哈尔滨工业大学计算学部

实验报告

课程名称: 机器学习

课程类型: 选修

实验题目: PCA

学号: 1190201215 姓名: 冯开来

一、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)

二、实验要求及实验环境

2.1 实验要求

(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维度,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

Windows10; python3.9; PyCharm 2021.2.2

三、设计思想(本程序中的用到的主要算法及数据结构)

3.1 主要算法

核心算法就是 PCA (主成分分析) 降维算法。其作用是从高维数据中提取出最重要的几维特征,根据这些特征在进行重构,重构后的图像有别于原图但又可以清晰的辨认出原图。

PCA 有两种比较常见的方法,一个是最大方差,另一个是最小重构代价。两者其实本质是相同的。最大方差形式通俗描述就是将高维空间向某一超平面投影,投影得到的点的方差最大,从而最能代表原数据。如一个椭球体,投影为正面椭圆的方差最大,而不是侧面投影的的圆的方差最大。

因此可以推导如下:

一组数据 $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\}, X \in D \times N$ 的矩阵 μ_i 是一个投影后的基向量,当然有一组基向量,我们拿其中一个分析

容易得到数据均值:

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$$

数据方差:

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^T (x_i - \bar{x})$$

投影均值:

$$\overline{\hat{x}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mu^{T} x_{i}$$

投影后的方差为:

$$\hat{S} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\mu^{T} x_{i} - \mu^{T} \bar{x})^{T} (\mu^{T} x_{i} - \mu^{T} \bar{x})$$

$$= \mu^{T} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_{i} - \bar{x})^{T} (x_{i} - \bar{x}) \mu$$

$$= \mu^{T} S \mu$$

注意让方差 S 最大, 我们可以用拉格朗日乘子法:

$$L(w,\lambda) = \mu^T S \mu + \lambda (1 - \mu^T \mu)$$

然后对其求导,令极值等于0解得:

$$S\mu_1 = \lambda \mu_1$$

故求得最大化方差,即求最大的特征值。要将 D 维的数据降维到 P 维度,只需计算前 P 个最大的特征值,将其对应的特征向量组合成特征向量矩阵(DxP),然后用右乘数据矩阵的转置即可实现降维压缩。

3.2 算法实现

见附录源代码。这里附上 PCA 算法的代码:

```
PCA 降维
data 数量*维度 nxd
data_mean 样本均值
eigValInd 排序好的特征值 dxk
redEigVects 降维后的特征值
2'''

def PCA(data, k = 2):
    rows, cols = data.shape
    data_mean = np.sum(data, 0) / rows
    data_center = data - data_mean # 中心化 nxd
    covMat = np.dot(data_center.T, data_center) # dxd
    eigVals, eigVects = np.linalg.eig(covMat) # 求协方差矩阵特征值和特征向量,特征向量按列读取dxd
    eigValInd = np.argsort(eigVals) # 特征值排序
    redEigVects = eigVects[: ,eigValInd[: -(k+1): -1]] # 序列逆向排列,取前k个特征向量dxk.
    redEigVects = np.real(redEigVects) # 如果出现复向量,对其保留实部
    data_tmp = np.dot(data_center, redEigVects) # 降维后的数据 nxk
    data_recon = np.dot(data_tmp, redEigVects.T) + data_mean # 重构后的数据 nxd
    return redEigVects, data_recon
```

首先将数据中心化处理(减去平均值),然后通过生成的中心化的数据生成协方差矩阵。求协方差矩阵的特征值和特征向量,对特征值排序取前 k 个最大的特征值对应的特征向量,即我们要找的降维后的特征向量,当然如果特征向量存在虚部的话,直接保留实部就行。

接下来就是对数据重构,直接将中心化数据乘特征向量矩阵得到投影数据值, 为得到坐标,再右乘一个特征向量矩阵,最后假设均值即完成数据重构。

正常返回的应该是 DxN 的矩阵,但我这里返回的是 NxD 的矩阵,其本质没有区别。

四、实验结果与分析

4.1 人工生成数据的降维

4.1.1 生成 Swiss Roll 模型

流形学习中的经常会遇到 Swiss Roll 数据集。该数据集是把二维空间中的点映射到三维空间中,以便进行数据降维测试。该数据集正投影为漩涡状,侧投影为矩形。根据 Swiss Roll 的"厚度"变化,其特征投影面将从"薄瑞士卷"的正投影,变为"厚瑞士卷"的侧投影。

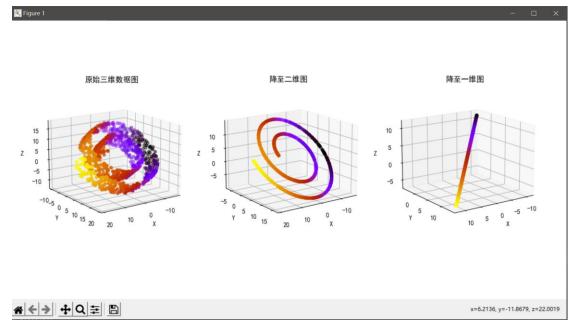
本次实验有 1000 个数据点,每个点有三个属性,分别是 $x \times y \times z$ 轴的坐标。并得到 Swiss Roll 后让其绕着 x 轴需旋转一定角度(默认 45°)。具体的生成代码如下:

其中绕轴旋转的函数 rotate():

```
pdef rotate(data, theta = 0, axis = 'x'):
    if axis == 'x':
        rotate = [[1, 0, 0], [0, np.cos(theta), -np.sin(theta)], [0, np.sin(theta), np.cos(theta)]]
    return np.dot(rotate, data)
elif axis == 'y':
    rotate = [[np.cos(theta), 0, np.sin(theta)], [0, 1, 0], [-np.sin(theta), 0, np.cos(theta)]]
    return np.dot(rotate, data)
elif axis == 'z':
    rotate = [[np.cos(theta), -np.sin(theta), 0], [np.sin(theta), np.cos(theta), 0], [0, 0, 1]]
    return np.dot(rotate, data)
else:
    print('ERROR asix')
    return X
```

4.1.1 PCA 降维(3D-2D-1D)

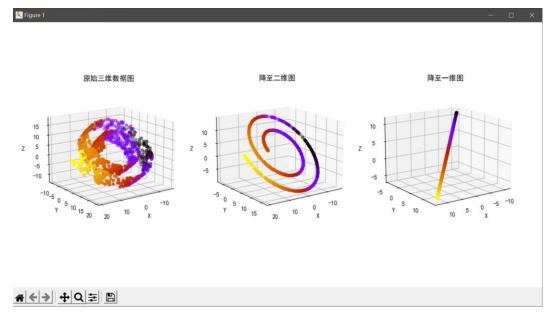
原本数据集是三维,我们先将数据降成二维,最后再降成一维。根据常识我们可以知道,二维是平面,而一维是直线,所以带入函数我们可以得到下面的展示结果:



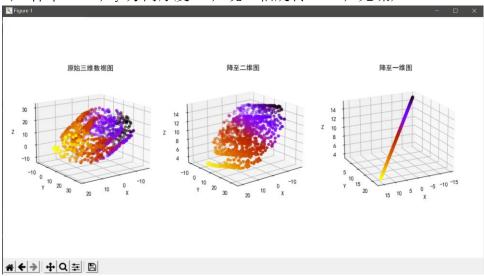
并且得到降维到二维和一维的特征向量:

4.1.3 演示结果与分析

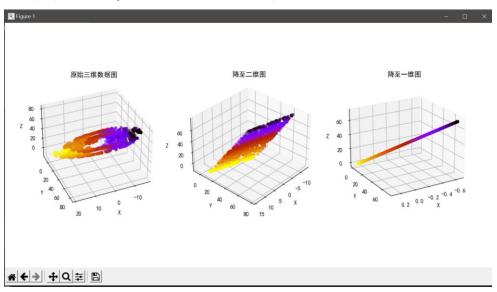
1) 样本 1000; y 方向厚度 10; 绕 x 轴旋转 45°; 无噪声



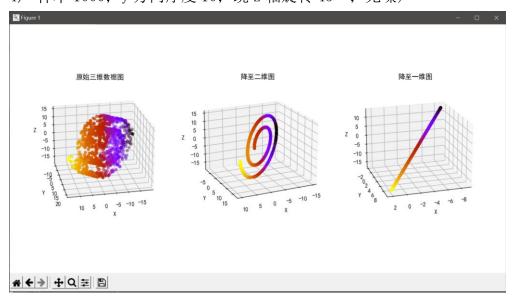
2) 样本 1000; y 方向厚度 30; 绕 x 轴旋转 45°; 无噪声



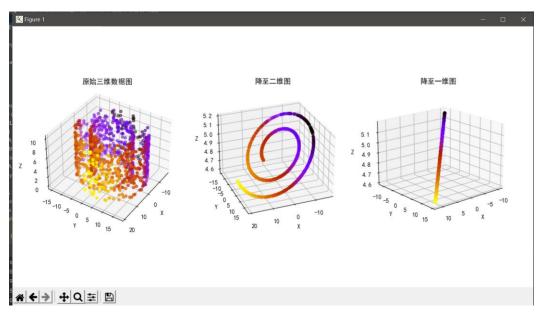
3) 样本 1000; y 方向厚度 100; 绕 x 轴旋转 45°; 无噪声



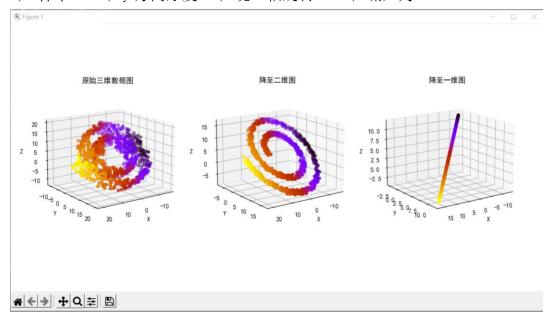
4) 样本 1000; y 方向厚度 10; 绕 z 轴旋转 45°; 无噪声



5) 样本 1000; y 方向厚度 10; 绕 x 轴旋转 90°; 无噪声



6) 样本 1000; y 方向厚度 10; 绕 x 轴旋转 45°; 噪声为 2



结果分析:

- 1. PCA 成功地将 3 维立体图降维至 2 维平面图再至 1 维直线图
- 2. 在改变旋转轴和旋转角度可以发现降维仍是成功的
- 3. 对比实验 1、2、3,可以发现在逐渐将 y 方向厚度增加的时候,二维图的平面开始不太一样,从原来漩涡状逐渐因为厚度增加而变成矩形状,这也可以看到主成分 y 分量在其中的影响,而随后的降至一维的时候,线的方向也因此改变,也逐渐平行于 y 分量(因为 y 方向主成分占比越来越大)
- 4. 对比实验 1、4、5、6,可以发现无论怎么旋转角度或是绕什么轴旋转,最后得到的一维主成分都是一样或是相近的,说明确实找到了最重要的主成分。

4.2 人脸数据降维

4.2.1 读取文件图片

本次实验图片来源一开始都是英雄联盟头像图片,后来再换人脸做了一遍。读取图像的方法运用了 OpenCV 库的函数,并且为了减少计算时间,我们统一把图片压缩成 40x40 的大小,然后我们将每一张图片的尺寸压缩成一个向量,就是一张图片有 1600 个属性。具体代码如下:

```
### Preserved to be a size of the content of the c
```

4.2.2 PCA 降维(三次降维)

本次实验我认为是通过几张图片找到主成分完成重构。自己在床上想了想, 应该有很多用处,比如我可以通过多张一个人的不同角度和表情的图片重构出 这个人重要的面部信息,或是通过多个人正面照片得到平均脸。本次实验原来 的维度是 1600,首先降维至 5,再降维至 3,最后降至 1 维。

在实际计算求解特征向量的时候,特征向量会出现虚部的问题,只要保留实部就能得到较好的结果。

不过有一说一,维度越低,重构的数据越诡异···而且最后,所有的图片似乎都会融合在一起,每张一维图片都有别的图片的影子···具体代码如下:

4.2.3 计算信噪比

信噪比计算公式: 方差定义为:

$$MSE = \frac{1}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} ||I(i,j) - K(i,j)||^{2}$$

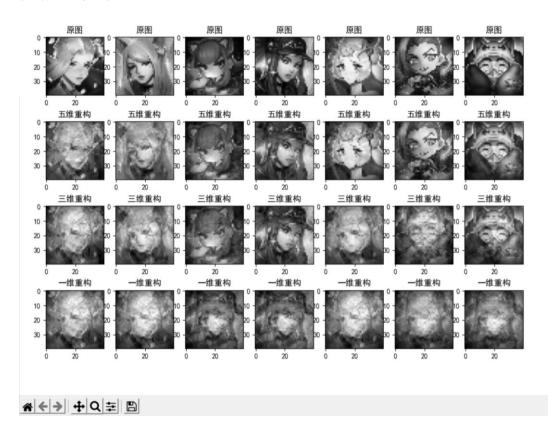
峰值信噪比定义为:

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

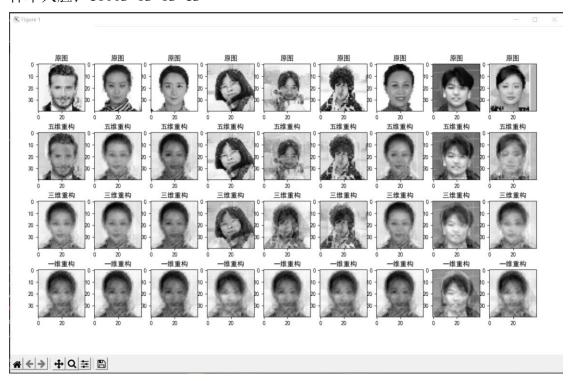
具体代码如下:

4.2.4 演示结果与分析

样本卡通头像; 1600D-5D-3D-1D



样本人脸: 1600D-5D-3D-1D



```
图 0 的信噪比为: 21.344213753573392
[ 0.03356954  0.00666298 -0.00100419  0.00728027  0.00198169]
[ 0.03501474  0.01952235 -0.01358057  0.00032695 -0.00496782]]
[ 0.03389631  0.00795047  0.00142006]
                                                                 图 3 的信噪比为: 22.58906384860972
图 4 的信噪比为: 14.876127781384108
 [ 0.03356954  0.00666298  -0.00100419]
 [ 0.0380599 -0.00557503 0.02080448]
 [ 0.02115017  0.01459823  -0.00478009]
[ 0.03501474  0.01952235 -0.01358057]]
                                                                  图 8 的信噪比为: 15.439204667238817
[[0.0282555]
[0.03389631]
[0.03356954]
 [0.0380599]
                                                                 图 6 的信噪比为: 16.33979795822405
图 7 的信噪比为: 20.017442467560723
 [0.02115017]
 [0.03501474]]
```

结果分析:

- 1. 维度降低,重构图像越偏离原图,信噪比也越低(也偶尔有突然增高的)
- 2. 从 1600 维到 5 维, 图像仍保存较好还原度, 当然应该也是图片太少的原因
- 3. 图像出现原图偏离的维度与样本数量成正比,即样本数量越多,在同一维度下越容易产生重构的偏离
- 4. 个人认为重构在某种程度上是将几张图片融为一体,所以 PCA 降维可以用来通过多张图片学习出一张平均图
- 5. 在降维至3维到1维的时候,信噪比已经没有说明区别了,但是可以看到3 维图像还是比1维图像更有辨认度
- 6. 该部分可以看到有明显的学习过程,如果样本越多,最后重构出的图像越相似
- 7. psnr 是有效衡量图像压缩信号重构的指标。

五、结论

- 1. PCA 模型通过降维可以适当抑制过拟合
- 2. PCA 训练舍弃了 d-k 个信息,这一定会导致低维空间与高维空间不同,但是这种方式提高了样本的采样密度,同时说不定还能降噪。
- 3. PCA 在对一组图像进行降维的时候有明显的学习过程,图片越多,它会将更多信息融合在一起,也就更容易造成与原图的偏离。但是我们将一组相近的图片进行 PCA 降维,那可以找到这一组图片的共同点,比如识别出什么是人脸,什么是汽车等。
- 4. PCA 舍弃"次要成分"; 但是对于测试集而言,被舍弃的也许正好是重要的信息,也就是说 PCA 可能会加剧过拟合

六、参考文献

- 1. (CSDN) 图像峰值信噪比计算方法
 - https://blog.csdn.net/xrinosvip/article/details/88569111
- 2. (知乎) 瑞士卷 (Swiss Roll) 模型生成方式 https://www.zhihu.com/question/391236862

七、附录:源代码(带注释)

""

(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

远小于其它维度,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)。

import matplotlib.pyplot as plt import matplotlib as mpl import numpy as np import math import cv2 import os

from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

""

PCA 降维 data 数量*维度 nxd data_mean 样本均值 eigValInd 排序好的特征值 dxk redEigVects 降维后的特征值

def PCA(data, k = 2):

rows, cols = data.shape
data_mean = np.sum(data, 0) / rows
data_center = data - data_mean # 中心化 nxd
covMat = np.dot(data_center.T, data_center) # dxd

eigVals, eigVects = np.linalg.eig(covMat)# 求协方差矩阵特征值和特征向量,特征向量按列读取 dxd

eigValInd = np.argsort(eigVals) # 特征值排序
redEigVects = eigVects[: ,eigValInd[: -(k+1): -1]] # 序列逆向排列,取前 k 个特征向量 dxk,
redEigVects = np.real(redEigVects) # 如果出现复向量,对其保留实部
data tmp = np.dot(data center, redEigVects) # 降维后的数据 nxk

```
return redEigVects, data_recon
生成瑞士卷数据 nxd
n sample 数据点数量
noise 数据店的噪声
y scale y 方向厚度
def make swiss roll(n sample = 1000, noise = 0.0, y scale = 10, degree = 45):
    t = 2 * np.pi * (1 + 2 * np.random.rand(1, n sample)) # 定义变量
    x = t * np.cos(t) # 定义 x 方向数据
    y = y scale * np.random.rand(1, n sample)
    z = t * np.sin(t)
    data = np.concatenate((x, y, z)) # 将三维数据压缩成一个向量, 即数据有三个属性
    data += noise * np.random.rand(3, n sample) # 加入噪声
    data = rotate(data, np.pi * degree / 180, 'x') # 绕 x 轴旋转 degree, 默认 45
    # show 3D(data.T)
    return data.T# 得到 nxd
def rotate(data, theta = 0, axis = 'x'):
    if axis == 'x':
         rotate = [[1, 0, 0], [0, np.cos(theta), -np.sin(theta)], [0, np.sin(theta), np.cos(theta)]]
         return np.dot(rotate, data)
    elif axis == 'y':
         rotate = [[np.cos(theta), 0, np.sin(theta)], [0, 1, 0], [-np.sin(theta), 0, np.cos(theta)]]
         return np.dot(rotate, data)
    elif axis == 'z':
         rotate = [[np.cos(theta), -np.sin(theta), 0], [np.sin(theta), np.cos(theta), 0], [0, 0, 1]]
         return np.dot(rotate, data)
    else:
         print('ERROR asix')
         return X
生成二维高斯数据
n sample 样本数量
data 维度 * 数目的矩阵
def make 2D gaussian(n sample = 100):
    mean = [-3, 4]
    cov = [[1, 0], [0, 0.01]]
    data = np.random.multivariate normal(mean, cov, n sample).T
    return data
```

data recon = np.dot(data tmp, redEigVects.T) + data mean # 重构后的数据 nxd

```
生成数据,人脸图像
图片尺寸 300x300
7张图片
返回 7x90000
def read faces(file path, size):
    file_list = os.listdir(file_path)
    data = []
    i = 1
    for file in file list:
         path = os.path.join(file path, file)
         with open(path) as f:
             img = cv2.imread(path, 0) # 参数 0, 默认灰度图打开
             img = cv2.resize(img, size) # 重新将图片压缩成 size 大小
             img col = img.reshape(img.shape[0] * img.shape[1])
             data.append(img_col) # 得到数据集
    return np.array(data)
计算信噪比
def psnr(img1, img2):
    mse = np.mean((img1/255. - img2/255.) ** 2)
    if mse < 1e-10:
        return 100
    PIXEL MAX = 1
    return 20 * math.log10(PIXEL MAX / math.sqrt(mse))
展示图像
def show_3D(x):
    fig = plt.figure()
    ax = Axes3D(fig)
    ax.view init(elev = 20, azim = 80)
    ax.scatter(x[:, 0], x[:, 1], x[:, 2], c=x[:, 0], cmap=plt.cm.gnuplot)
    ax.legend(loc = 'best')
    plt.show()
def show_2D(x):
    fig = plt.figure()
    ax = Axes3D(fig)
    ax.view_init(elev=20, azim=80)
```

```
ax.scatter(x[:, 0], x[:, 1], x[:, 2], c=x[:, 0], cmap=plt.cm.gnuplot)
    ax.legend(loc = 'best')
    plt.show()
def show 1D(x):
    fig = plt.figure()
    ax = Axes3D(fig)
    ax.view init(elev=20, azim=80)
    ax.scatter(x[:,0], x[:,1], x[:,2], c = x[:,0], cmap = plt.cm.gnuplot)
    ax.legend(loc = 'best')
    plt.show()
def show 3D to 1D(data 1, data 2, data 3):
    plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei']
    plt.rcParams['axes.unicode minus'] = False
    fig = plt.figure(figsize=(12, 6), facecolor='w')
    # cm = mpl.colors.ListedColormap(['#FFC2CC', '#C2FFCC', '#CCC2FF'])
    # cm2 = mpl.colors.ListedColormap(['#FF0000', '#00FF00', '#000FF'])
    plt.subplots adjust(left=0.05, right=0.95, bottom=0.01, top=0.99)
    ax1 = fig.add subplot(131, projection='3d')
    ax1.scatter(data 1[:, 0], data 1[:, 1], data 1[:, 2], c=data 1[:, 0], cmap=plt.cm.gnuplot)
    ax1.view init(elev=15, azim=55)
    plt.title('原始三维数据图')
    ax1.set xlabel('X')
    ax1.set ylabel('Y')
    ax1.set zlabel('Z')
    plt.grid(True)
    ax2 = fig.add subplot(132, projection='3d')
    ax2.scatter(data 2[:, 0], data 2[:, 1], data 2[:, 2], c=data 2[:, 0], cmap=plt.cm.gnuplot)
    ax2.view init(elev=15, azim=55)
    plt.title('降至二维图')
    ax2.set xlabel('X')
    ax2.set ylabel('Y')
    ax2.set zlabel('Z')
    plt.grid(True)
    ax3 = fig.add subplot(133, projection='3d')
    ax3.scatter(data 3[:, 0], data 3[:, 1], data 3[:, 2], c=data 3[:, 0], cmap=plt.cm.gnuplot)
    ax3.view init(elev=15, azim=55)
    plt.title('降至一维图')
```

```
ax3.set xlabel('X')
   ax3.set_ylabel('Y')
   ax3.set zlabel('Z')
   plt.grid(True)
   plt.show()
***
主函数1:
人工生成数据 nxd
PCA 降维,从3维到2维到1维
输出2维和1维时候特征向量
data 1 = make swiss roll()
redEigVects_2, data_2 = PCA(data 1)
redEigVects_3, data_3 = PCA(data_2, 1)
**********)
print('二维特征向量')
print(redEigVects 2)
print('一维特征向量')
print(redEigVects 3)
show_3D_to_1D(data 1, data 2, data 3)
**********)
,,,
主函数 2:
人脸数据 nx1600
PCA 降维, 从 1600 维到 5 维到 3 维到 1 维
输出2维和1维时候特征向量
size = (40, 40)
# data = read faces('temp', size)
data = read faces('PCA FACES', size)
n \text{ sample} = data.shape[0]
n dimension = data.shape[1]
redEigVects 1, data recon 1 = PCA(data, 5)
redEigVects 2, data recon 2 = PCA(data, 3)
redEigVects 3, data recon 3 = PCA(data, 1)
print('-----特征向量如下------')
print("降至5维时:")
print(redEigVects 1)
print("降至3维时:")
```

```
print(redEigVects 2)
print("降至1维时:")
print(redEigVects 3)
print("-----信噪比如下------")
print("降至5维时:")
for i in range(n sample):
    print('图', i, '的信噪比为: ', psnr(data[i], data recon 1[i]))
print("降至3维时:")
for i in range(n_sample):
    print('图', i, '的信噪比为: ', psnr(data[i], data recon 2[i]))
print("降至1维时:")
for i in range(n sample):
    print('图', i, '的信噪比为: ', psnr(data[i], data recon 3[i]))
展示人脸图像
3次降维图
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei']
plt.rcParams['axes.unicode minus'] = False
fig = plt.figure(figsize = (n sample*1.5, 4*2))
plt.subplots adjust(left=0.05, right=0.95, bottom=0.1, top=0.9)
for i in range(n sample):
    fig.add subplot(4, n sample, i+1)
    plt.title('原图')
    plt.imshow(data[i].reshape(size), cmap='gray')
    fig.add subplot(4, n sample, i+1+n sample)
    plt.title('五维重构')
    plt.imshow(data recon 1[i].reshape(size), cmap='gray')
    fig.add subplot(4, n sample, i+1+n sample*2)
    plt.title('三维重构')
    plt.imshow(data recon 2[i].reshape(size), cmap='gray')
    fig.add subplot(4, n sample, i+1+n sample*3)
    plt.title('一维重构')
    plt.imshow(data recon 3[i].reshape(size), cmap='gray')
plt.show()
```