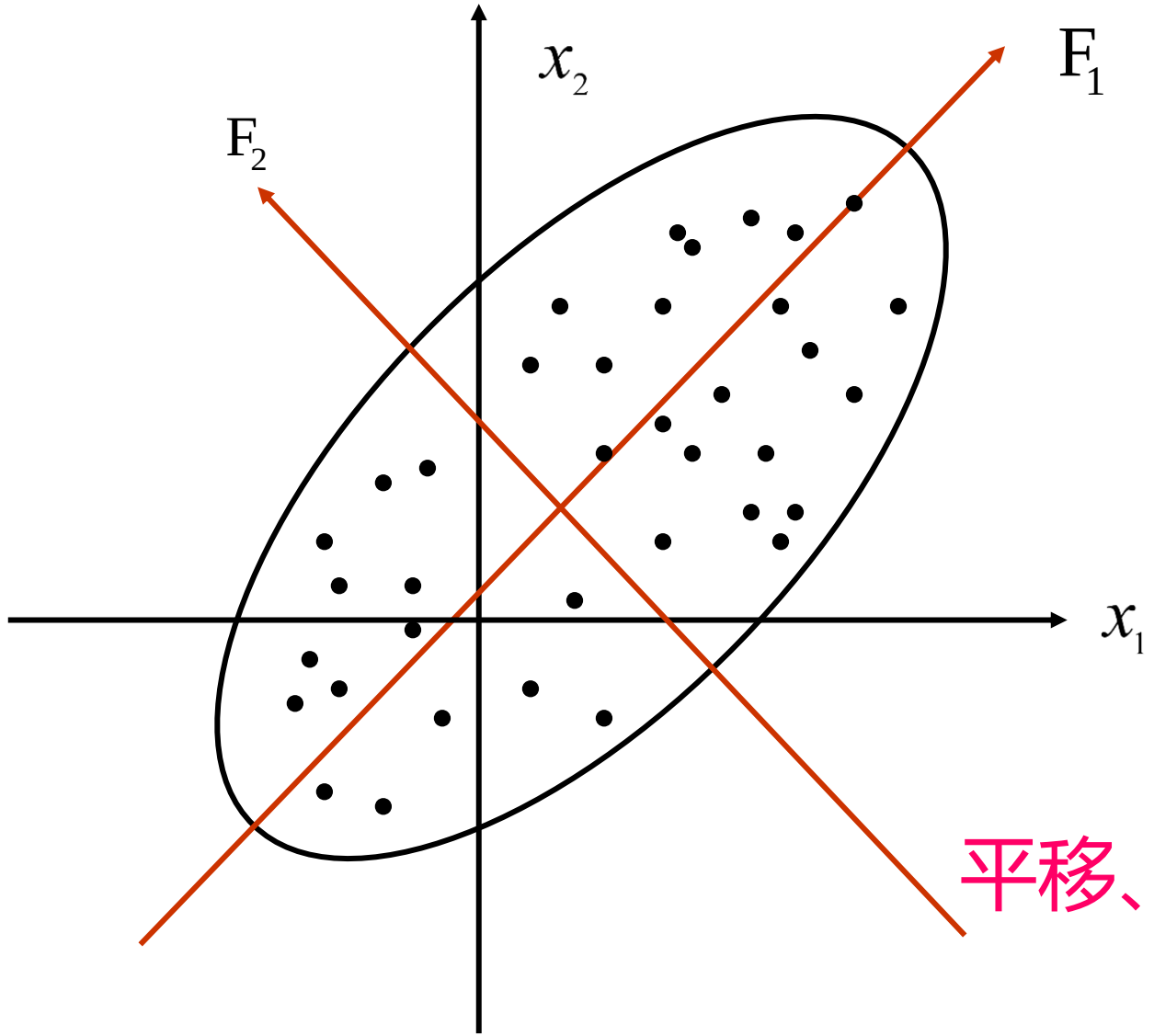
3.PCA(主成分分析)

主成分分析流程图：



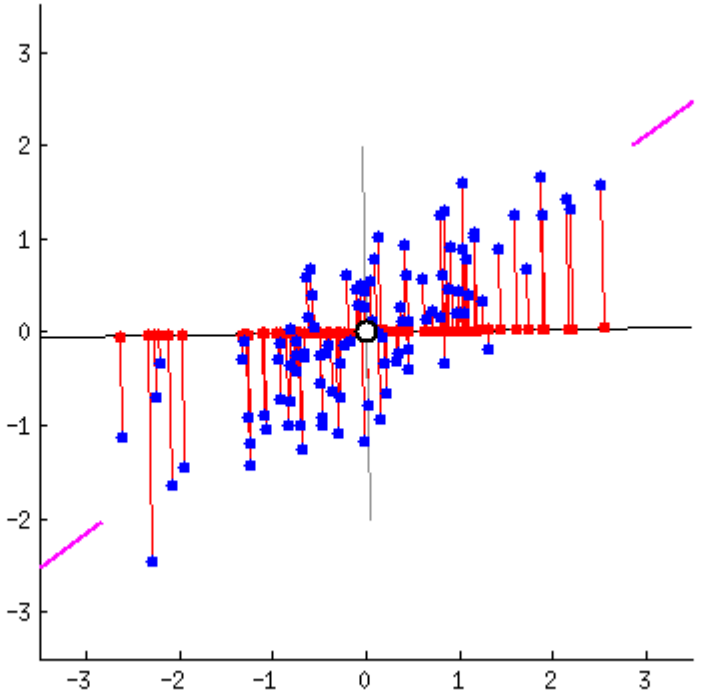
3.PCA(主成分分析)

主成分分析的几何解释



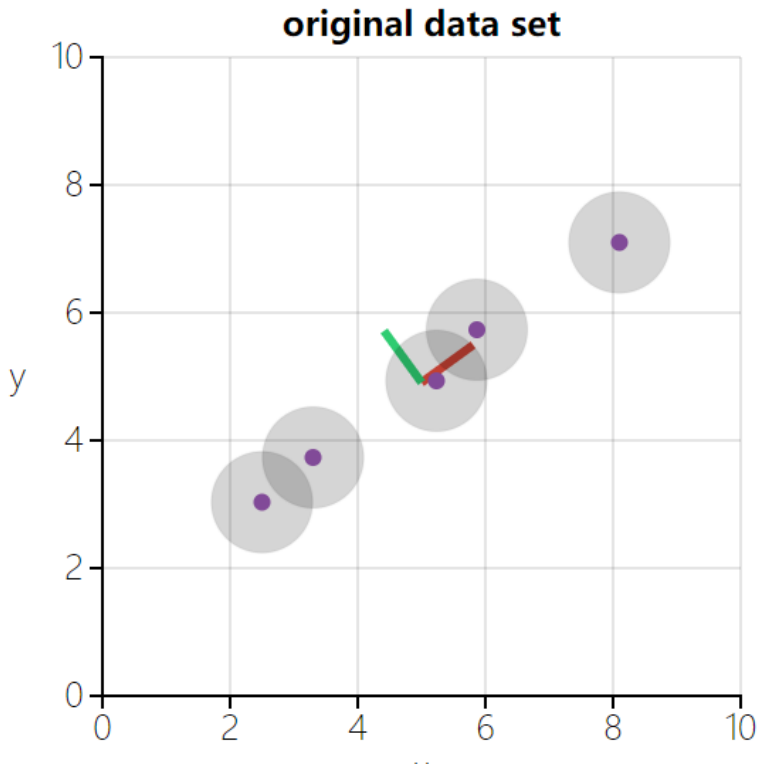
平移、旋转坐标轴

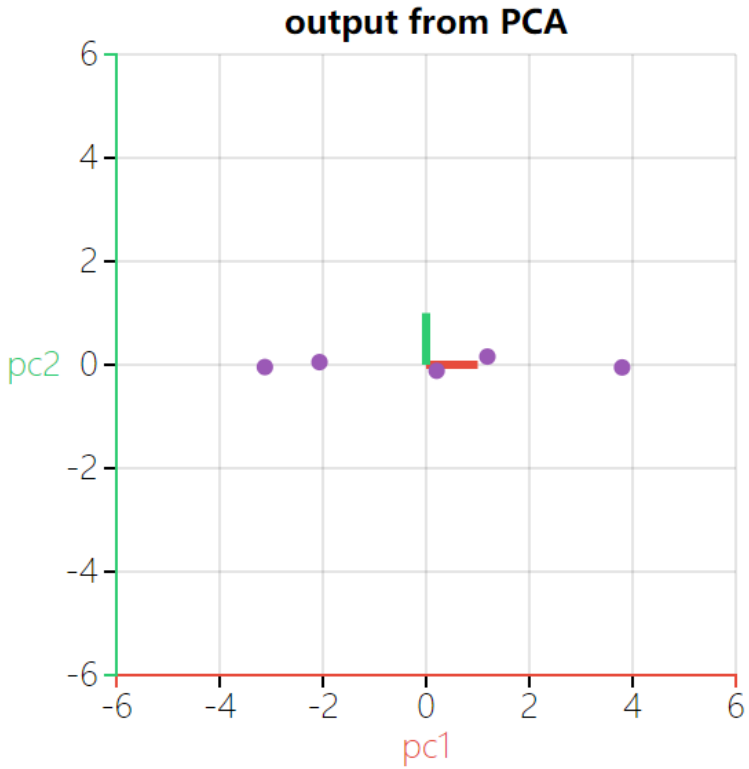
3.PCA(主成分分析)



PCA的思想很简单——减少数据集的特征数量，同时尽可能地保留信息。

3.PCA(主成分分析)





通过平移、旋转坐标轴，找到主成分pc1和pc2

3.PCA(主成分分析)

PCA识别在训练集中占最大方差量的轴。

在图1中，它是实线。 它还找到与第一个轴正交的第二个轴，它考虑了剩余方差的最大量。在这个2D示例中，没有选择：它是虚线。如果它是一个更高维的数据集，PCA还会找到与前两个轴正交的第三个轴，以及第四个，第五个等等 - 与数据集中的维数一样多的轴。

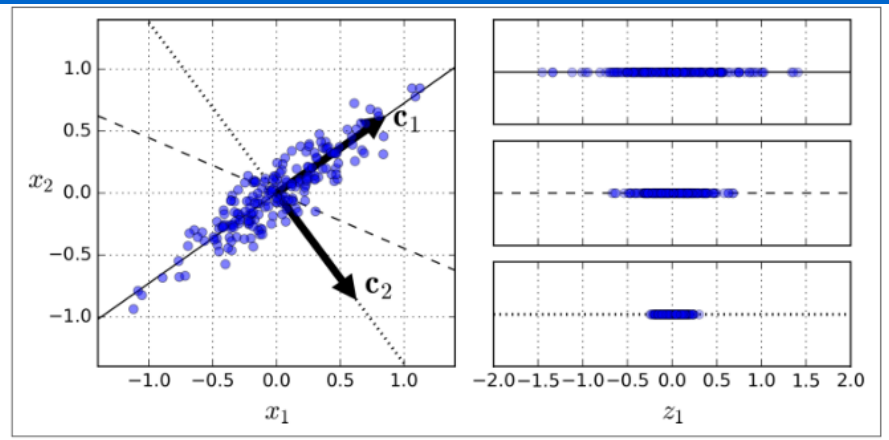


图1 选择要投影到的子空间

定义第 i 轴的单位向量称为第 i 个主成分 (PC) 。

- 在图1中，第一个 **PC**为 c_1，第二个 **PC** 为 c_2 。
- 在图2中，前两个 **PC**由平面中的正交箭头表示，第三个 PC与平面正交（向上或向下）。

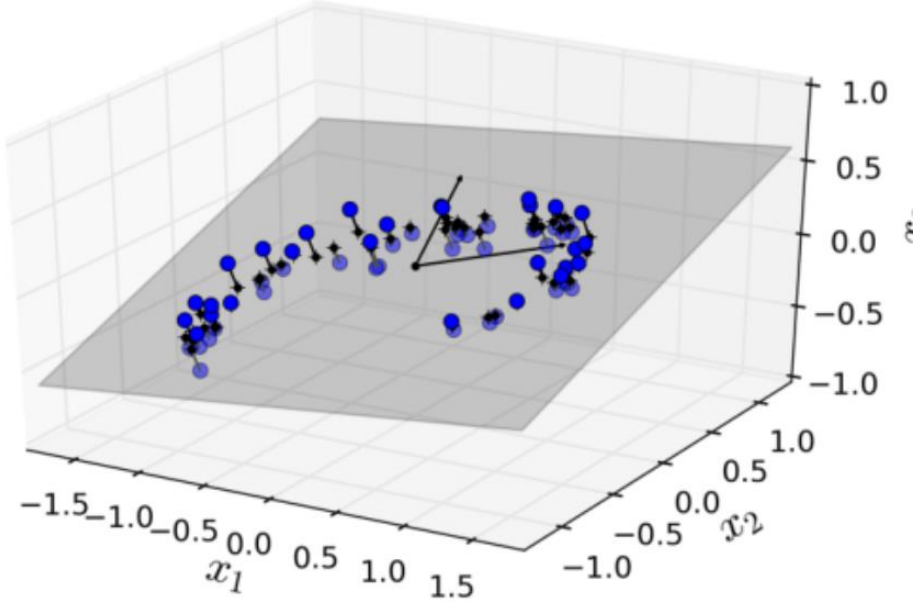


图2

3.PCA(主成分分析)

如何得到这些包含最大差异性的主成分方向呢?

通过计算数据矩阵的协方差矩阵

然后得到协方差矩阵的特征值特征向量

选择特征值最大(即方差最大)的k个特征所对应的特征向量组成的矩阵。

这样就可以将数据矩阵转换到新的空间当中，实现数据特征的降维。

3.PCA(主成分分析)

PCA的算法两种实现方法

(1) 基于SVD分解协方差矩阵实现PCA算法

(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

3.PCA(主成分分析)

(1)基于SVD分解协方差矩阵实现PCA算法

PCA 减少n维到k维：

设有m条n维数据，将原始数据按列组成n行m列矩阵X

第一步是均值归一化。我们需要计算出所有特征的均值，然后令 $x_j = x_j - \mu_j$。（μ_j为均值）。如果特征是在不同的数量级上，我们还需要将其除以标准差 σ^2。

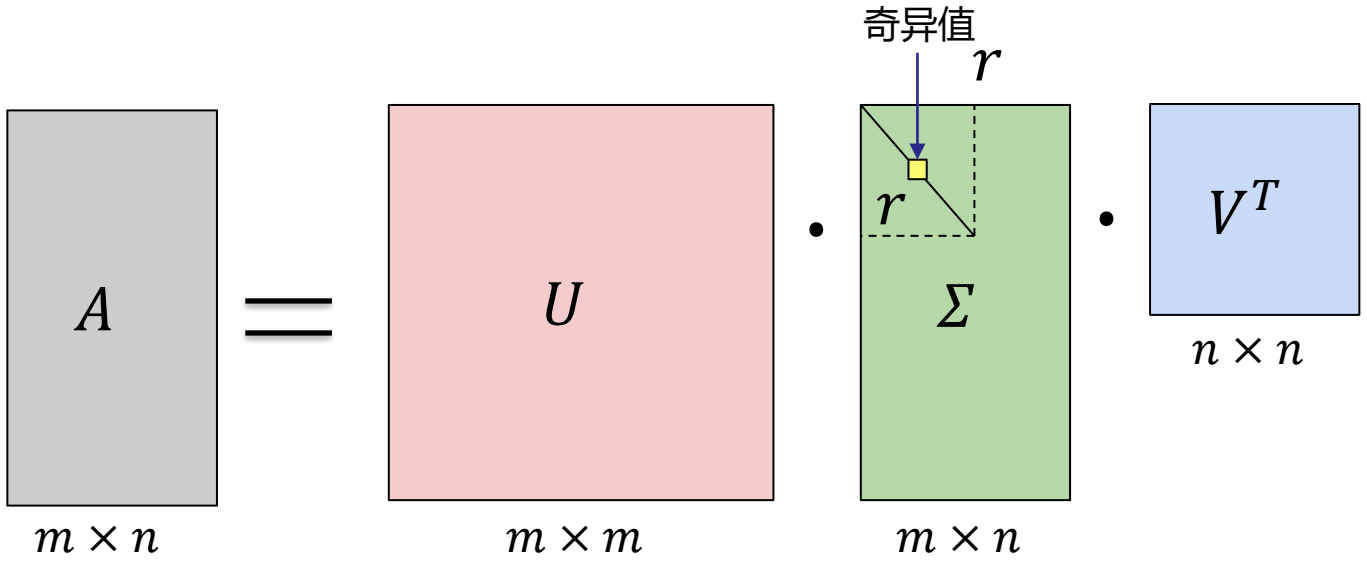
第二步是计算**协方差矩阵**（**covariance matrix**）Σ：

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

第三步是计算协方差矩阵Σ的**特征向量**（**eigenvectors**）,可以利用奇异值分解(SVD)来求解。

3.PCA(主成分分析)

奇异值分解（SVD）的标准矩阵分解技术可以将训练集矩阵 A 分解为**三个矩阵** $U \cdot \Sigma \cdot V^T$ **的点积**，其中 V^T 包含我们正在寻找的所有主成分。



3.PCA(主成分分析)

(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

背景知识

1) 特征值与特征向量

如果一个向量v是矩阵A的特征向量，将一定可以表示成下面的形式：

$$Av = \lambda v$$

其中，λ是特征向量A对应的特征值，一个矩阵的一组特征向量是一组正交向量。

3.PCA(主成分分析)

(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

2) 特征值分解矩阵

对于矩阵A，有一组特征向量v，将这组向量进行正交化单位化，就能得到一组正交单位向量。特征值分解，就是将矩阵A分解为如下式：

$$A = P\Sigma P^{-1}$$

其中，P是矩阵A的特征向量组成的矩阵，Σ则是一个对角阵，对角线上的元素就是特征值。

备注：对于正交矩阵P，有$P^{-1} = P^{T}$

3.PCA(主成分分析)

(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

设有m条n维数据，将原始数据按列组成n行m列矩阵X

1）均值归一化。我们需要计算出所有特征的均值，然后令 $x_j = x_j - \mu_j$。（μ_j为均值）。

如果特征是在不同的数量级上，我们还需要将其除以标准差 σ^2。

2）计算协方差矩阵Σ。 $\sum = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{n}\left(x^{(i)}\right)\left(x^{(i)}\right)^T$

3）用特征值分解方法计算协方差矩阵Σ的特征值和特征向量。

4）对特征值从大到小排序，选择其中最大的k个。然后将其对应的k个特征向量分别作为行向量组成特征向量矩阵P。

5）将数据转换到k个特征向量构建的新空间中，即 $Y = PX$。

3.PCA(主成分分析)

PCA的算法案例

$$X = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

以这个为例，我们用PCA的方法将这组二维数据降到一维

因为这个矩阵的每行已经是零均值，所以我们可以直接求协方差矩阵：

$$\Sigma = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & -2 \\ -1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{6}{5} \end{pmatrix}$$

3.PCA(主成分分析)

然后求∑的特征值和特征向量：

$$|A-\lambda E| = \begin{vmatrix} \frac{6}{5}-\lambda & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{6}{5}-\lambda \end{vmatrix} = (\frac{6}{5}-\lambda)^2 - \frac{16}{25} = (\lambda-2)(\lambda-2/5) = 0$$

求解得到特征值：$\lambda_1 = 2,\ \lambda_2 = 2/5$

其对应的特征向量分别是：$\sum_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \sum_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$

3.PCA(主成分分析)

由于对应的特征向量分别是一个通解， $\sum_1$和$\sum_2$可取任意实数。那么标准化后的特征向量为：

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

因此我们的矩阵P是：

$$P = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

3.PCA(主成分分析)

可以验证协方差矩阵∑的对角化

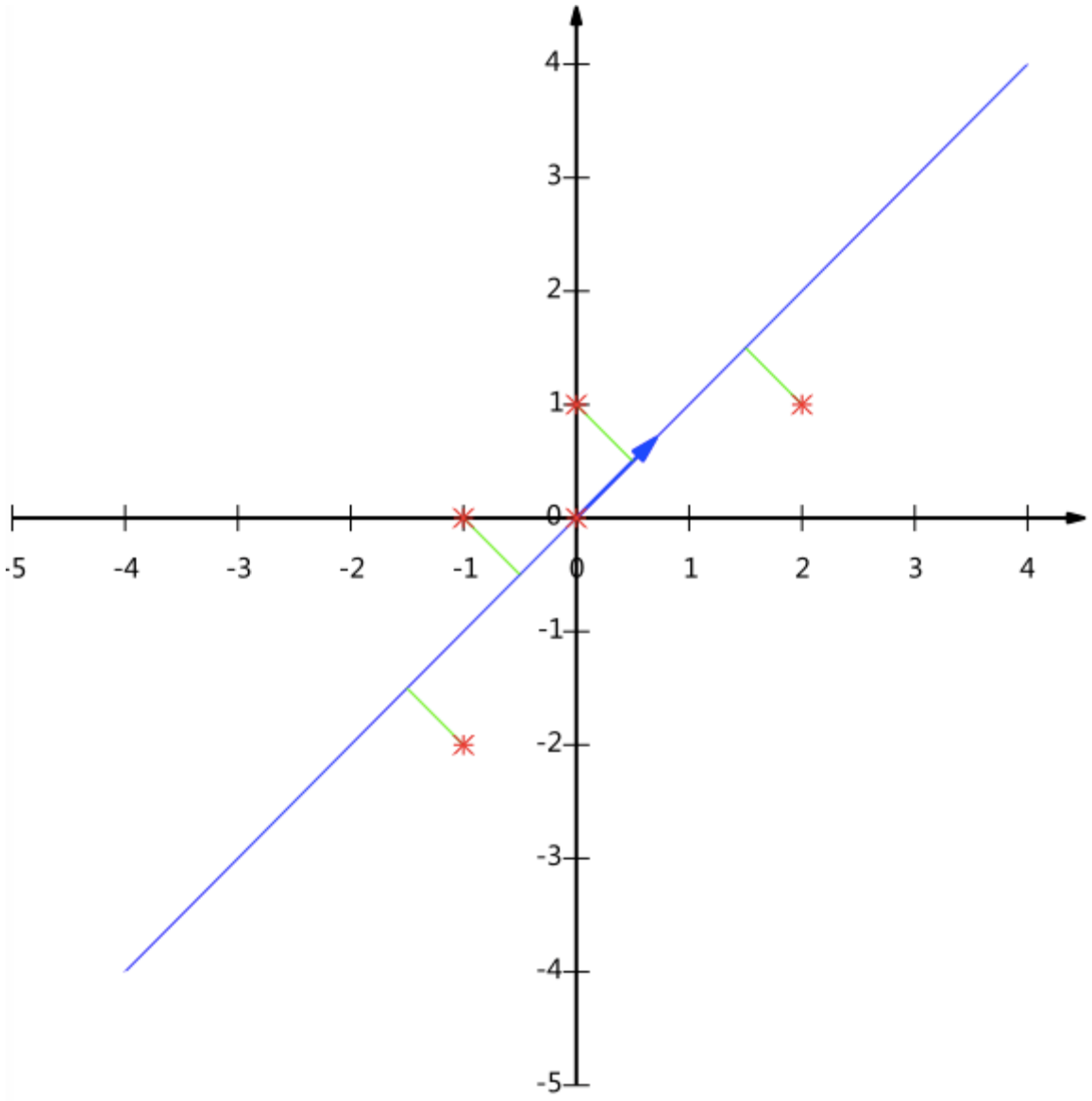
$$P\sum P^T = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6/5 & 4/5 \\ 4/5 & 6/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2/5 \end{pmatrix}$$

最后我们用P的第一行乘以数据矩阵，就得到了降维后的数据表示：

$$Y = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 & 3/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

3.PCA(主成分分析)

降维后的投影结果如下图：



3.PCA(主成分分析)

PCA算法优点

1.仅仅需要以方差衡量信息量,不受数据集以外的因素影响

2.各主成分之间正交,可消除原始数据成分间的相互影响的因素

3.计算方法简单,主要运算时特征值分解,易于实现

4.它是无监督学习,完全无参数限制的

PCA算法缺点

1.主成分各个特征维度的含义具有一定的模糊性,不如原始样本特征的解释性强

2.方差小的非主成分也可能含有对样本差异的重要信息,因降维丢弃可能对后续数据处理有影响

参考文献

[1] Andrew Ng. Machine Learning[EB/OL]. Stanford University,2014. https://www.coursera.org/course/ml

[2] Hinton, G, E, et al. Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks.[J]. Science, 2006.

[3] Jolliffe I T . Principal Component Analysis[J]. Journal of Marketing Research, 2002, 87(4):513.

[4] 李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社,2019.

[5] Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning[M]. Springer, New York, NY, 2001.

[6] Peter Harrington.机器学习实战[M]. 人民邮电出版社,2013.


谢 谢!