

1

降维的一个主要目的就是防止过拟合，维度越低，模型的假设空间越简单。

2

输入：样本集 $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$; 低维空间维数 m 过程:

- 1: 对所有样本进行中心化: $x_i \leftarrow x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$
- 2: 计算样本的协方差矩阵 XX^T
- 3: 对协方差矩阵 XX^T 做特征值分解
- 4: 取最大的 m 个特征值所对应的单位特征向量 w_1, w_2, \dots, w_m 输出: 投影矩阵 $W = (w_1, w_2, \dots, w_m)$

3

设正交基 u_j ，数据点 x_i 在该基底上的投影距离为 $x_i^T \cdot u_j$ ，所以所有数据在该基底上投影的方差 J_j 为:

$$J_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i^T u_j - x_{center}^T u_j)^2$$

其中: m 为样本数量，在数据运算之前对数据 x 进行 0 均值初始化，即 $x_{center} = 0$ ，从而:

$$J_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i^T u_j)^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (u_j^T x_i \cdot x_i^T u_j) = u_j^T \cdot \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i x_i^T) \cdot u_j$$

所以:

$$J_j = u_j^T \cdot \frac{1}{m} (x_1 x_1^T + x_2 x_2^T + \dots + x_m x_m^T) \cdot u_j = u_j^T \cdot \frac{1}{m} \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_m \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \cdot u_j = \frac{1}{m} u_j^T X X^T u_j$$

由于 $\frac{1}{m} X X^T$ 为常数，这里假设 $S = \frac{1}{m} X X^T$ ，则: $J_j = u_j^T \cdot S \cdot u_j$ ，根据PCA目标，我们需要求解 J_j 最大时对应的 u_j

$$\begin{aligned} J_j &= u_j^T S u_j \\ \text{s.t. } u_j^T u_j &= 1 \end{aligned}$$

则构造函数:

$$F(u_j) = u_j^T S u_j + \lambda_j (1 - u_j^T u_j)$$

求解 $\frac{\partial F}{\partial u_j} = 0$ ，得:

$$2S \cdot u_j - 2\lambda_j \cdot u_j = 0 \Rightarrow Su_j = \lambda_j u_j$$

则：当 u_j 、 λ_j 分别为 S 矩阵的特征向量、特征值时， J_j 有极值，把上述结果带回公式得：

$$J_{j_m} = u_j^T \lambda_j u_j = \lambda_j$$

所以对于任意满足条件的正交基，对应的数据在上面投影后的方差值为 S 矩阵的特征向量，从而：

$$J_{\max} = \sum_{j=1}^k \lambda_j, \lambda \text{ 从大到小排序}$$

所以投影正交基为 S 的特征向量中的前 k 个最大特征值对应的特征向量。

4

特征脸是指用于机器视觉领域中的人脸识别问题的一组特征向量。

1. 准备一个训练集的人脸图像。构成训练集的图片需要在相同的照明条件下拍摄的,并将所有图像的眼睛和嘴对齐。他们还必须在预处理阶段就重采样到一个共同的像素分辨率 ($R \times C$)。简单地将原始图像的每一行的像素串联在一起,产生一个具有 $R \times C$ 个元素的行向量,每个图像被视为一个向量。假定所有的训练集的图像被存储在一个单一的矩阵 T 中,矩阵的每一行是一个图像。
2. 减去均值向量。均值向量 a 要首先计算,并且 T 中的每一个图像都要减掉均值向量。
3. 计算协方差矩阵 S 的特征值和特征向量。每一个特征向量的维数与原始图像的一致,因此可以被看作是一个图像。因此这些向量被称作特征脸。他们代表了图像与均值图像差别的不同方向。通常来说,这个过程的计算代价很高(如果可以计算的话)。
4. 选择主成分。一个 $D \times D$ 的协方差矩阵会产生 D 个特征向量,每一个对应 $R \times C$ 图像空间中的一个方向。具有较大特征值的特征向会被保留下来,一般选择最大的 N 个,或者按照特征值的比例进行保存,如保留前95%。

5

PCA旨在找出一套数据中能够表示最多方差的线性组合,而CCA旨在找出两套数据中能够最大程度表示其相关性的线性组合。

6

输入: 各为 m 个的样本 X 和 Y , X 和 Y 的维度都大于 1

输出: X, Y 的相关系数 ρ , X 和 Y 的线性系数向量 a 和 b

1. 计算 X 的方差 S_{XX} , Y 的方差 S_{YY} , X 和 Y 的协方差 S_{XY} , Y 和 X 的协方差 $S_{YX} = S_{XY}^T$
2. 计算矩阵 $M = S_{XX}^{-1/2} S_{XY} S_{YY}^{-1/2}$
3. 对矩阵 M 进行奇异值分解, 得到最大的奇异值 ρ , 和最大奇异值对应的左右奇异向量 u, v
4. 计算 X 和 Y 的线性系数向量 a 和 b , $a = S_{XX}^{-1/2} u$, $b = S_{YY}^{-1/2} v$

```

from math import sqrt

import numpy as np

class CCA:

    def __init__(self, x_dataset, y_dataset):

        # 需要对数据转置一下，才能跟上文对上

        self.x_dataset = np.array(x_dataset).T

        self.y_dataset = np.array(y_dataset).T

    def fit(self):

        A = []

        for sample in self.x_dataset:

            A.append(list(sample))

        for sample in self.y_dataset:

            A.append(list(sample))

        # 构造上面提到的A矩阵

        A = np.array(A)

        for i in range(A.shape[0]):

            aver = np.mean(A[i])

            std = np.std(A[i])

            A[i] = (A[i] - aver) / std

        Cov = np.cov(A, bias = True)

        n = self.x_dataset.shape[0]

        R_11 = np.matrix(Cov[:n, :n])

```

```

R_12 = np.matrix(Cov[:n, n:])

R_21 = np.matrix(Cov[n:, :n])

R_22 = np.matrix(Cov[n:, n:])

M = np.linalg.inv(R_11) * R_12 * np.linalg.inv(R_22) * R_21

N = np.linalg.inv(R_22) * R_21 * np.linalg.inv(R_11) * R_12

eig1, vector1 = np.linalg.eig(M)

data = []

for i in range(len(eig1)):

    if abs(eig1[i]) < 1e-10:

        continue

    rho = np.round(sqrt(eig1[i]), decimals = 5)

    alpha = np.round(vector1[:, i], decimals = 5)

    k = 1 / (alpha.T * R_11 * alpha)

    alpha *= sqrt(k)

    beta = np.round(np.linalg.inv(R_22) * R_21 * alpha / rho, decimal

    data.append((rho, alpha, beta))

data.sort(key = lambda x: x[0], reverse = True)

return data

```