2020年春季学期
计算学部《机器学习》课程

Lab4 实验报告

姓名	许健
学号	1183710113
班号	1837101
电子邮件	941197279@qq.com
手机号码	18945062342

1 实验目的

实现一个PCA模型，能够对给定数据进行降维（即找到其中的主成分）

2 实验要求及实验环境

2.1 实验要求

测试：

1. 首先人工生成一些数据（如三维数据），让它们主要分布在低维空间中，如首先让某个维度的方差远小于其它唯独，然后对这些数据旋转。生成这些数据后，用你的PCA方法进行主成分提取。
2. 找一个人脸数据（小点样本量），用你实现PCA方法对该数据降维，找出一些主成分，然后用这些主成分对每一副人脸图像进行重建，比较一些它们与原图像有多大差别（用信噪比衡量）。

2.2 实验环境

Windows 10, Python 3.8.5, Jupyter notebook

3 实验原理

PCA(主成分分析，Principal Component Analysis)是最常用的一种降维方法。PCA的主要思想是将D维特征通过一组投影向量映射到K维上，这K维是全新的正交特征，称之为主成分，采用主成分作为数据的代表，有效地降低了数据维度，且保留了最多的信息。关于PCA的推导有两种方式：最大投影方差和最小投影距离。

- 最大投影方差：样本点在这个超平面上的投影尽可能分开
- 最小投影距离：样本点到这个超平面的距离都足够近

3.1 中心化

在开始PCA之前需要对数据进行预处理，即对数据中心化。设数据集 $X=\{x_1,x_2,\dots,x_n\}$，其中 $x_i=\{x_{i1},x_{i2},\dots,x_{id}\}$，即 X 是一个 $n\times d$ 的矩阵。则此数据集的中心向量（均值向量）为：

$$\mu=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$$

对数据集每个样本均进行操作：$x_i=x_i-\mu$，就得到了中心化后的数据，此时有 $\sum\limits_{i=1}^{n}x_i=0$。

中心化可以给后面的计算带来极大的便利，因为中心化之后的常规线性变换就是绕原点的旋转变化，也就是坐标变换。此时，协方差为 $S=\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}x_ix_i^T=\frac{1}{n}X^TX$

设使用的投影坐标系的一组**标准正交基**为 $U_{k\times d}=\{u_1,u_2,\dots,u_k\}$，$k<d, u_i=\{u_{i1},u_{i2},\dots,u_{id}\}$，故有 $UU^T=1$，使用这组基变换中心化矩阵 X，得降维压缩后的矩阵 $Y_{n\times k}=XU^T$，重建得到 $\hat{X}=YU=XU^TU$。

3.2 最大投影方差

对于任意一个样本 x_i，在新的坐标系中的投影为 $y_i = x_i U^T$，在新坐标系中的投影方差为 $y_i^T y_i = U x_i^T x_i U^T$。要使所有的样本的投影方差和最大，也就是求 $\arg\max_U \sum_{i=1}^{n} U x_i^T x_i U^T$，即

$$\arg\max_U \ tr(UX^T XU^T) \qquad s.t. \ UU^T = 1$$

求解：在 u_1 方向投影后的方差

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{u_1^T x_i - u_1^T \mu\}^2 = \frac{1}{n}(Xu_1^T)^T(Xu_1^T) = \frac{1}{n}u_1 X^T X u_1^T = u_1 S u_1^T$$

因为 u_1 是投影方向，且已经假设它是单位向量，即 $u_1^T u_1 = 1$，用拉格朗日乘子法最大化目标函数：

$$L(u_1) = u_1^T S u_1 + \lambda_1(1 - u_1^T u_1)$$

对 u_1 求导，令导数等于0，解得 $Su_1 = \lambda_1 u_1$，显然，u_1 和 λ_1 是一组对应的 S 的特征向量和特征值，所以有 $u_1^T S u_1 = \lambda_1$，结合在 u_1 方向投影后的方差式，可得求得最大化方差，等价于求最大的特征值。

要将 d 维的数据降维到 k 维，只需计算前 k 个最大的特征值，将其对应的特征向量（$d \times 1$ 的）转为行向量（$1 \times d$ 的）组合成特征向量矩阵 $U_{k\times d}$，则降维压缩后的矩阵为 $Y = XU^T$ 。

3.3 最小投影距离

现在考虑整个样本集，希望所有的样本到这个超平面的距离足够近，也就是得到 Y 后，与 X 的距离最小。即求：

$$\begin{aligned}
\arg\min_U \sum_{i=1}^{n} ||\hat{x}_i - x_i||_2^2 &= \arg\min_U \sum_{i=1}^{n} ||x_i U^T U - x_i||_2^2 \\
&= \arg\min_U \sum_{i=1}^{n} ((x_i U^T U)(x_i U^T U)^T - 2(x_i U^T U)x_i^T + x_i x_i^T) \\
&= \arg\min_U \sum_{i=1}^{n} (x_i U^T U U^T U x_i^T - 2x_i U^T U x_i^T + x_i x_i^T) \\
&= \arg\min_U \sum_{i=1}^{n} (-x_i U^T U x_i^T + x_i x_i^T) \\
&= \arg\min_U - \sum_{i=1}^{n} x_i U^T U x_i^T + \sum_{i=1}^{n} x_i x_i^T \\
&\Leftrightarrow \arg\min_U - \sum_{i=1}^{n} x_i U^T U x_i^T \\
&\Leftrightarrow \arg\max_U \sum_{i=1}^{n} x_i U^T U x_i^T \\
&= \arg\max_U \ tr(U(\sum_{i=1}^{n} x_i^T x_i)U^T) \\
&= \arg\max_U \ tr(UX^T XU^T) \qquad s.t. \ UU^T = 1
\end{aligned}$$

可以看到，这个式子与我们在最大投影方差中得到的式子是一致的，这就说明了这两种方式求得的结果是相同的。

PCA实现：

```python
def pca(x, k):
    n = x.shape[0]
    mu = np.sum(x, axis=0) / n
    x_centralized = x - mu
    cov = (x_centralized.T @ x_centralized) / n
    values, vectors = np.linalg.eig(cov)
    index = np.argsort(values) # 从小到大排序后的下标序列
    vectors = vectors[:, index[:-(k+1):-1]].T # 把序列逆向排列然后取前k个，转为行向量
    return x_centralized, mu, vectors
```

4 实验结果分析

4.1 生成数据测试

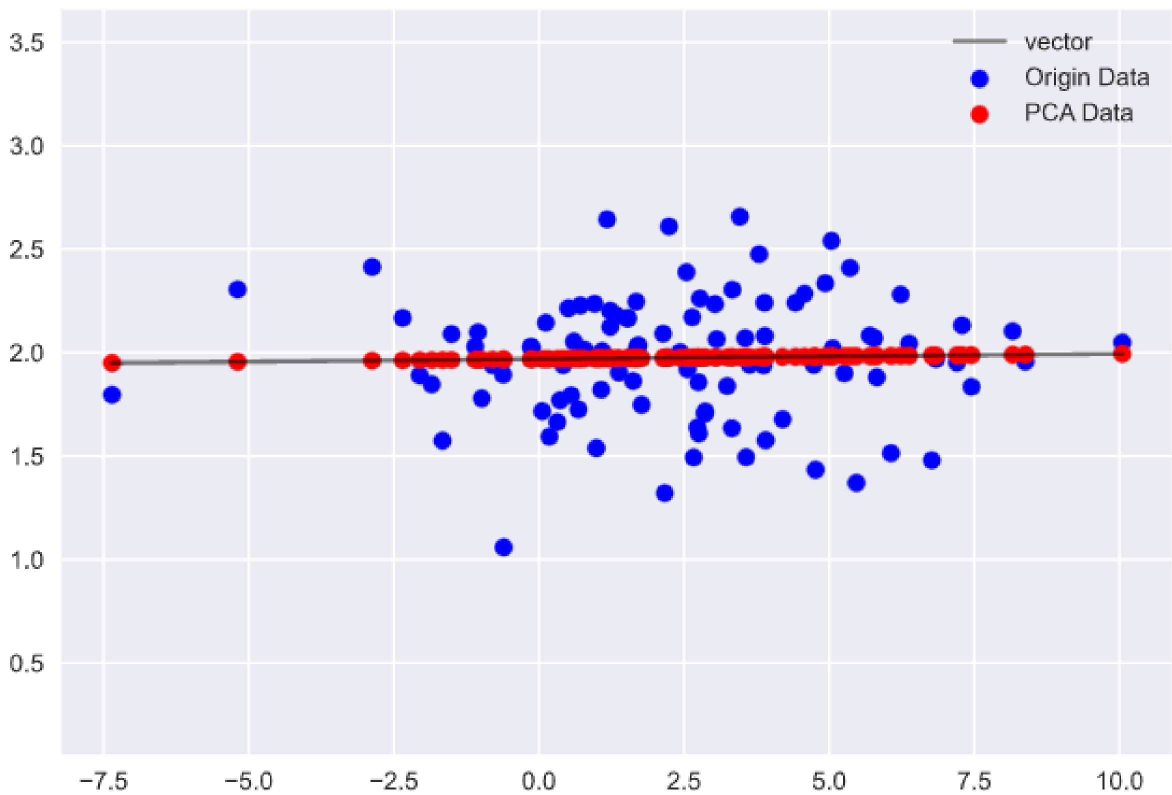
为了方便进行数据可视化，在这里只进行了2维数据和3维数据的在PCA前后的对比实验。

4.1.1 二维降到一维

生成高斯分布数据的参数:

$$\mu = [2, 2], \ \sigma = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$$

可以看到第2维的方差远小于第1维的方差，因此直观感觉在第2维包含了更多的信息，所以直接进行PCA，得到的结果如下:



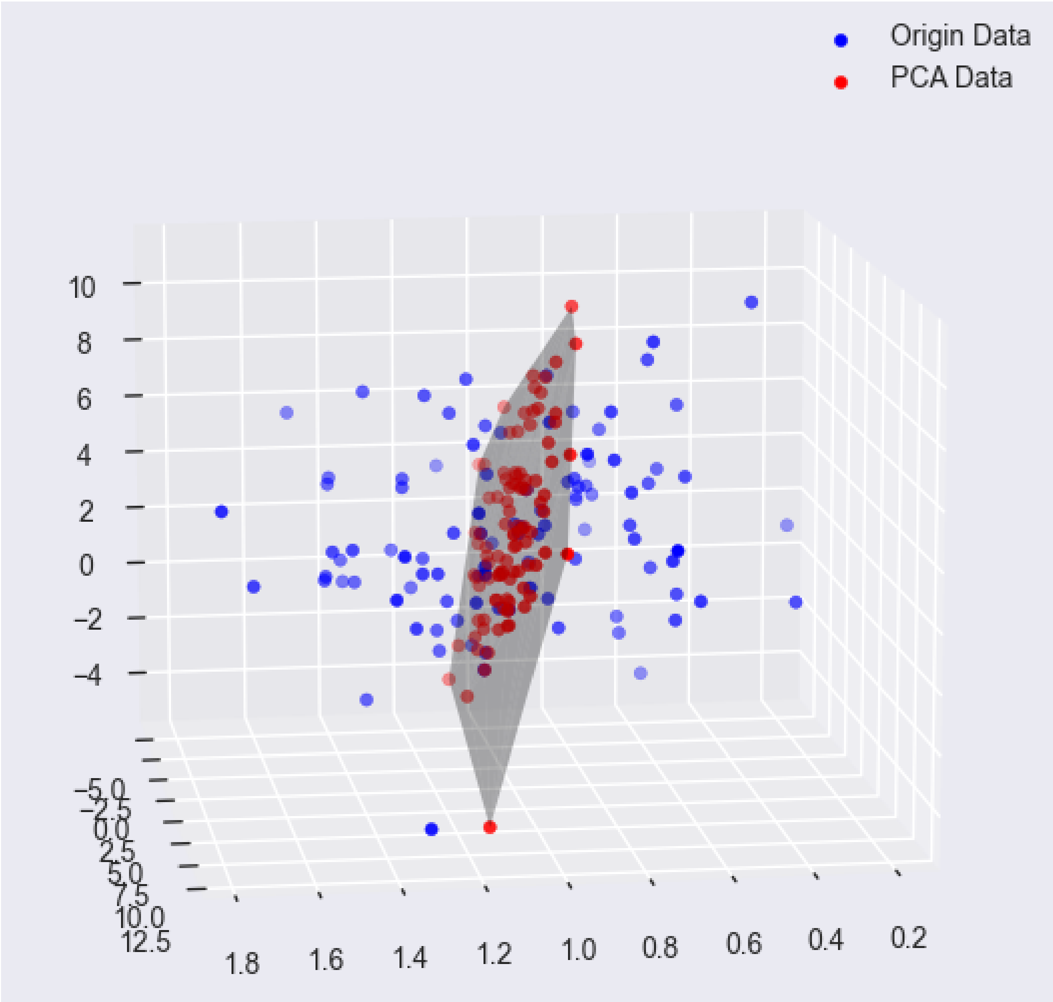
可以看到在PCA之后的数据分布在直线(1维)上，另外其在横轴上的方差更大，纵轴上的方差更小，所以在进行PCA之后得到的直线与横轴接近。

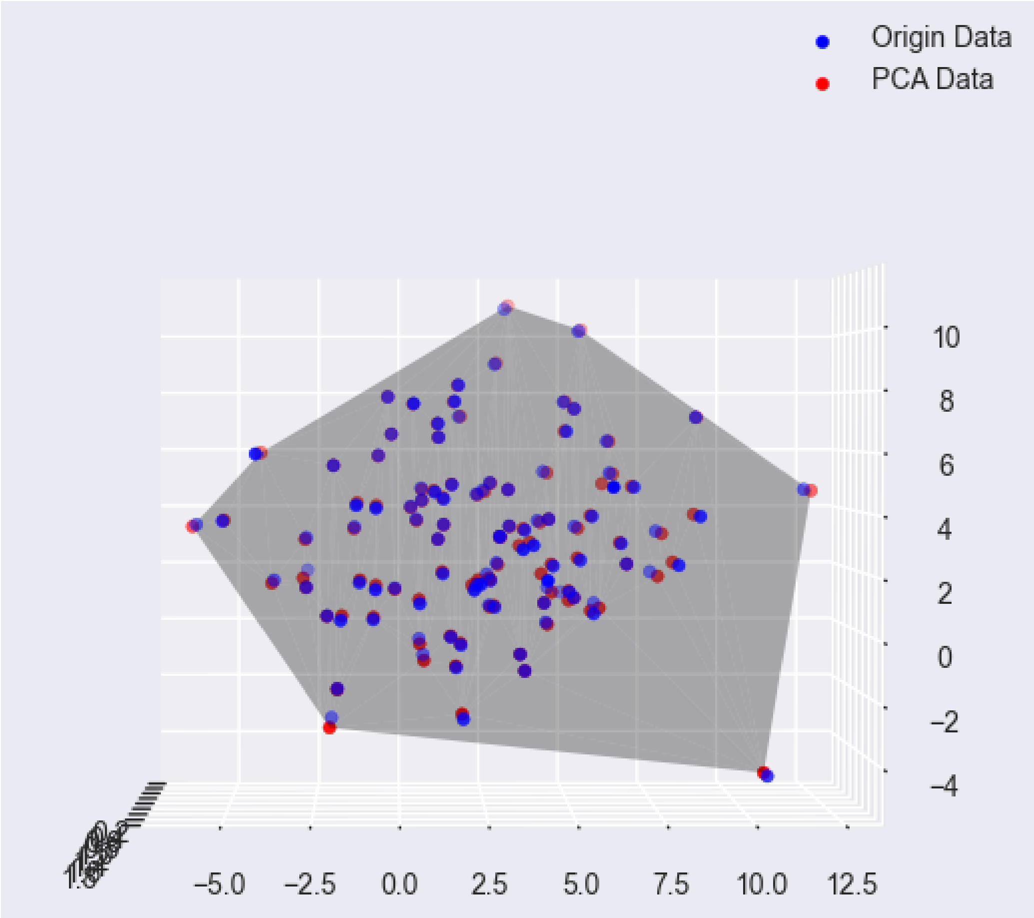
4.1.2 三维降到二维

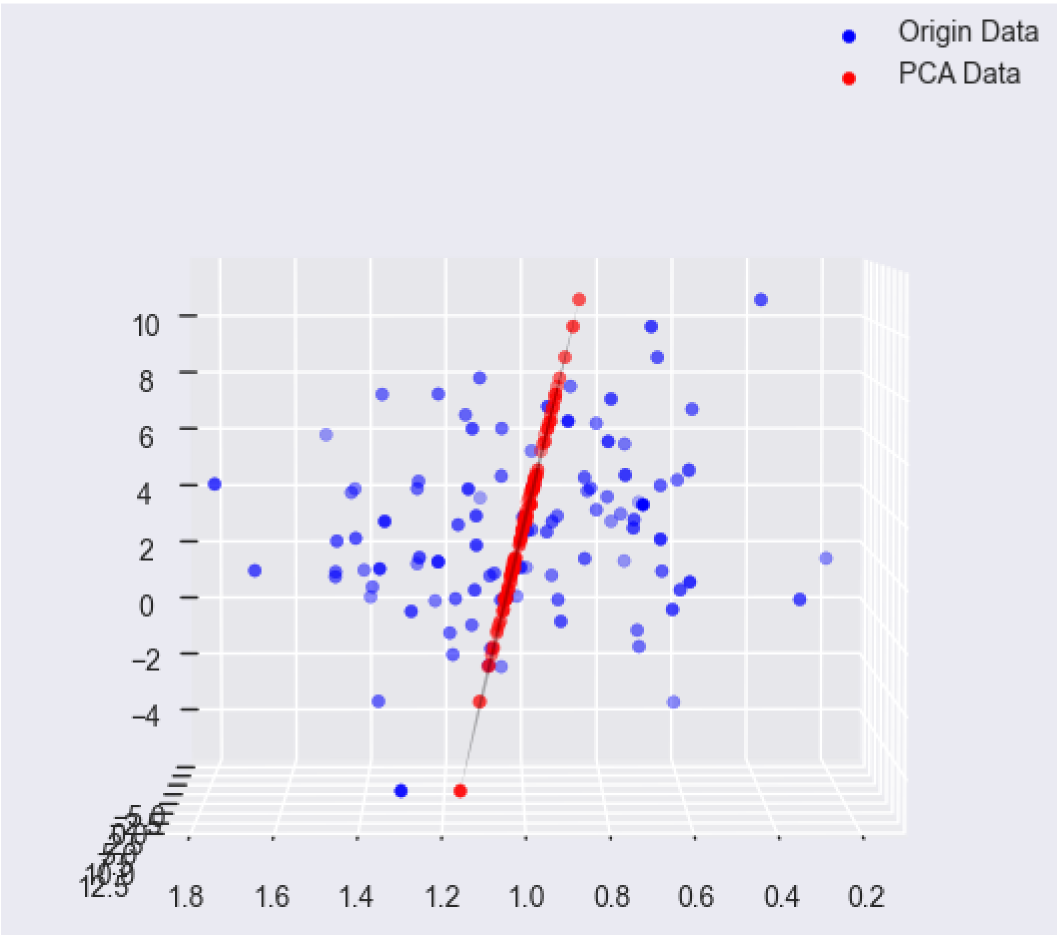
生成高斯分布数据的参数:

$$\mu = [1,2,3],\ \sigma = \begin{bmatrix} 0.1 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$$

同样，可以看到第1维的方差是远小于其余两个维度的，所以在第1维相较于其他两维信息更少，如下是PCA得到的结果的不同方向:







4.2 人脸数据测试

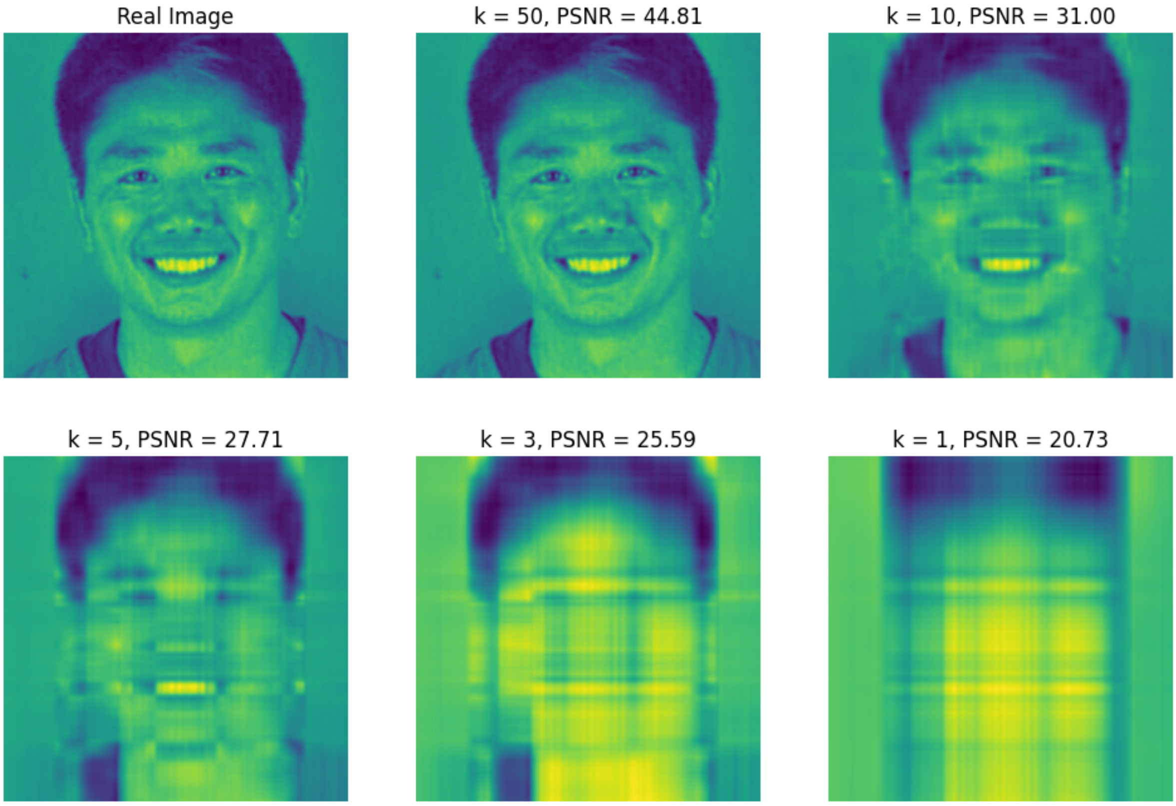
信噪比计算公式

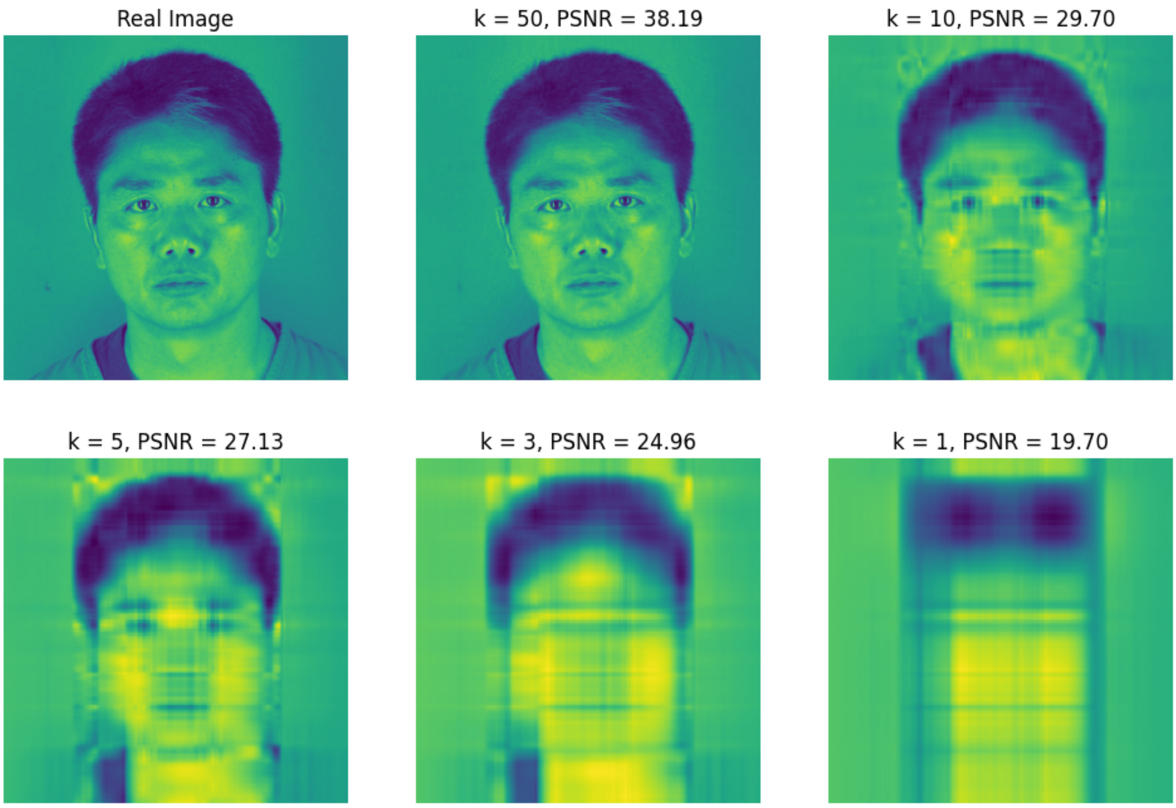
$$MSE = \frac{1}{MN}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}||I(i,j) - K(i,j)||^2$$

$$PSNR = 10 \cdot \log_{10}\left(\frac{MAX_I^2}{MSE}\right) = 20 \cdot \log_{10}\left(\frac{MAX_I}{\sqrt{MSE}}\right)$$

4.2.1 有背景人脸数据

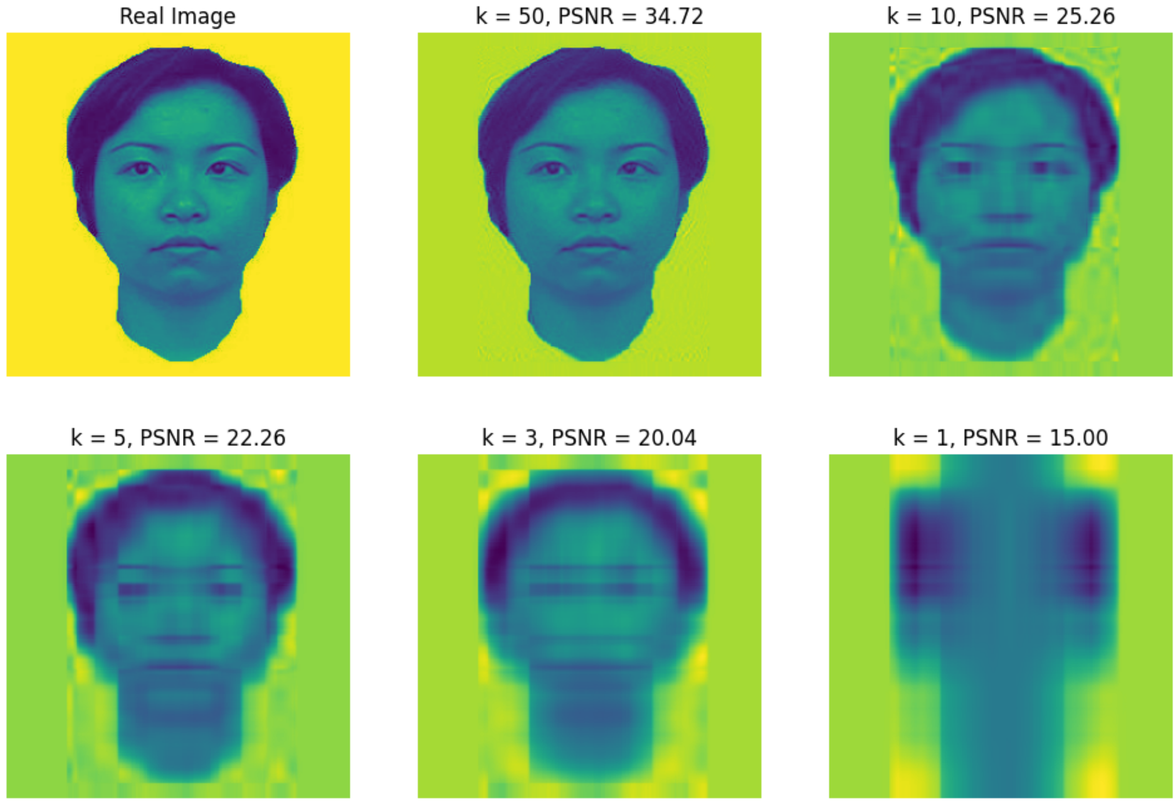
原图大小为 400×400

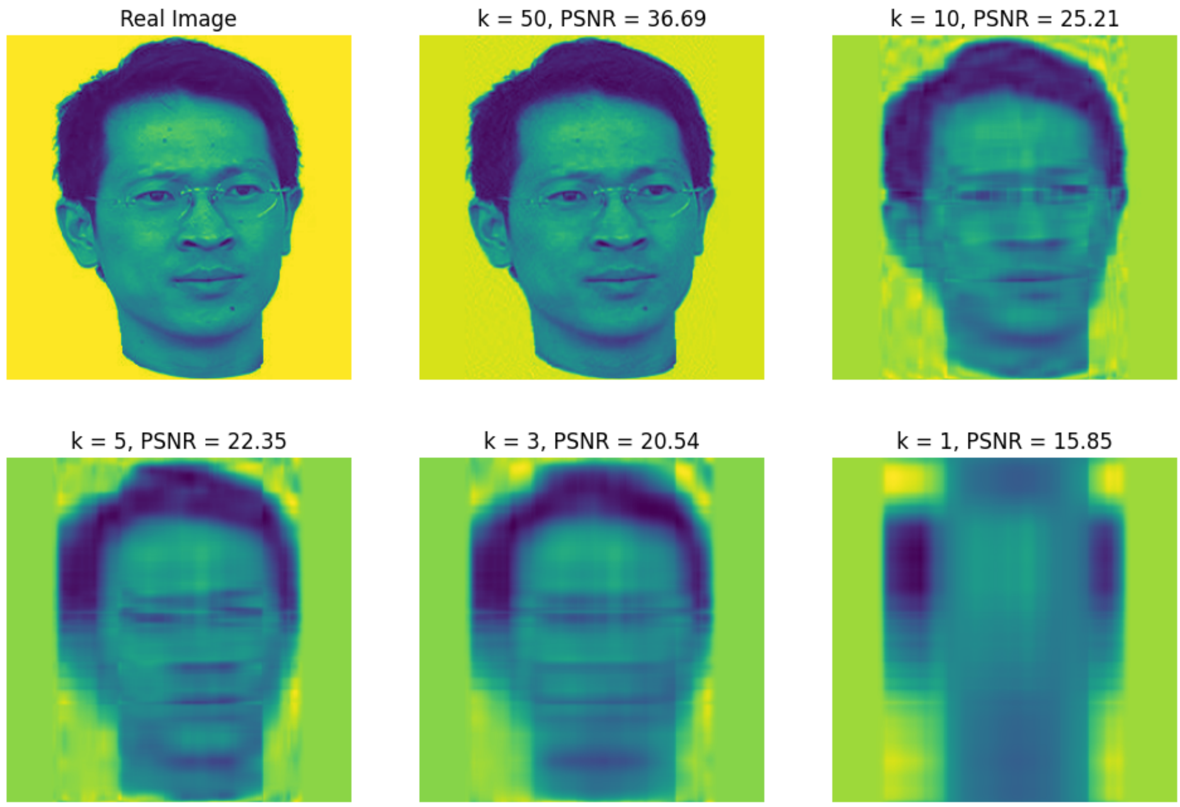


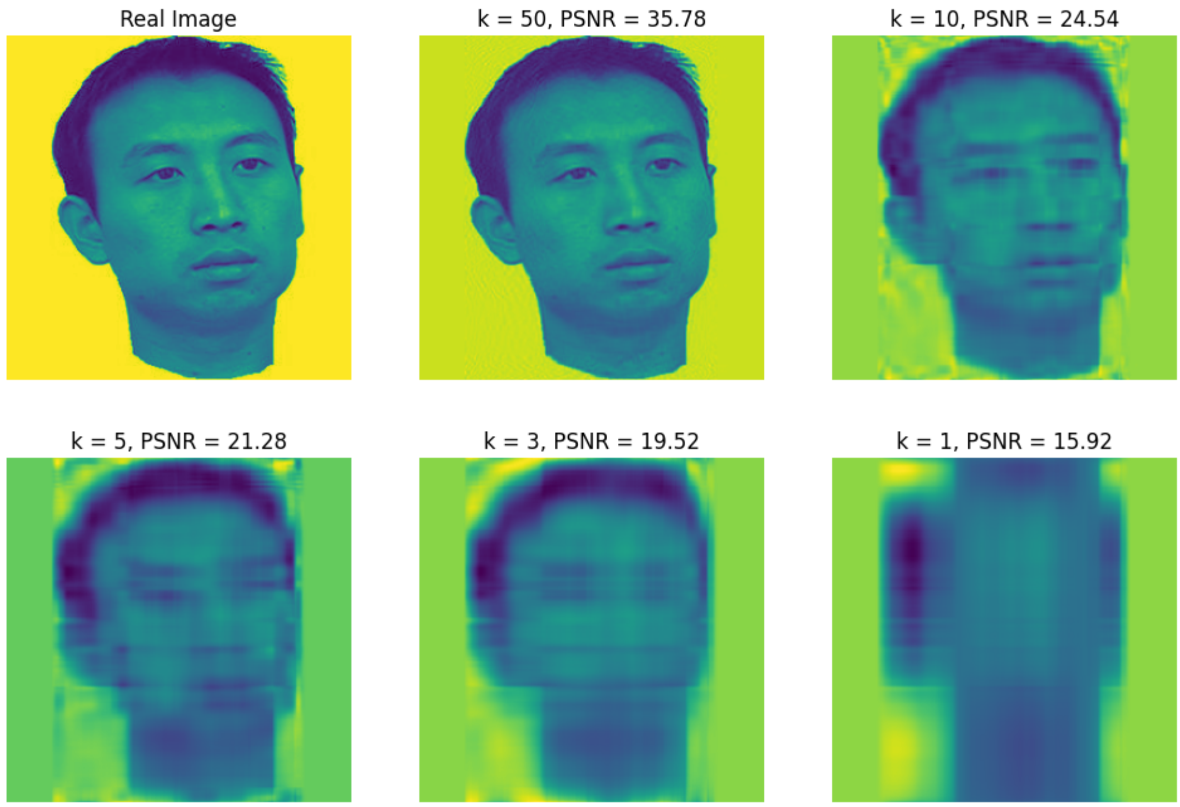


4.2.2 无背景人脸

原图大小为 250×250







通过结果可以看出，无论是有背景的还是无背景的人脸图片，在降到 $k=50$ 时，都能较好的保留图片特征，人眼几乎无法分辨损失，降到 $k=10$ 时，图片有了较为明显的损失，降到 $k=3$ 时，图片损失扩大，仅能判断出该图原本是个人像，这些情况下有无背景的差别并不大。但在降到 $k=1$ 时，有背景的图片已经无法看出原图是一张人像，但无背景的图片仍然保留了人头像的大致轮廓。

但是从信噪比的角度来看，无论是降到几维，有背景图片的信噪比一直大于无背景图片的信噪比。

5 结论

1. PCA降低了训练数据的维度的同时保留了主要信息，但在训练集上的主要信息未必是重要信息，被舍弃掉的信息未必无用，只是在训练数据上没有表现，因此PCA也有可能加重了过拟合。
2. PCA算法中舍弃了 $d-k$ 个最小的特征值对应的特征向量，一定会导致低维空间与高维空间不同，但是通过这种方式有效提高了样本的采样密度；并且由于较小特征值对应的往往与噪声相关，通过PCA在一定程度上起到了降噪的效果。
3. PCA用于图片的降维可以极大地缓解存储压力，尤其是在如今像素越来越高的情况下。使用PCA降维我们只需要存储三个比较小的矩阵，能够较大地节省存储空间。