模式识别

Pattern Recognition

第3章 特征选择与特征提取

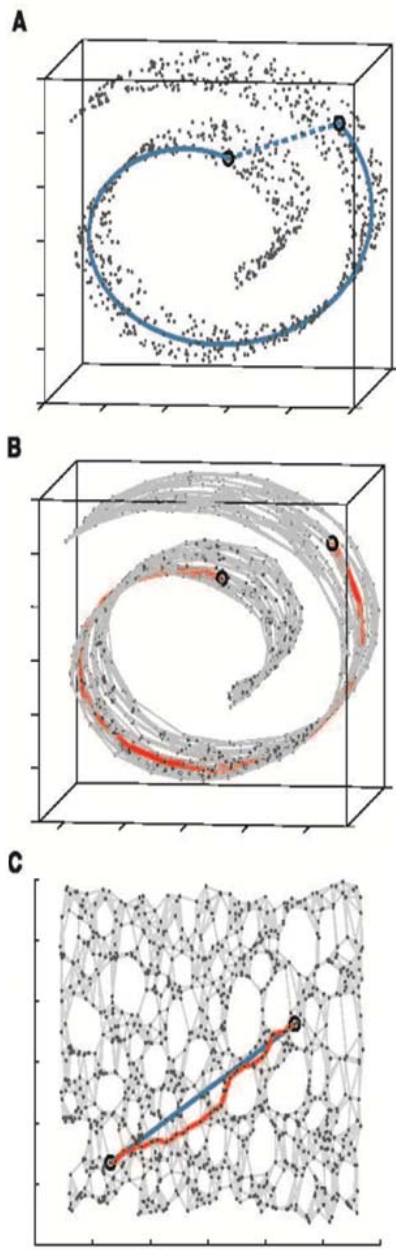
维数的诅咒（Curse of Dimensionality）

维数增高带来困难：增大了分类学习过程和识别过程计算和存储的复杂程度，降低了分类器的效率；识别特征维数过大使得分类器过于复杂

维数 VS 样本数：在样本数量一定的条件下，估计参数的数量越少准确度越高，用少量样本估计过多的参数则是一个不可靠的过程！

例： 1维特征，估计均值方差（2个参数）， 20个样本具有一定可信度。100维特征，估计均值协方差矩阵（5150个参数），需要多少样本?

降维(Dimensionality Reduction)



从高维空间映射到低维空间

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in R^{m}, \mathbf{y} \in R^{m'} \text{ 其中} m' < m$$

降低计算的复杂度：

降低存储器的占用；

提高分类器的识别速度；

提高分类器的性能：

降低分类器的复杂度，提高泛化能力；

有可能丢失可分性信息，降低分类准确率；

降维(Dimensionality Reduction)

如何选出有效特征?

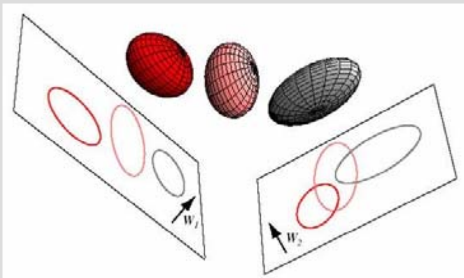
从应用的角度可以分为:
特征选择
特征提取

特征选择（Feature Selection）：从原始的特征中直接挑选出对分类最有价值的特征

特征提取（Feature Extraction）将原始特征变换得到一组新的低维特征

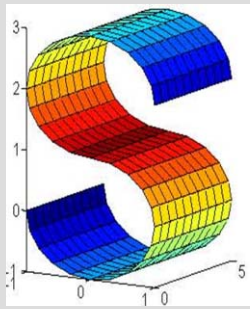
如何计算出更有效特征?

从数学的角度可以分为:
线性降维
非线性降维



线性降维：样本分布在一个嵌入的子空间中， $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) = \mathbf{W}^t\mathbf{x}$ 是线性变换

非线性降维：样本分布在一个嵌入的非线性流形上， $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$ 是非线性变换



特征分析的数学基础

- 分析样本集在特征空间中的分布情况-奇异值分解

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}_{d \times n} = \mathbf{U\Sigma V}^t$$

U：d阶正交矩阵
V：n阶正交矩阵
Σ：dxn矩形对角矩阵

Σ=diag($\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_d$)，d<<n

- 内积矩阵：各样本之间相似度

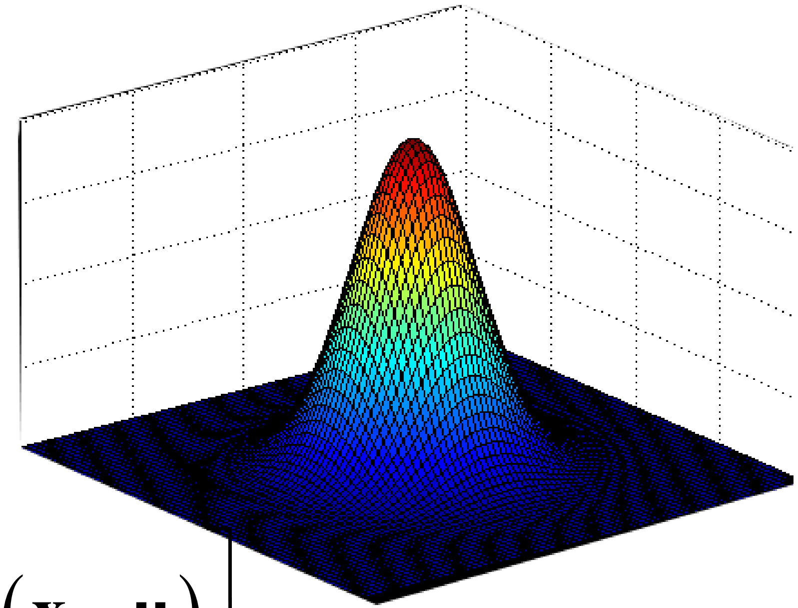
$$\mathbf{K} = \boldsymbol{X}^t\mathbf{X} = \mathbf{V}(\boldsymbol{\Sigma}^t\boldsymbol{\Sigma})\mathbf{V}^t$$

- 外积矩阵：各维特征的散布（协方差）

$$\mathbf{S} = \mathbf{X}\mathbf{X}^t = \mathbf{U}(\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^t)\mathbf{U}^t$$

必读：
李航-统计学习方法-第二版
第15章奇异值分解

多元正态分布函数



$$p(\mathbf{x}) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) \right]$$

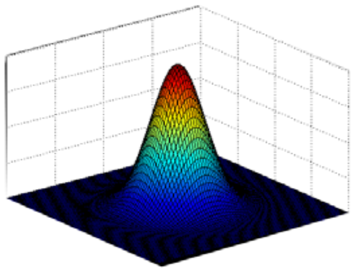
均值：$\boldsymbol{\mu} = E(\mathbf{x}) = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$

$$\mu_i = E(x_i)$$

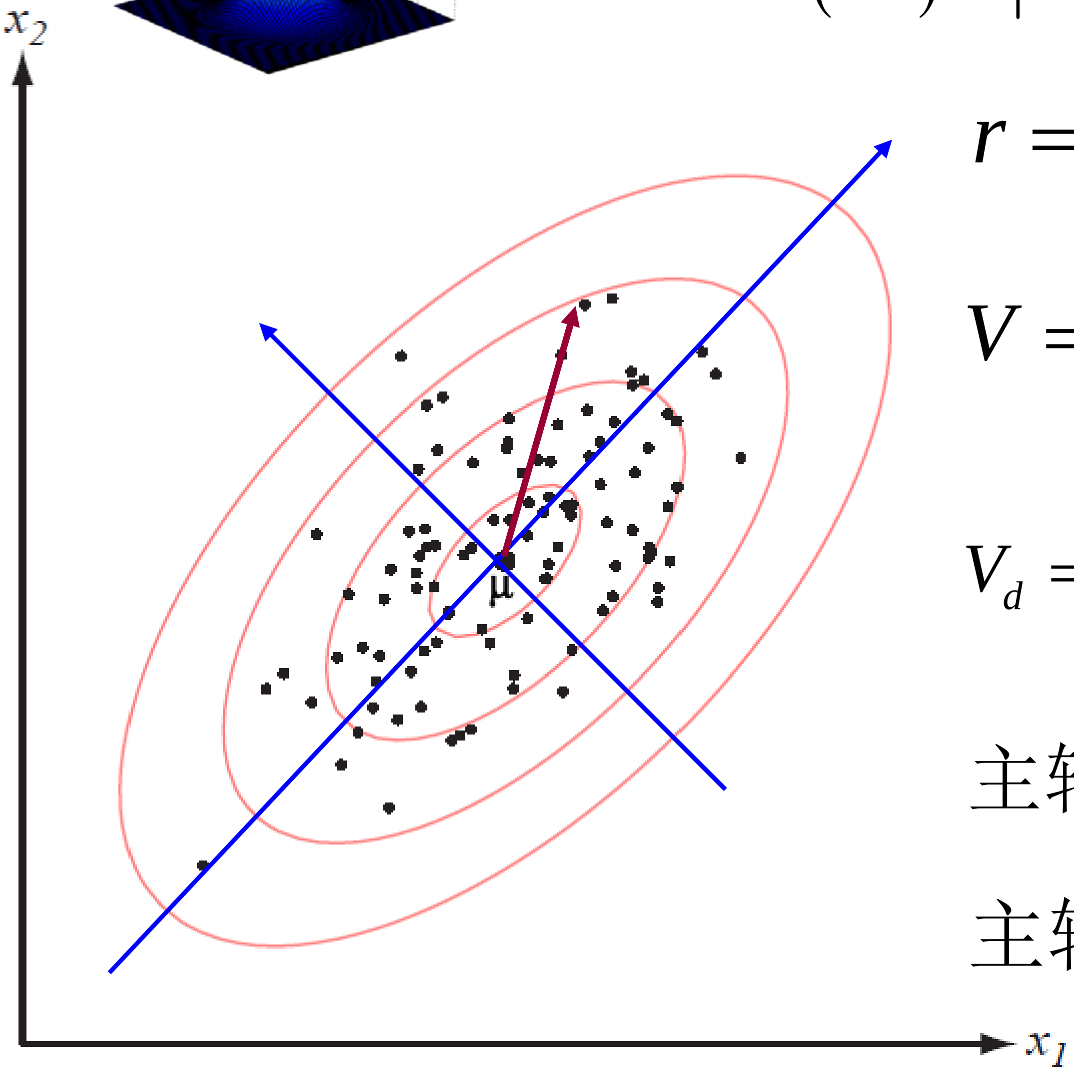
协方差矩阵：$\boldsymbol{\Sigma} = E\left((\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t \right) = \int (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$

$$\sigma_{ij} = E\left((x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j) \right)$$

多元正态分布函数



$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right]$$



$$r = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$$

$$V = V_d |\mathbf{\Sigma}|^{1/2} r^d$$

$$V_d = \begin{cases} \pi^{d/2}/(d/2)! & d\text{为偶数} \\ 2^d \pi^{(d-1)/2}/((d-1)!/2)! & d\text{为奇数} \end{cases}$$

主轴方向:由$\mathbf{\Sigma}$的特征向量确定

主轴长度:由$\mathbf{\Sigma}$的特征值决定

正态分布的参数估计

- Gauss分布的参数由均值矢量$\boldsymbol{\mu}$和协方差矩阵$\boldsymbol{\Sigma}$构成，其参数估计结果为：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)\left(\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}\right)^t$$

样本x的“散布矩阵”

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n}\sum_{\mathbf{x}\in D}(\mathbf{x}-\mathbf{m})(\mathbf{x}-\mathbf{m})^t$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{\mathbf{x}\in D}\left[(x_i - m_i)(x_j - m_j)\right]_{d\times d}$$

$$= \left[\frac{1}{n}\sum_{\mathbf{x}\in D}(x_i - m_i)(x_j - m_j)\right]_{d\times d}$$

下标表示向量的第i、j维特征

散布矩阵------协方差矩阵的估计！！！

新手练习：计算以下样本的均值及散布矩阵

$$(2,0)^T,(2,1)^T,(3,0)^T,(4,2)^T,(3,2)^T,(4,1)^T$$

类别可分性判据

可分性判据——针对分类问题怎样才算一组好的特征？

- 思路： 类内散布程度低、类间散布程度高
- 模型：
  - 1）类内距离准则：用每个样本与其所属类别中心之间的距离平方和来度量

$$J_W(C_1,\cdots,C_k)=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{k}\sum_{\mathbf{x}\in C_j}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right\|^2 \qquad \mathbf{m}_j=\frac{1}{n_j}\sum_{\mathbf{x}\in C_j}\mathbf{x}$$

  - 2）类间距离准则：用每个类别的中心到样本整体中心之间的加权距离平方和度量

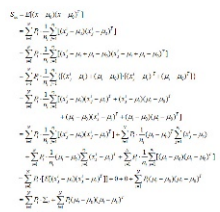
$$J_B(C_1,\cdots,C_k)=\sum_{j=1}^{k}\frac{n_j}{n}\left\|\mathbf{m}_j-\mathbf{m}\right\|^2 \qquad \mathbf{m}=\frac{1}{n}\sum_{\mathbf{x}\in D}\mathbf{x}$$

类内、类间"散布矩阵"

- 第j类内散布矩阵：$$S_W^j=\frac{1}{n_j}\sum_{\mathbf{x}\in C_j}\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right)\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right)^t$$

协方差矩阵估计

- 总的类内散布矩阵：$$S_W=\sum_{j=1}^{k}\frac{n_j}{n}S_W^j$$
- 类间散布矩阵：$$S_B=\sum_{j=1}^{k}\frac{n_j}{n}\left(\mathbf{m}_j-\mathbf{m}\right)\left(\mathbf{m}_j-\mathbf{m}\right)^t$$
- 总体散布矩阵：$$\mathbf{S}_T=\sum_{\mathbf{x}\in D}\frac{1}{n}\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}\right)\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}\right)^t=\mathbf{S}_w+\mathbf{S}_B$$



例：证明散布准则 $J_W(C_1,\cdots,C_k)=tr(S_W)$

对角线元素和，代表散布半径的平方

- 基于迹的准则：

$$\mathrm{tr}[S_w]=\sum_{i=1}^{c}\mathrm{tr}[S_i]$$

$$=\sum_{i=1}^{c}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\mathrm{tr}[(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t]=\sum_{i=1}^{c}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_i\|^2=J_W$$

等价于误差平方和准则

$$\mathbf{S}_T=\mathbf{S}_w+\mathbf{S}_B \rightarrow \mathrm{tr}[S_T]=\mathrm{tr}[S_W]+\mathrm{tr}[S_B]$$

与具体划分无关

最小化类内准则的同时，也最大化了类间准则

4）类内、类间距离准则

详见模式分类第10章，
习题25-29

- **基于迹的距离准则：** $J_W = \mathrm{tr}[S_w], J_B = \mathrm{tr}[S_B]$
  - 误差平方和准则，最小化类内准则的同时，最大化类间准则
- **基于行列式的散布准则：** $J_d = \left|\mathbf{S}_w\right|$
  - 行列式（特征值的积）反映散布体积的平方
- **基于不变量的散布准则：** $J_{wb} = \mathrm{tr}\left[\mathbf{S}_T^{-1}\mathbf{S}_W\right] = \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{1+\lambda_i}$
  - $\mathbf{S}_W^{-1}\mathbf{S}_B$ 的特征值 $\lambda_1, \cdots \lambda_d$ 在非奇异变换下是一个不变量。
    $\mathbf{S}_T^{-1}\mathbf{S}_B$ 的特征值与 $\mathbf{S}_W^{-1}\mathbf{S}_B$ 的特征值满足关系 $v_i = \frac{1}{1+\lambda_i}$

衡量类间散布和类内散布在对应特征向量方向上的比值

散布准则

$$J_1(\mathcal{X}) = \mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right)$$

$$J_2(\mathcal{X}) = \frac{\mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_b\right)}{\mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_w\right)}$$

$$J_3(\mathcal{X}) = \frac{\left|\mathbf{S}_b\right|}{\left|\mathbf{S}_w\right|} = \left|\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right|$$

$$J_4(\mathcal{X}) = \frac{\left|\mathbf{S}_t\right|}{\left|\mathbf{S}_w\right|}$$

例：已知两类样本，计算3维特征中1、2维的类别可分性判据 $J_1(\mathcal{X}) = \mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right)$

$$S_W^j = \frac{1}{n_j}\sum_{\mathbf{x}\in C_j}\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right)\left(\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right)^t$$

其中 $S_W = \sum_{j=1}^{k}\frac{n_j}{n}S_W^j$

$$S_B = \sum_{j=1}^{k}\frac{n_j}{n}\left(\mathbf{m}_j-\mathbf{m}\right)\left(\mathbf{m}_j-\mathbf{m}\right)^t$$

$$\omega_1:\mathbf{x}_1=(0,0,0)^t,\mathbf{x}_2=(1,0,0)^t,\mathbf{x}_3=(2,2,1)^t,\mathbf{x}_4=(1,1,0)^t$$

$$\omega_2:\mathbf{x}_5=(0,0,1)^t,\mathbf{x}_6=(0,2,0)^t,\mathbf{x}_7=(0,2,1)^t,\mathbf{x}_8=(1,1,1)^t$$

解：首先计算第 1、2 维特征上每个类别的均值和样本的总体均值：

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}\mathbf{x}_i = (1.00, 0.75)^t, \boldsymbol{\mu}_2 = \frac{1}{4}\sum_{i=5}^{8}\mathbf{x}_i = (0.25, 1.25)^t$$

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8}\mathbf{x}_i = (0.625, 1.000)^t$$

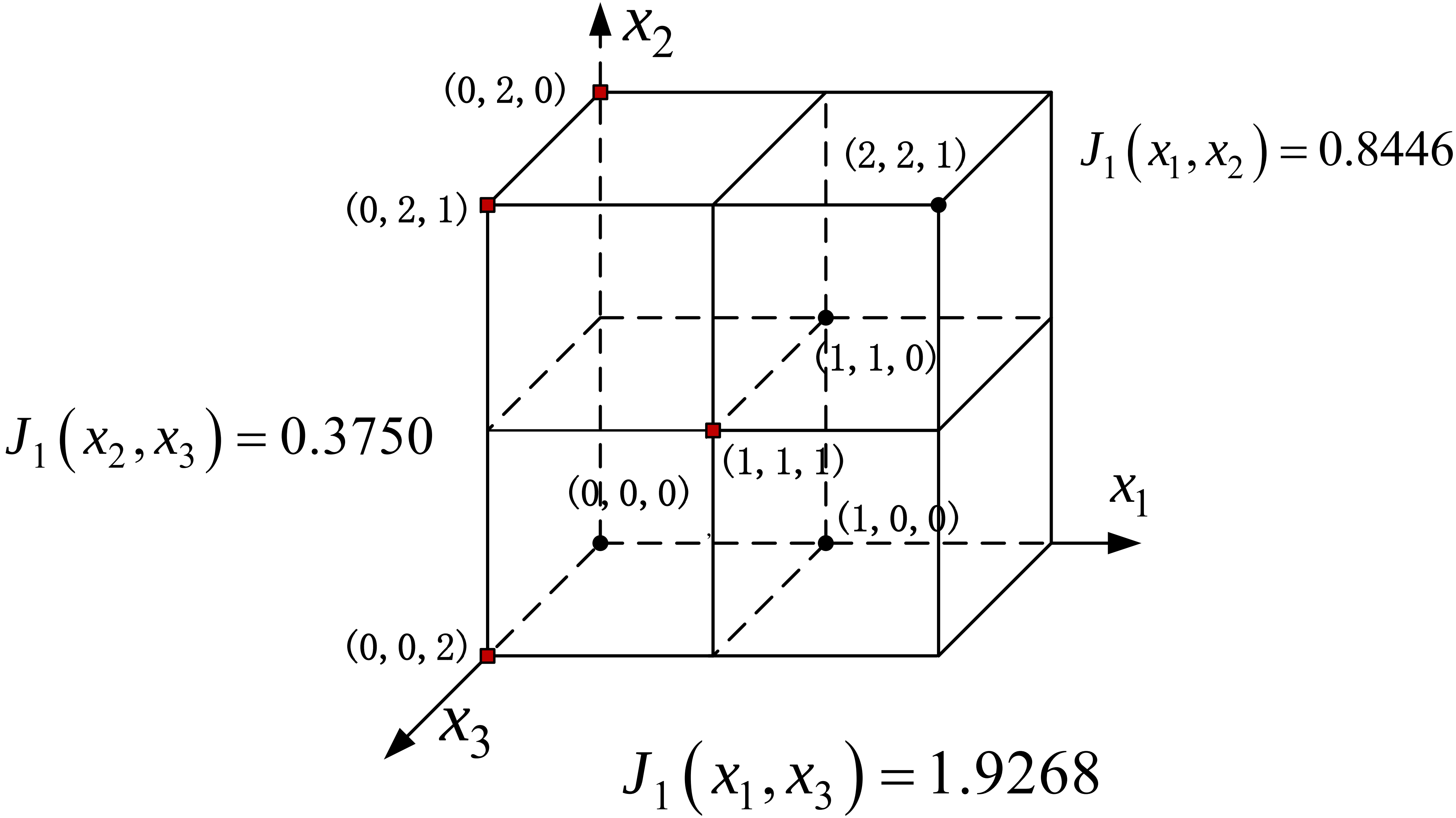
计算类内散布矩阵：

$$\mathbf{S}_w = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_1)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_1)^t + \frac{1}{4}\sum_{i=5}^{8}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_2)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_2)^t\right]$$

$$= \begin{pmatrix} 0.3438 & 0.2188 \\ 0.2188 & 0.6875 \end{pmatrix}$$

计算类间散布矩阵：

$$\mathbf{S}_b = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu})^t + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu})^t = \begin{pmatrix} 0.1406 & -0.0938 \\ -0.0938 & 0.0625 \end{pmatrix}$$


x_2
(0, 2, 0)
(0, 2, 1)
(2, 2, 1)
$J_1(x_1, x_2) = 0.8446$
(1, 1, 0)
$J_1(x_2, x_3) = 0.3750$
(1, 1, 1)
(0, 0, 0)
x_1
(1, 0, 0)
(0, 0, 2)
x_3
$J_1(x_1, x_3) = 1.9268$

特征选择

从原始的特征集合 $\mathcal{X}$ 中挑选出一组最有利于分类的特征 $\mathcal{X}'$

$$\mathcal{X}' = \arg\max_{\tilde{\mathcal{X}} \subset \mathcal{X}} J\left(\tilde{\mathcal{X}}\right)$$

思路 1：用可分性判据 J 分别评价每一个特征，

然后根据判据值的大小对特征重新排序，使得：

$$J\left(x_1\right) \geq J\left(x_2\right) \geq \cdots \geq J\left(x_d\right)$$

特征之间相互独立时才能够保证解的最优性

思路 2：对所有 $\tilde{\mathcal{X}} \subset \mathcal{X}$ 的特征组合进行穷举，

计算每一种组合的判据值，选择出最优组合。

从100个特征中选择10个时组合数则变为 $C_{100}^{10} = 17310309456440$

分支定界法

判据单调性：对于两个特征子集 $\mathcal{X}_1$ 和 $\mathcal{X}_2$ 来说：

$$\mathcal{X}_1 \subset \mathcal{X}_2 \Rightarrow J(\mathcal{X}_1) \leq J(\mathcal{X}_2)$$

满足单调性：

$$J_1(\mathcal{X}) = \operatorname{tr}\left(\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right)$$

$$J_3(\mathcal{X}) = \frac{|\mathbf{S}_b|}{|\mathbf{S}_w|} = \left|\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right|$$

不满足单调性：

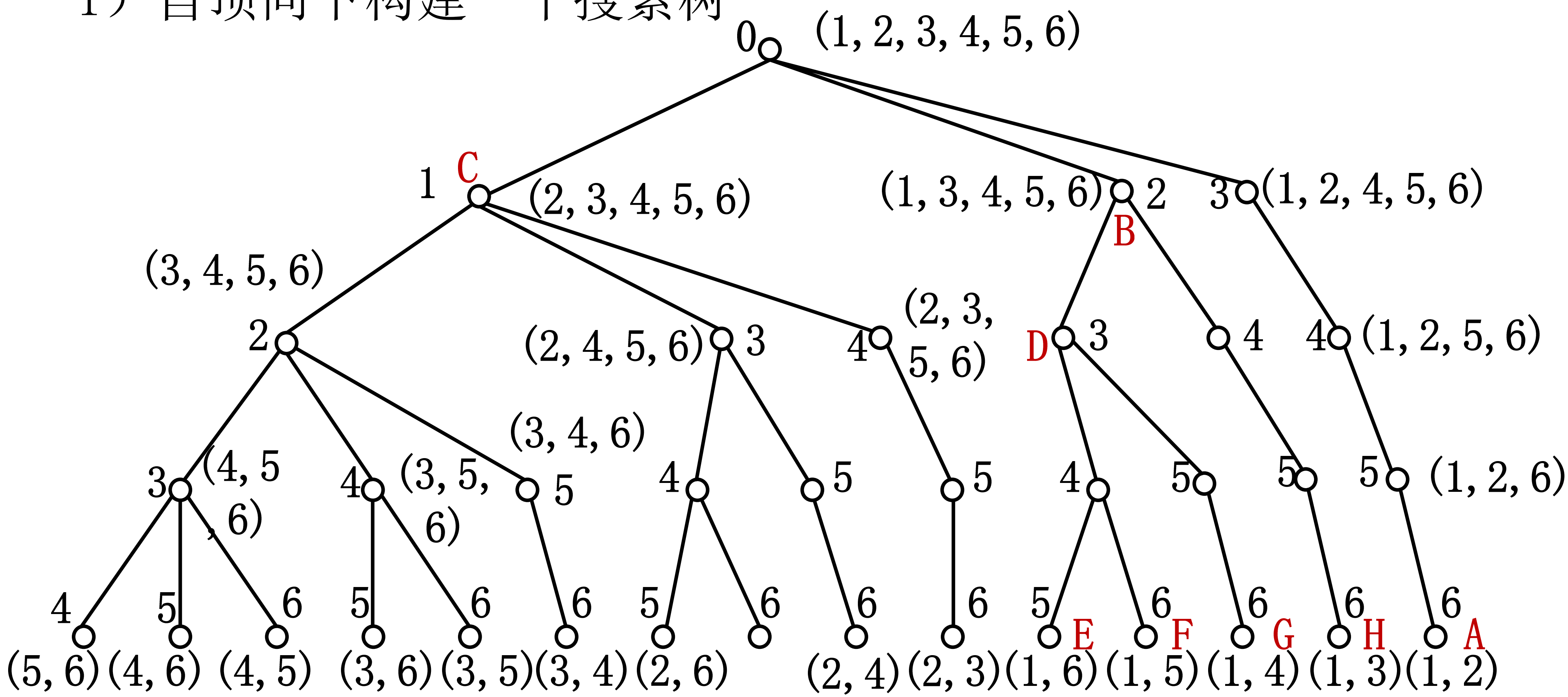
$$J_2(\mathcal{X}) = \frac{\operatorname{tr}(\mathbf{S}_b)}{\operatorname{tr}(\mathbf{S}_w)}$$

$$J_4(\mathcal{X}) = \frac{|\mathbf{S}_t|}{|\mathbf{S}_w|}$$

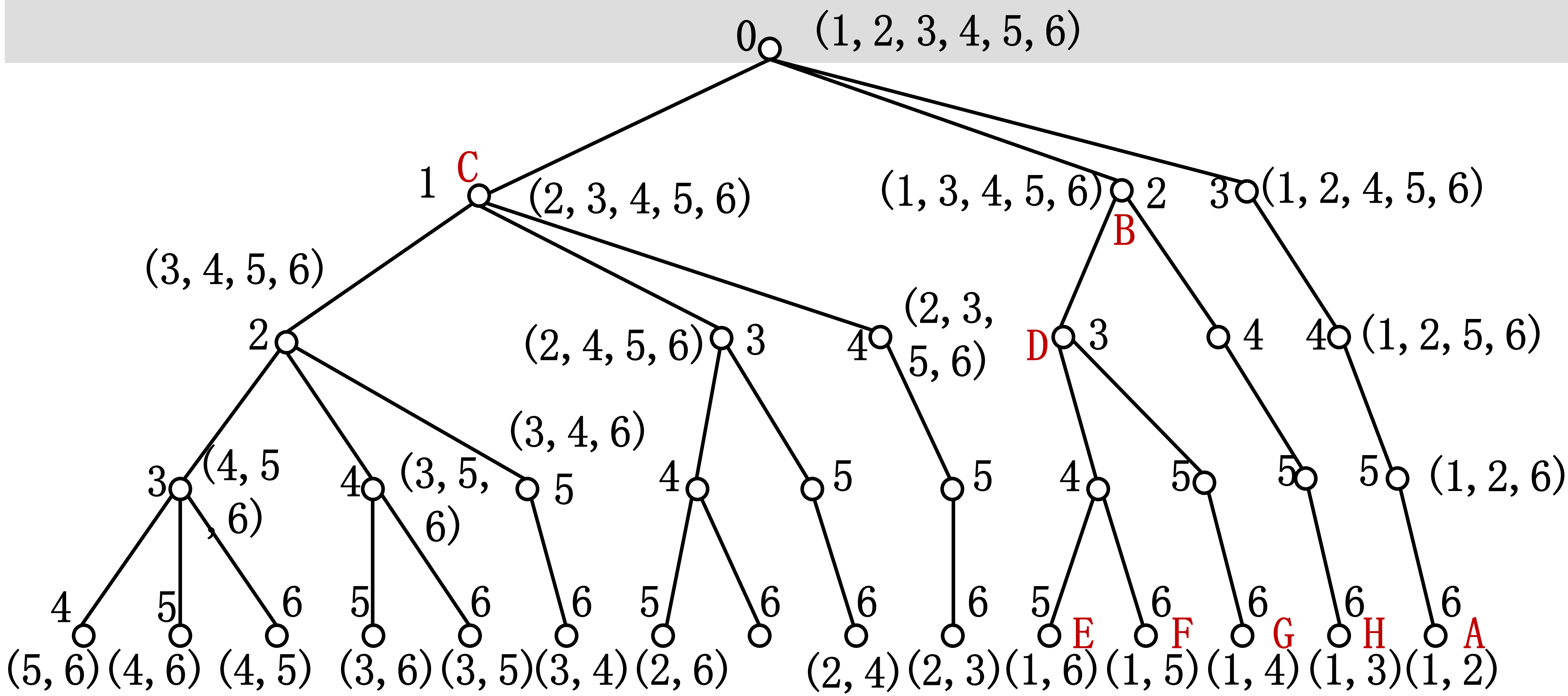
当可分性判据满足单调性时，分支定界法才能够保证搜索到最优特征组合

例：原始6维特征$\mathcal{X}=\{x_1, x_2, \cdots, x_6\}$中选择出2维特征组合

1）自顶向下构建一个搜索树



不关心删除的先后次序，只关心删除结果。每一条路径构成一种删除方式



2　由右至左深度优先的方式进行搜索，

首先计算节点 A 对应特征组合的判据值 $J(A)$ 作为当前的最优结果；

回溯搜索至节点 B，计算判据值 $J(B)$；如果 $J(B)<J(A)$，

由于 E，F，G，H 均为 B 的后继节点，对应的特征组合均为 B 的子集，

根据判据 J 的单调性，有：$J(E),J(F),J(G),J(H)\le J(B)<J(A)$

因此在 B 的后继节点中不可能存在最优节点，无需继续搜索；

如果 $J(B)>J(A)$，那么需要继续向下搜索节点 H 和节点 D。

分支定界法存在的问题：

- **可分性判据必须具有单调性。**不具有单调性则不能保证得到最优选择；
- **最优解分支位置决定计算复杂度。**
  - 如果最优解分支在最右端并且根节点的子节点判据值均小于最优解，则搜索效率最高；
  - 如果每个分支的可分性判据都大于其左端分支的可分性判据，实际的计算复杂度会超过穷举法。
- **计算量仍然可观。**当原始的特征维数很大时，搜索到最优解需要的计算量仍然可观

5.2.2 次优搜索算法

顺序前进法（**Sequential Forward Selection, SFS**）

从一个空集开始每次向选择的特征集合中加入一个特征
直到特征集合中包含d'个特征为止，
每次选择加入特征的原则：加入特征集后能够使得可分性判据最大。

每一轮迭代只需计算将每一个未被选择的特征加入 $\mathcal{X}'$ 之后的判据值，选择出 d' 个特征需要计算判据值的次数为：

$$\sum_{i=0}^{d'-1}(d-i)=\frac{d'(2d-d'+1)}{2}$$

顺序后退法 (Sequential Backward Selection, SBS)

每一轮从特征集中选择一个最差的特征删除，
选择特征的原则是将其删除之后使得判据值下降最小。

$$\sum_{i=0}^{d-d'-1}(d-i)=\frac{(d-d')(d+d'+1)}{2}$$

顺序后退法 (Sequential Backward Selection, SBS)

每一轮从特征集中选择一个最差的特征删除，
选择特征的原则是将其删除之后使得判据值下降最小。

$$\sum_{i=0}^{d-d'-1}(d-i)=\frac{(d-d')(d+d'+1)}{2}$$

广义顺序前进（后退）法 **Generalized Sequential Forward(Backward) Selection,**

每次增加或删除r个特征

$$\sum_{i=0}^{k-1}C_{d-i\times r}^{r}=\frac{1}{r!}\times\sum_{i=0}^{k-1}\frac{(d-i\times r)!}{(d-i\times r-r)!}$$

增l－减r法（$l-r$法）

先采用顺序前进法向选择特征集合 $\mathcal{X}'$ 加入 l 个特征，然后采用顺序后退法从 $\mathcal{X}'$ 中删除 r 个特征（$l>r$），循环这个过程直到 $\mathcal{X}'$ 中包含 d' 个特征为止。

5.3特征提取

- 特征选择：从原始$\mathbf{x}$中选出若干维特征
- 特征提取：对原始特征进行函数变换得到新特征

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$$

- 线性特征提取方法：

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

  - 主成分分析
  - Fisher判别分析

主成分分析
（PCA，Principal Component Analysis）

- **PCA**是一种最常用的线性成分分析方法；

- **PCA**的主要思想是寻找到数据的主轴方向，由主轴构成一个新的坐标系（维数可以比原维数低），然后数据由原坐标系向新的坐标系投影。

- **PCA**的其它名称：离散**K-L**变换，**Hotelling**变换；

PCA——离散K_L变换

x的表示：用完备正交系$\mathbf{e}_j$, j=1,2,… 展开为 $\mathbf{x}=\sum_{j=1}^{\infty} c_j\mathbf{e}_j$

x的重构误差：用 x的前d项重构 $\hat{\mathbf{x}}=\sum_{j=1}^{d} c_j\mathbf{e}_j$，其中 $c_j=\mathbf{e}_j^T\mathbf{x}$，误差的期望为

$$\xi=E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j^2\right]=E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty}\mathbf{e}_j^T\mathbf{x}\mathbf{x}^T\mathbf{e}_j\right]=\sum_{j=d+1}^{\infty}\mathbf{e}_j^T E\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^T\right]\mathbf{e}_j\equiv\sum_{j=d+1}^{\infty}\underline{\mathbf{e}_j^T\mathbf{S}\mathbf{e}_j}$$

误差最小化：在 $\left\|\mathbf{e}_j\right\|=1$ 约束下的均方误差最小化，应用Lagrange乘子法：

$$J(\mathbf{e})=\sum_{j=d+1}^{\infty}\mathbf{e}_j^T\mathbf{S}\mathbf{e}_j-\sum_{j=d+1}^{\infty}\lambda_j\left(\mathbf{e}_j^T\mathbf{e}_j-1\right) \qquad \frac{\partial J(\mathbf{e})}{\partial e_j}=0 \Rightarrow \begin{cases}\mathbf{S}\mathbf{e}_j-\lambda_j\mathbf{e}_j=0\\ \xi=\sum_{j=d+1}^{\infty}\lambda_j\end{cases}$$

λ_j 为 S 的特征值，$\mathbf{e}_j$ 为 S 的特征矢量。

误差最小化：在 $\|\mathbf{e}_j\| = 1$ 约束下的均方误差最小化，应用Lagrange乘子法：

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{e}_j^T \mathbf{S} \mathbf{e}_j - \sum_{j=d+1}^{\infty} \lambda_j \left(\mathbf{e}_j^T \mathbf{e}_j - 1 \right) \qquad \frac{\partial J(\mathbf{e})}{\partial e_j} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{S}\mathbf{e}_j - \lambda_j \mathbf{e}_j = 0 \\ \xi = \sum_{j=d+1}^{\infty} \lambda_j \end{cases}$$

λ_j 为 $\mathbf{S}$ 的特征值，$\mathbf{e}_j$ 为 $\mathbf{S}$ 的特征矢量。

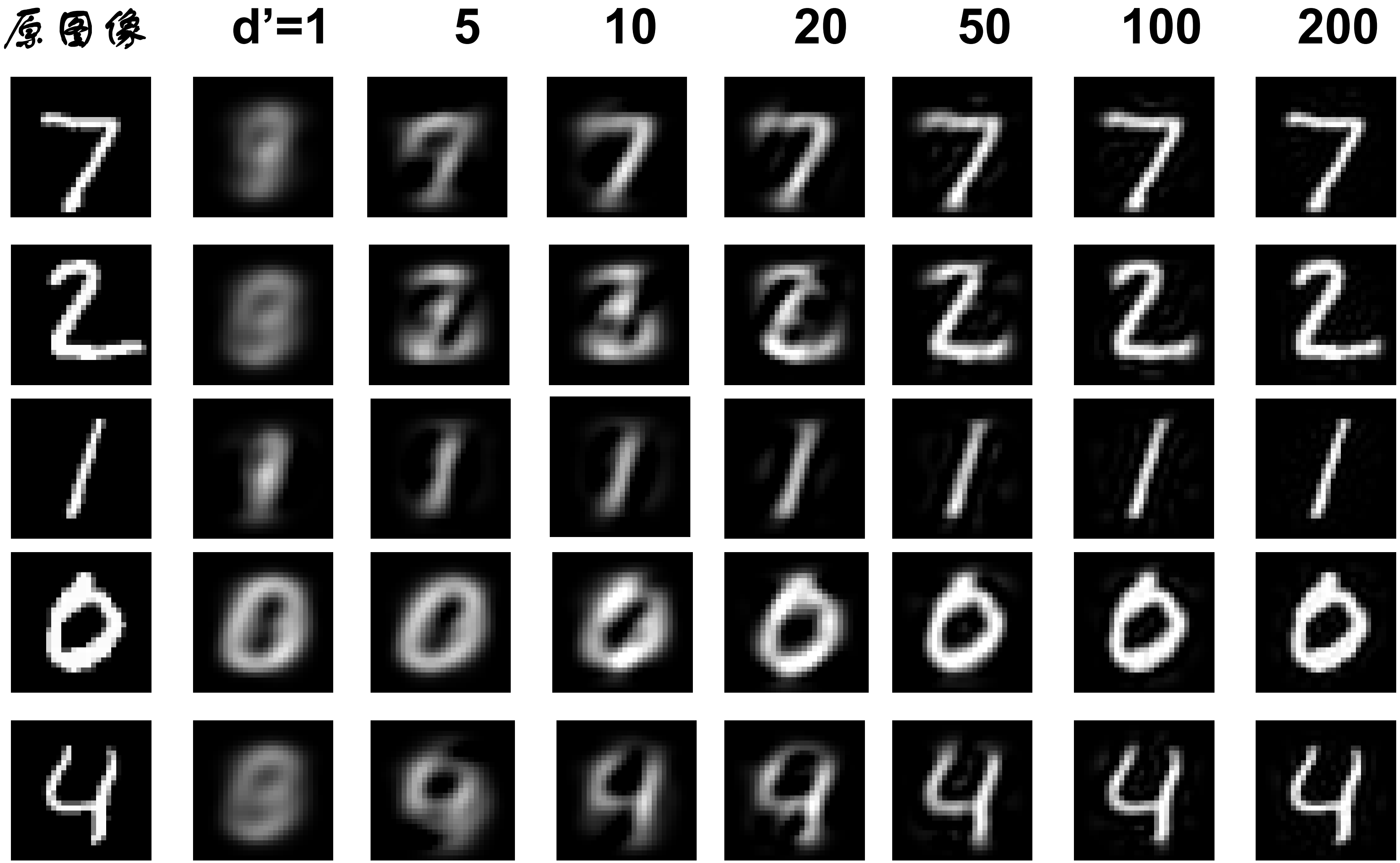
$$J(\mathbf{e}) = \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{e}_j^T \mathbf{S} \mathbf{e}_j = \sum_{j=d+1}^{\infty} \lambda_j$$

要使 $J(\mathbf{e})$ 最小，只需将S的特征值由大到小排序，选择最大的前 d 个特征值对应的特征向量构成一个新的 d 维坐标系，将样本向新的坐标系的各个轴上投影，计算出新的特征矢量

$$\hat{\mathbf{x}} = \sum_{j=1}^{d} c_j \mathbf{e}_j \qquad 其中 \qquad c_j = \mathbf{e}_j^T \mathbf{x}$$

PCA重构

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{E}\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}$$



问题：有n个d维样本，$\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n$,如何仅用一个样本$\mathbf{x}_0$代表这些样本，使误差准则函数最小？

$$J_0(\mathbf{x}_0)=\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_0-\mathbf{x}_k\right\|^2 \longrightarrow \mathbf{x}_0=\mathbf{m}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\left\|(\mathbf{x}_0-\mathbf{m})-(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\right\|^2$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_0-\mathbf{m}\right\|^2-2\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_0-\mathbf{m})^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})+\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\right\|^2$$

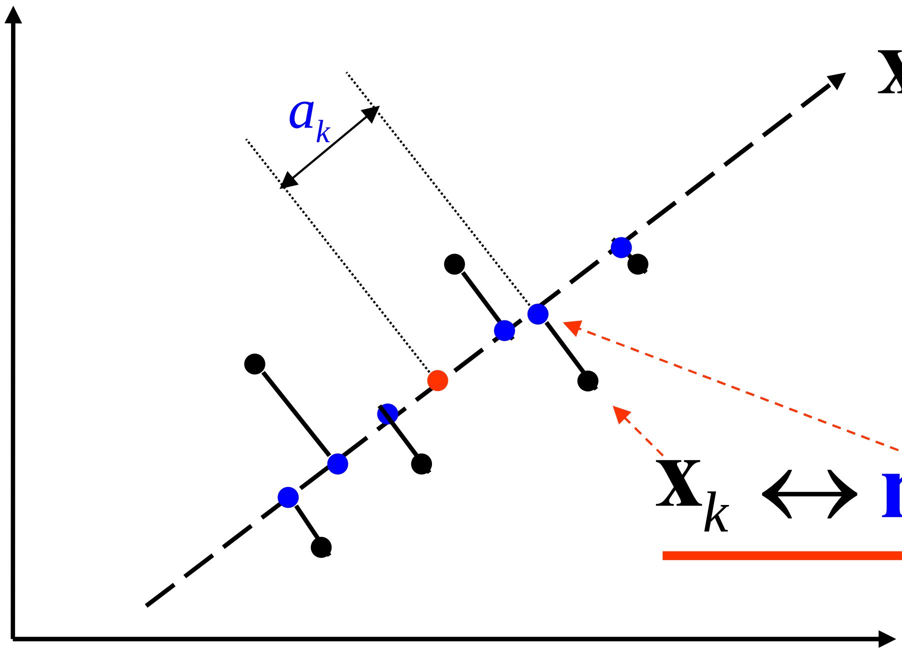
$$=\sum_{k=1}^{n}\underline{\left\|\mathbf{x}_0-\mathbf{m}\right\|^2}-2(\mathbf{x}_0-\mathbf{m})^t\underbrace{\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})}_{=0}+\underline{\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\right\|^2}$$

$\mathbf{x}_0=\mathbf{m}$时取得最小值　　　　不依赖于$\mathbf{x}_0$

样本均值是样本数据集的零维表达。
将样本数据集的空间分布，压缩为一个均值点。 → 简单，但不能反映样本间的差异

零维表达改为“一维”表达，将数据集空间，压缩为一条过均值点的线。

每个样本在直线上存在不同的投影，可以反映样本间的差异



$$\mathbf{x} = \mathbf{m} + a\mathbf{e}$$

e为直线的单位向量

a为直线上的点到m的距离

$$\mathbf{x}_k \leftrightarrow \mathbf{m} + a_k\mathbf{e}$$

$$J_0(\mathbf{m}) = \sum_{k=1}^{n} \left\| \mathbf{m} - \mathbf{x}_k \right\|^2 \longrightarrow J_1(a_1, \ldots a_n, \mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n} \left\| (\mathbf{m} + a_k\mathbf{e}) - \mathbf{x}_k \right\|^2$$

0维平方误差　　*1维平方误差*

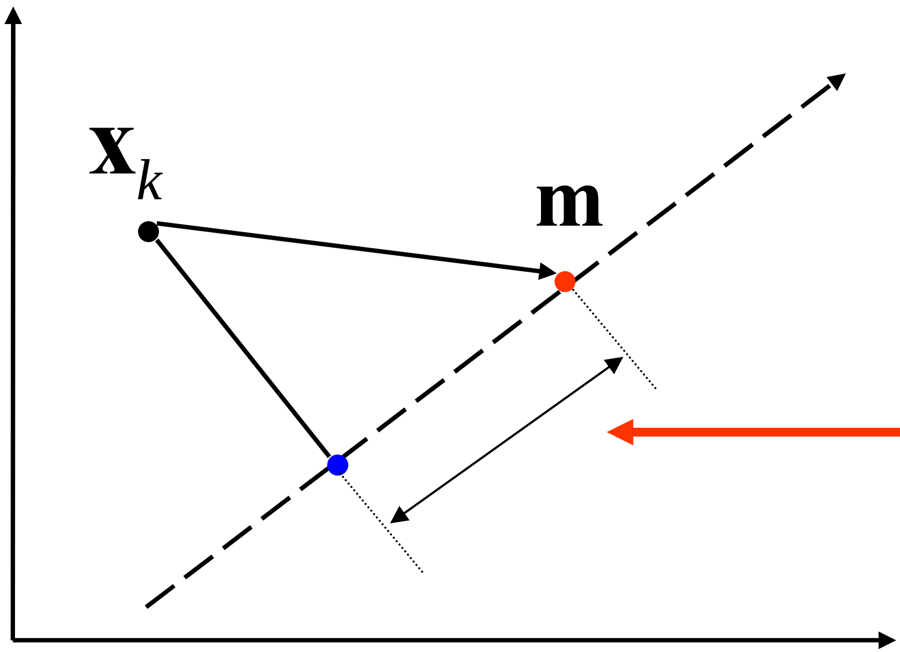
$$J_1(a_1,\ldots a_n,\mathbf{e})=\sum_{k=1}^{n}\left\|(\mathbf{m}+a_k\mathbf{e})-\mathbf{x}_k\right\|^2=\sum_{k=1}^{n}\left\|a_k\mathbf{e}-(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\right\|^2$$

$$=\sum_{k=1}^{n}a_k^2\underbrace{\left\|\mathbf{e}\right\|^2}_{=1}-2\sum_{k=1}^{n}a_k\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})+\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\right\|^2$$

$$\frac{\partial J_1(a_1,\ldots a_n,\mathbf{e})}{\partial a_k}=2a_k-2\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})=0$$

$$\Downarrow$$

$$a_k=\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})$$



只需把向量$\mathbf{x}_k$向过$\mathbf{m}$的直线垂直投影就能得到最小方差

$$\Downarrow$$

如何找到直线的最优方向?

$$J_1(a_1,\ldots a_n,\mathbf{e})=\sum_{k=1}^{n}\|(\mathbf{m}+a_k\mathbf{e})-\mathbf{x}_k\|^2=\sum_{k=1}^{n}\|a_k\mathbf{e}-(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\|^2$$

$$=\sum_{k=1}^{n}a_k^2\underbrace{\|\mathbf{e}\|^2}_{=1}-2\sum_{k=1}^{n}a_k\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})+\sum_{k=1}^{n}\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\|^2$$

$$a_k=\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})$$

$$J_1(\mathbf{e})=\sum_{k=1}^{n}a_k^2-2\sum_{k=1}^{n}a_k^2+\sum_{k=1}^{n}\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\|^2$$

$$=-\sum_{k=1}^{n}\left(\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\right)^2+\sum_{k=1}^{n}\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\|^2$$

$$=-\sum_{k=1}^{n}\mathbf{e}^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})^t\mathbf{e}+\sum_{k=1}^{n}\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\|^2$$

协方差矩阵的n-1倍：散布矩阵

$$=-\mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e}+\sum_{k=1}^{n}\|\mathbf{x}_k-\mathbf{m}\|^2$$

$$\mathbf{S}=\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})^t$$

最小化$J_1(\mathbf{e})$ $\longrightarrow$ 最大化 $\mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e}$，约束条件为：$\|\mathbf{e}\|=1$

最大化 $\mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e}$，约束条件为：$\|\mathbf{e}\|=1$ $\longrightarrow$ Lagrange乘子法

$$u = \mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e} - \lambda\mathbf{e}^t\mathbf{e}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{e}} = 2\mathbf{S}\mathbf{e} - 2\lambda\mathbf{e} = 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\mathbf{S}}\mathbf{e} = \underline{\lambda}\mathbf{e}$$

散布矩阵

散布矩阵的特征值

$$\mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e} = \mathbf{e}^t\lambda\mathbf{e} = \lambda$$

为了最大化 $\mathbf{e}^t\mathbf{S}\mathbf{e}$

选取散布矩阵最大特征值 λ_{max}

选取 λ_{max} 对应的特征向量作为投影直线e的方向

PCA算法——从0维，1维到*d'* 维

有*n*个*d*维样本，$x_1, x_2, \ldots x_n$,

零维表达：仅用一个样本x_0代表这些样本，使误差最小?

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{m} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k$$

简单，但不能反映样本间的差异

一维表达：将这些样本，映射到过m的一条直线上使误差最小?

1,选取散布矩阵 $S = \sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k - \mathbf{m})(\mathbf{x}_k - \mathbf{m})^t$ **最大特征值** $\lambda_{\max}$

2,选取 $\lambda_{\max}$ **对应的特征向量作为直线方向** $\mathbf{x} = \mathbf{m} + a\mathbf{e}$

3,将样本向直线做垂直投影

***d'* 维表达：将这些样本，映射到以m为原点的*d'* 维空间中，使误差准则函数最小?**

PCA算法*d'*维表达：

有样本集合$\{\mathbf{x}_1,\cdots,\mathbf{x}_n\}$，其中$\mathbf{x}=(x_1,\cdots,x_d)^t$，以样本均值$\mathbf{m}$为坐标原点建立新的坐标系，则有：$\mathbf{x}=\mathbf{m}+\sum_{i=1}^{d} a_i\mathbf{e}_i$，其中$\{\mathbf{e}_i\}$为标准正交向量基：

$$\mathbf{e}_i^t\mathbf{e}_j=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$$

因此有：

$$a_i=\mathbf{e}_i^t(\mathbf{x}-\mathbf{m})$$

将特征维数降低到$d'<d$，则有对$\mathbf{x}$的近似：$\hat{\mathbf{x}}=\mathbf{m}+\sum_{i=1}^{d'} a_i\mathbf{e}_i$

误差平方和准则函数：

$$J(\mathbf{e})=\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{x}}_k\right\|^2=\sum_{k=1}^{n}\left\|\sum_{i=1}^{d}a_{ik}\mathbf{e}_i-\sum_{i=1}^{d'}a_{ik}\mathbf{e}_i\right\|^2=\sum_{k=1}^{n}\left\|\sum_{i=d'+1}^{d}a_{ik}\mathbf{e}_i\right\|^2$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=d'+1}^{d}a_{ik}^2\quad=\sum_{i=d'+1}^{d}\sum_{k=1}^{n}\left[\mathbf{e}_i^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\mathbf{e}_i^t\right]$$

PCA算法d'维表达：

$$J(\mathbf{e})=\sum_{k=1}^{n}\left\|\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{x}}_k\right\|^2=\sum_{k=1}^{n}\left\|\sum_{i=1}^{d}a_{ik}\mathbf{e}_i-\sum_{i=1}^{d'}a_{ik}\mathbf{e}_i\right\|^2=\sum_{k=1}^{n}\left\|\sum_{i=d'+1}^{d}a_{ik}\mathbf{e}_i\right\|^2$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=d'+1}^{d}a_{ik}^2=\sum_{i=d'+1}^{d}\sum_{k=1}^{n}\left[\mathbf{e}_i^t(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})\mathbf{e}_i^t\right]$$

$$=\sum_{i=d'+1}^{d}\mathbf{e}_i^t\left[\underbrace{\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})(\mathbf{x}_k-\mathbf{m})}_{\text{散布矩阵}}\right]\mathbf{e}_i^t=\sum_{i=d'+1}^{d}\mathbf{e}_i^t\mathbf{S}\mathbf{e}_i^t$$

最小化$J(\mathbf{e})$，约束条件为：$\|\mathbf{e}\|=1$ 使用拉格朗日乘数法：

$$J'(\mathbf{e})=\sum_{i=d'+1}^{d}\left[\mathbf{e}_i^T\mathbf{S}\mathbf{e}_i-\lambda_i\left(\mathbf{e}_i^T\mathbf{e}_i-1\right)\right]$$

$$J'(\mathbf{e}) = \sum_{i=d'+1}^{d} \left[\mathbf{e}_i^T \mathbf{S} \mathbf{e}_i - \lambda_i \left(\mathbf{e}_i^T \mathbf{e}_i - 1 \right) \right]$$

$$\frac{\partial J'(\mathbf{e})}{\partial \mathbf{e}_i} = 2\mathbf{S}\mathbf{e}_i - 2\lambda_i \mathbf{e}_i = 0 \longrightarrow \mathbf{S}\mathbf{e}_i = \lambda_i \mathbf{e}_i$$

λ_i 为 $\mathbf{S}$ 的特征值，$\mathbf{e}_i$ 为 $\mathbf{S}$ 的特征矢量。

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{i=d'+1}^{d} \mathbf{e}_i^T \mathbf{S} \mathbf{e}_i = \sum_{i=d'+1}^{d} \lambda_i \mathbf{e}_i^T \mathbf{e}_i = \sum_{i=d'+1}^{d} \lambda_i$$

要使 $J(\mathbf{e})$ 最小，只需将s的特征值由大到小排序，选择最大的前 d' 个特征值对应的特征向量构成一个新的 d' 维坐标系，将样本向新的坐标系的各个轴上投影，计算出新的特征矢量

$$(x_1, \cdots, x_d)^T \to (a_1, \cdots, a_{d'})^T \quad \text{其中} \quad a_i = \mathbf{e}_i^T (\mathbf{x} - \mathbf{m})$$

PCA算法

1. 利用训练样本集合计算样本的均值 μ 和散布矩阵**S**；
2. 计算**S**的特征值，并由大到小排序；
3. 选择前**d'**个特征值对应的特征矢量作成一个变换矩阵$\mathbf{E}=[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_{d'}]$；
4. 训练和识别时，每一个输入的**d**维特征矢量**x**可以转换为**d'**维的新特征矢量**y**：

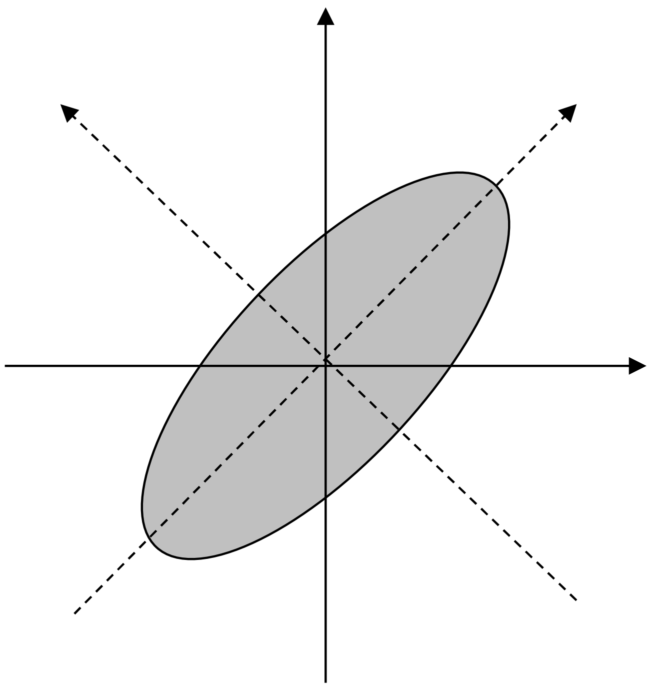
$$\mathbf{y} = \mathbf{E}^t(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

5. 通过**y**近似重构**x**为：

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{E}\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}$$

如果d'=d、S满秩，E是一个正交阵，有$\mathbf{E}^{-1}=\mathbf{E}^{T}$

PCA的讨论



特征矢量正交：因为S是实对称阵，所以其特征值为实数、特征矢量正交；

变换后特征不相关：将数据向新的坐标轴投影之后，特征之间是不相关的；

冗余特征：特征值描述了变换后各维特征的重要性，特征值为0的各维特征为冗余特征。

降维误差评估：累加特征值，计算比例

$$d' = \arg\min_{1\le k\le d}\left[\frac{\sum_{i=1}^{k}\lambda_i}{\sum_{i=1}^{d}\lambda_i}\ge\theta\right]$$

```
function [E, mu] = PCA( X, ratio )
d = size(X,2);
 %计算均值和协方差矩阵
mu = mean(X);
Sigma = cov(X);
%求特征值和特征矢量
[V,L] = eigs( Sigma, d ); Lamda = diag(L);
%计算累加特征值
AccLamda = cumsum(Lamda); t = AccLamda(d) * ratio;
%计算保留特征数
dd = find( (AccLamda(2:d)>=t) & (AccLamda(1:d-1)<t) ) + 1;
E = V(:,1:dd);
```

X：样本矩阵（**n**×**d**矩阵），
ratio：特征值累加和占总和的比例
E：基矢量矩阵（**d**×**d'**矩阵，每列一个矢量）
mu：均值矢量（行矢量）

Y--降维之后的样本矩阵（**n**×**d'**矩阵）

```
function Y = PCADR(X, E, mu )
n = size(X,1);
Y = (X-repmat(mu,n,1))*E; %repmat：平铺矩阵，将mu平铺成一个矩阵
```

例：现有下列训练样本，请用PCA算法将2维特征降为1维，并画出训练样本和投影主轴以及投影后的样本点。

$$(10,1)^t,(9,0)^t,(10,-1)^t,(11,0)^t,(0,9)^t,(1,10)^t,(0,11)^t,(-1,10)^t$$

均值： $\mathbf{m}=(5,5)^t$ 协方差矩阵： $S=\begin{bmatrix} 25.5 & -25 \\ -25 & 25.5 \end{bmatrix}$

解：

1. 计算协方差矩阵的特征值和特征向量：

$$S\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e} \qquad |S\text{-}\lambda \mathrm{E}|=0$$

2. 将特征值，并由大到小排序；

3. 选择前d'个特征值对应的特征矢量作成一个变换矩阵

$\mathbf{E}=[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_{d'}]$；

4. $\mathbf{x}$转换为d'维的新特征矢量 $\mathbf{y}=\mathbf{E}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}-\mathbf{m})$

例：现有下列训练样本，请用PCA算法将2维特征降为1维，并画出训练样本和投影主轴以及投影后的样本点。

$$(10,1)^t,(9,0)^t,(10,-1)^t,(11,0)^t,(0,9)^t,(1,10)^t,(0,11)^t,(-1,10)^t$$

均值： $\mathbf{m}=(5,5)^t$ 协方差矩阵： $S=\begin{bmatrix}25.5 & -25\\ -25 & 25.5\end{bmatrix}$

解：1 计算协方差矩阵的特征值和特征向量：

$$S\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e}$$

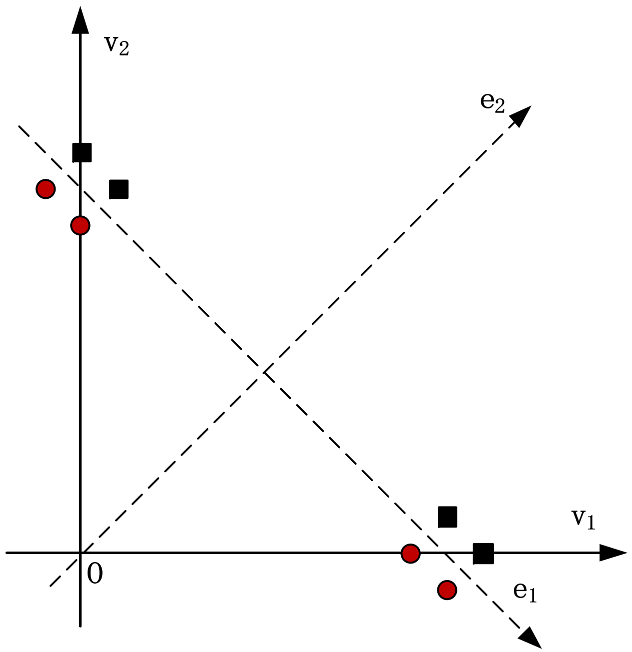
$$|S\text{-}\lambda \mathrm{E}|=0$$

$$\lambda_1=0.5 \quad \mathbf{e}_1=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}25.5 & -25\\ -25 & 25.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e_1\\ e_2\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}e_1\\ e_2\end{bmatrix}$$

$$\begin{vmatrix}25.5-\lambda & -25\\ -25 & 25.5-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$\lambda_2=50.5 \quad \mathbf{e}_2=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ -1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$



2）将特征值，并由大到小排序；

$$\lambda_1 = 50.5 \qquad \lambda_2 = 0.5$$

$$\mathbf{E} = [\mathbf{e}_1] = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

3）选择前d’个特征矢量构成变换矩阵E=[e1, e2, …, ed’]；

$$\mathbf{E} = [\mathbf{e}_1] = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

4）x转换为d’维的新特征矢量

y = E^t(x-m)： $\mathbf{m} = (5,5)^t$

$$(10,1)^t, (9,0)^t, (10,-1)^t, (11,0)^t, (0,9)^t, (1,10)^t, (0,11)^t, (-1,10)^t$$

新手作业：现有下列训练样本，请用PCA算法将2维特征降为1维，并画出训练样本和投影主轴以及投影后的样本点。

$$(2,0)^T,(2,1)^T,(3,0)^T,(4,2)^T,(3,2)^T,(4,1)^T$$

解： 0: 均值： $\mathbf{m}=?$ 协方差矩阵： $S=?$

1. 计算协方差矩阵的特征值和特征向量：

$$S\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e} \qquad |S\text{-}\lambda \mathrm{E}|=0$$

2. 将特征值，并由大到小排序；

3. 选择前d'个特征值对应的特征矢量作成一个变换矩阵

$\mathbf{E}=[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_{d'}]$；

4. $\mathbf{x}$转换为d'维的新特征矢量 $\mathbf{y} = \mathbf{E}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x} - \mathbf{m})$

详见《模式分析的核方法》**6.2**节

Kernel PCA

- 基本思想：
  - 利用核函数，将原始特征"映射到高维空间中"进行**PCA**，从而实现非线性降维
- **KPCA**算法：
  - 计算**Gram**矩阵 $\mathbf{K}=\left[k\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right)\right]_{m\times m}$
  - 计算**K**的特征值和特征向量$\lambda^j, \mathbf{a}^j$,取最大的前**p**个特征值；
  - 规范化前个**p**特征向量，使得 $\left\|\boldsymbol{\alpha}^j\right\|^2=\dfrac{1}{\lambda^j}$
  - 计算样本的第***j***个核主成分(在第***j***个特征向量上的投影)

$$\mathbf{y}(j)\equiv\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^j k\left(\mathbf{x},\mathbf{x}_i\right)$$

训练样本的核矩阵

核函数： $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) =< \phi(\mathbf{x}),\phi(\mathbf{z}) >$

其中ϕ是从 X 到（内积）特征空间 F 的一个映射：

$$\phi : \mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x}) \in F$$

特征矩阵： n 个训练样本在特征空间 F 中映射，记为

$$\mathbf{X} = \left[\phi(\mathbf{x}_1),\cdots,\phi(\mathbf{x}_n)\right]$$

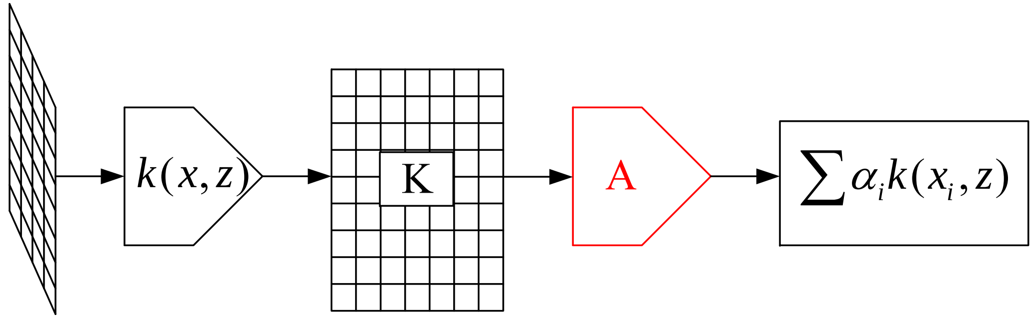
核矩阵： $\mathbf{X}$ 的 $n\times n$ Gram矩阵为核矩阵

$$\mathbf{K} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$$

$$\mathbf{K}_{ij} = \left\langle \phi(\mathbf{x}_i),\phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle = \kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$$

——内积矩阵的推广，在原始样本中提取到的全部信息

核方法概述



1）核函数

2）核矩阵

3）核方法的基础算法

利用核函数，间接计算特征空间中范数、距离、均值、方差…

4）核方法举例

核方法的基础算法

特征向量的范数:

$$\left\|\phi(\mathbf{x})\right\|_2 = \sqrt{\left\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}) \right\rangle} = \sqrt{\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$$

特征向量的规范化内积:

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \frac{\phi(\mathbf{x})}{\left\|\phi(\mathbf{x})\right\|}$$

$$\hat{\kappa}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \left\langle \hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{z}) \right\rangle = \left\langle \frac{\phi(\mathbf{x})}{\left\|\phi(\mathbf{x})\right\|}, \frac{\phi(\mathbf{z})}{\left\|\phi(\mathbf{z})\right\|} \right\rangle$$

$$= \frac{\left\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z}) \right\rangle}{\left\|\phi(\mathbf{x})\right\| \left\|\phi(\mathbf{z})\right\|} = \frac{\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{\sqrt{\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \kappa(\mathbf{z}, \mathbf{z})}}$$

核方法的基础算法

特征向量线性组合的范数:

$$\left\| \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i) \right\|^2 = \left\langle \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^{\ell} \alpha_j \phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i \sum_{j=1}^{\ell} \alpha_j \left\langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle$$

$$= \sum_{i,j=1}^{\ell} \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

核方法的基础算法

特征向量之间的距离:

$$\begin{aligned}\left\|\phi(\mathbf{x})-\phi(\mathbf{z})\right\|^2 &= \left\langle \phi(\mathbf{x})-\phi(\mathbf{z}), \phi(\mathbf{x})-\phi(\mathbf{z}) \right\rangle \\ &= \left\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}) \right\rangle - 2\left\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z}) \right\rangle + \left\langle \phi(\mathbf{z}), \phi(\mathbf{z}) \right\rangle \\ &= \kappa(\mathbf{x},\mathbf{x}) - 2\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) + \kappa(\mathbf{z},\mathbf{z})\end{aligned}$$

核方法的基础算法

质心（特征均值）的范数

$$\phi_s = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i)$$

$$\|\phi_s\|^2 = \left\langle \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i), \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\left\langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle = \frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

质心的范数的平方=核矩阵元素的平均值

核方法的基础算法

点到质心（特征均值）的距离

$$\phi_s = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i)$$

$$\left\|\phi(\mathbf{x}) - \phi_s\right\|^2 = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}) \rangle + \langle \phi_s, \phi_s \rangle - 2\langle \phi(\mathbf{x}), \phi_s \rangle$$

$$= \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + \frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \frac{2}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$$

核方法的基础算法

特征方差

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\left\|\phi(\mathbf{x}_i)-\phi_s\right\|^2$$

$$=\frac{1}{\ell}\sum_{k=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_k)+\frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)-\frac{2}{\ell^2}\sum_{i,k=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_k)$$

$$=\frac{1}{\ell}\sum_{k=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_k)-\frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$$

核矩阵对角线元素平均值 - 全体元素平均值

核方法的基础算法

中心化数据: 把原点移到质心,使平均特征值最小化

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \phi_s = \phi(\mathbf{x}) - \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i)$$

移动后，新的核函数为

$$\hat{\kappa}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \left\langle \hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{z}) \right\rangle$$

$$= \left\langle \phi(\mathbf{x}) - \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{z}) - \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\phi(\mathbf{x}_i) \right\rangle$$

$$= \kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) - \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x},\mathbf{x}_i) - \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_j,\mathbf{z}) + \frac{1}{\ell^2}\sum_{i,j=1}^{\ell}\kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$$

核PCA

如何表示核空间中的特征向量?

——样本的线性组合 $$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, \phi(\mathbf{x}_i)$$

如何计算特征值? $\lambda \mathbf{V} = \overline{C}\mathbf{V}$ $$\overline{C} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \phi(\mathbf{x}_i)\phi^t(\mathbf{x}_i)$$

如何计算投影?

$$\phi^t(\mathbf{x})\mathbf{V}_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^j \, \phi^t(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^j \, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$$

- 特征向量处于样本所张成的空间，即：$v \in span\{x_1, \cdots, x_m\}$，

设有样本集合：$X = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_m\}$，假设样本的均值为 0，样本集合的协

方差矩阵为：$C = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} x_j \cdot x_j^t$，令$\lambda$为$C$的特征值，$\mathbf{v}$为对应特征矢量，

则有：

$$\lambda \mathbf{v} = C\mathbf{v} = \left(\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\mathbf{x}_j \cdot \mathbf{x}_j^t\right)\mathbf{v} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\left(\mathbf{x}_j^t\mathbf{v}\right)\mathbf{x}_j$$

即：$\mathbf{v} = \frac{1}{m\lambda}\sum_{j=1}^{m}\left(\mathbf{x}_j^t\mathbf{v}\right)\mathbf{x}_j$，存在$\alpha_1, \cdots, \alpha_m$，使得：$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i \phi\left(\mathbf{x}_i\right)$

➤ 推导特征空间中协方差矩阵特征值和特征向量的求解方法。

中心化后，样本集合在特征空间中的均值为 0，协方差矩阵为：

$$\overline{C}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\phi(\mathbf{x}_i)\phi^t(\mathbf{x}_i) \tag{3}$$

令：λ 为 $\overline{C}$ 的特征值，$\mathbf{V}$ 为对应的特征矢量，则有：$\lambda\mathbf{V}=\overline{C}\mathbf{V}$ (4)

存在 $\alpha_1,\cdots,\alpha_m$，使得：$\mathbf{V}=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\phi(\mathbf{x}_i)$ (5)

(5)式左乘 $\phi^t(\mathbf{x}_j)$，则有：

$$\lambda\left[\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\mathbf{V}\right]=\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\overline{C}\mathbf{V},\quad j=1,\cdots,m$$

核方法的关键技巧，凑内积：只要凑成内积，就可以替换为核函数

$$\mathbf{V}=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\phi(\mathbf{x}_i)$$

$$\lambda\mathbf{V}=\bar{C}\mathbf{V}$$

$$\bar{C}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\phi(\mathbf{x}_i)\phi^t(\mathbf{x}_i)$$

$$\lambda\left[\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\mathbf{V}\right]=\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\bar{C}\mathbf{V},\quad j=1,\cdots,m$$

$$=\lambda\left(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\phi^t(\mathbf{x}_j)\phi(\mathbf{x}_i)\right)$$

$$=\lambda\left(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i k_{ji}\right)$$

$$=\lambda(\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha})_j$$

$$=\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\frac{1}{m}\sum_{l=1}^{m}\phi(\mathbf{x}_l)\phi^t(\mathbf{x}_l)\cdot\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\phi(\mathbf{x}_i)$$

$$=\frac{1}{m}\sum_{l=1}^{m}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left(\phi^t(\mathbf{x}_j)\phi(\mathbf{x}_l)\cdot\phi^t(\mathbf{x}_l)\phi(\mathbf{x}_i)\right)$$

$$=\frac{1}{m}\sum_{l=1}^{m}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i k_{jl}k_{li}$$

$$=\frac{1}{m}(\mathbf{K}^2\boldsymbol{\alpha})_j$$

$$\mathbf{K}=\left[k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)\right]_{m\times m}$$
$$=\left(\phi^t(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j)\right)_{m\times m}$$
$$\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\cdots,\alpha_m)^t$$

$(\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha})_j$ 为矢量 $\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}$ 的第 j 个元素

$$\lambda\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}=\frac{1}{m}\mathbf{K}^2\boldsymbol{\alpha}$$

λ 代替 $m\lambda$，即为：$\lambda\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}$

$$\mathbf{V}=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,\phi(\mathbf{x}_i) \qquad \overline{C}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\phi(\mathbf{x}_i)\phi^t(\mathbf{x}_i)$$

$$\lambda\mathbf{V}=\overline{C}\,\mathbf{V}$$

$$\lambda\left[\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\mathbf{V}\right]=\phi^t(\mathbf{x}_j)\cdot\overline{C}\mathbf{V},\quad j=1,\cdots,m$$

$$\lambda\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}=\frac{1}{m}\mathbf{K}^2\boldsymbol{\alpha} \longrightarrow \lambda\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}$$

令：$\lambda^1,\cdots,\lambda^m$ 为矩阵 $\mathbf{K}$ 的特征值，$\boldsymbol{\alpha}^1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}^m$ 为特征矢量，则对应的 $\overline{C}$ 的第 i 个特征值和特征矢量为：

$$\lambda_i=\frac{\lambda^i}{m},\quad \mathbf{V}_i=\sum_{j=1}^{m}\alpha_j^i\phi(\mathbf{x}_j) \qquad (12)$$

其中 α_j^i 为 $\boldsymbol{\alpha}^i$ 的第 j 个元素。

规范化，将 $\mathbf{V}_i$ 转化为单位矢量。

$$\begin{aligned}(\mathbf{V}_i)^t\cdot\mathbf{V}_i &= \sum_{j,l=1}^{m}\alpha_j^i\alpha_l^i\left(\phi^t\left(\mathbf{x}_j\right)\cdot\phi\left(\mathbf{x}_l\right)\right)\\ &= \sum_{j,l=1}^{m}\alpha_j^i\alpha_l^i\cdot k\left(\mathbf{x}_j,\mathbf{x}_l\right)=\left(\boldsymbol{\alpha}^i\right)^t\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}^i=\lambda^i\left(\boldsymbol{\alpha}^i\right)^t\boldsymbol{\alpha}^i\\ &= \lambda^i\left\|\boldsymbol{\alpha}^i\right\|^2=1\end{aligned}$$

因此只须使 $\left\|\boldsymbol{\alpha}^i\right\|^2=\dfrac{1}{\lambda^i}$，即可使 $\mathbf{V}_i$ 规范化。

- 计算样本 $\mathbf{x}$ 在特征空间中第 j 个轴上的投影，利用(12)式，有：

$$\phi^t(\mathbf{x})\mathbf{V}_j=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^j\phi^t(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}_i)=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^j k(\mathbf{x},\mathbf{x}_i) \qquad (13)$$

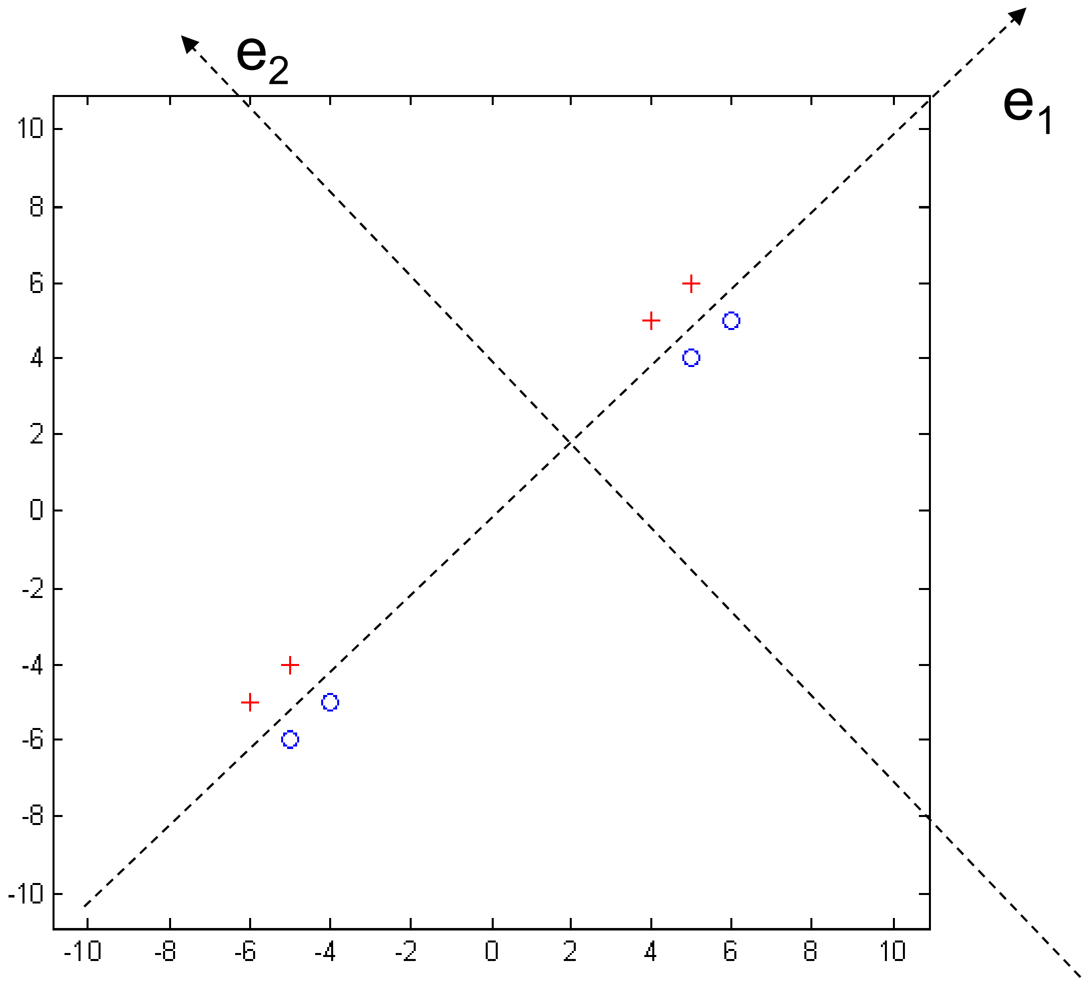
KPCA 算法：

1. 计算矩阵：$\mathbf{K}=\left[k\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right)\right]_{m\times m}$；
2. 计算 $\mathbf{K}$ 的特征值和特征向量：$\lambda^1,\cdots,\lambda^m$，$\boldsymbol{\alpha}^1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}^m$，取最大的前 p 个特征值 $\lambda^1,\lambda^2,\ \ldots\ ,\lambda^p$；
3. 规范化前 p 个特征向量，使得 $\left\|\boldsymbol{\alpha}^i\right\|^2=\dfrac{1}{\lambda^i}$；
4. 利用下式可以计算样本 $\mathbf{x}$ 的第 j 个核主成分。

$$\phi^t\left(\mathbf{x}\right)\mathbf{V}_j=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^j\,\phi^t\left(\mathbf{x}\right)\phi\left(\mathbf{x}_i\right)=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^j\,k\left(\mathbf{x},\mathbf{x}_i\right)$$

5.3.2 基于Fisher准则的可分性分析

（FDA, Fisher Discriminant Analysis ）



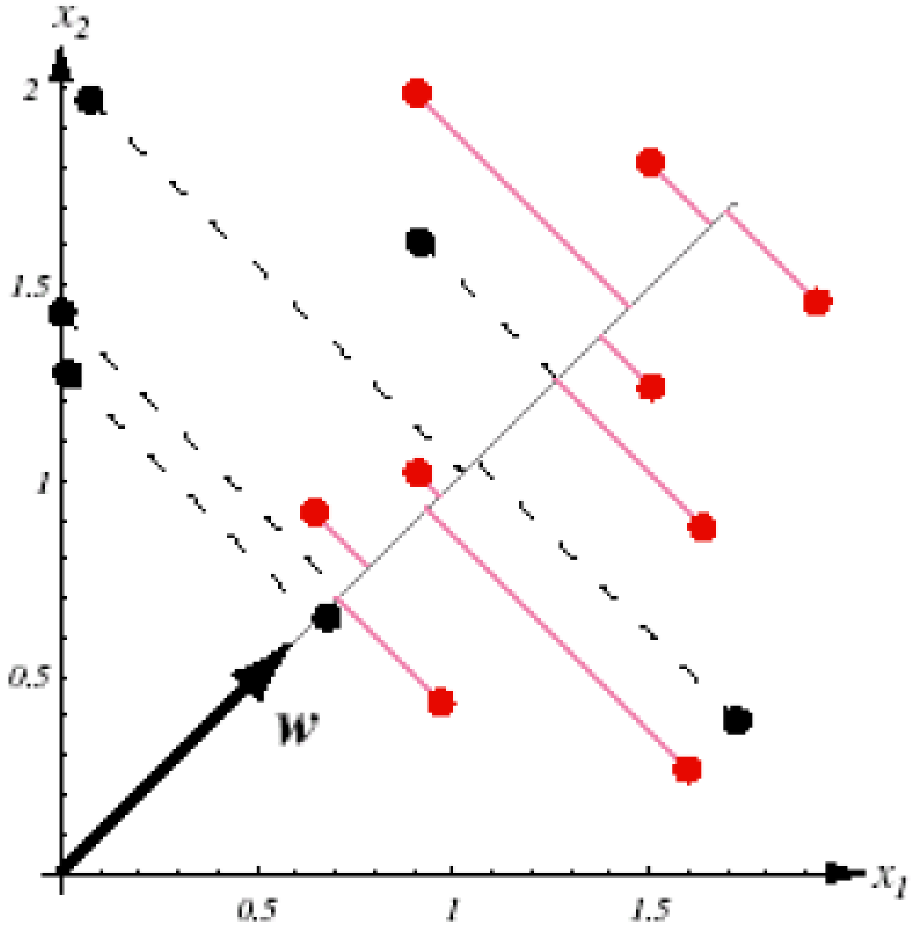
FDA与PCA

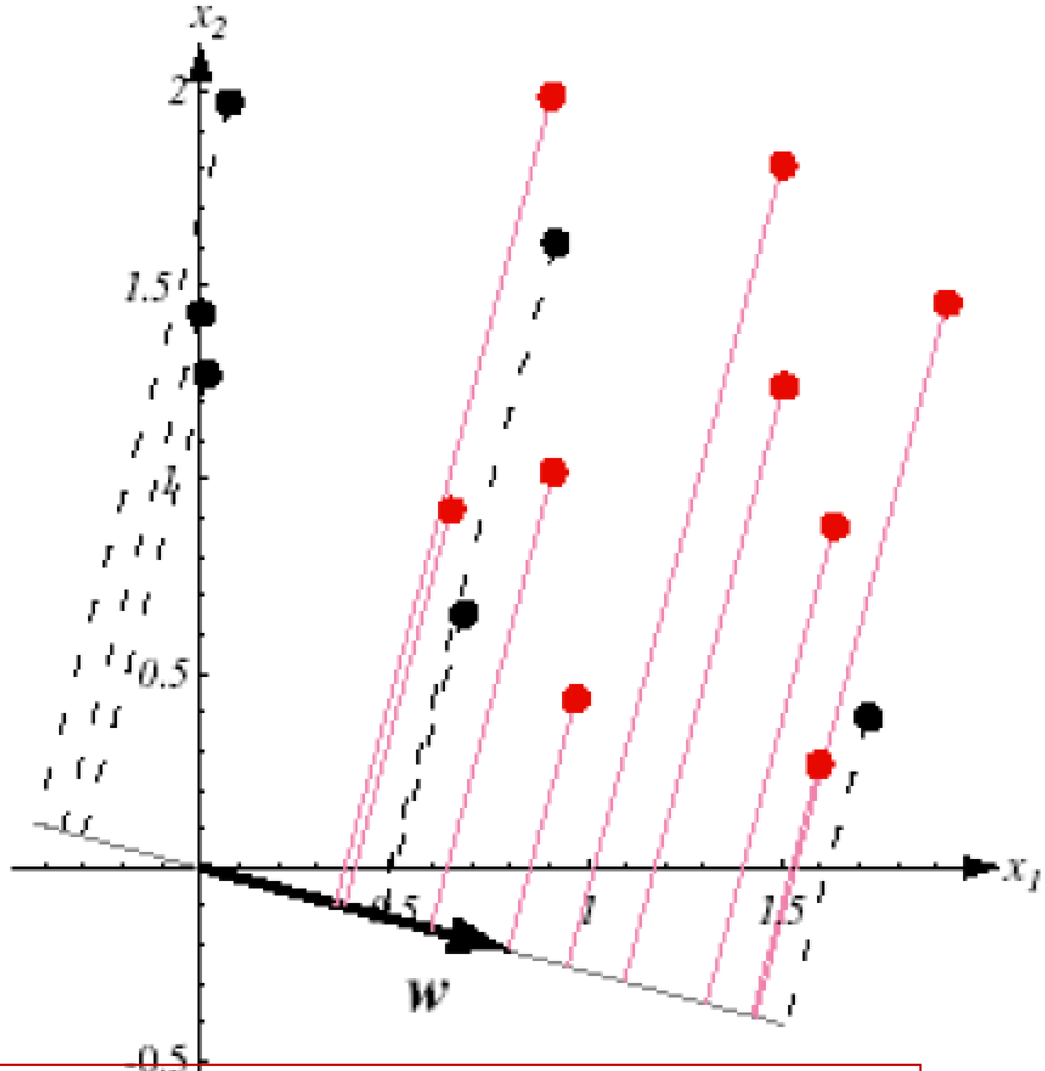
PCA 的可分性：PCA整体对待所有的样本，寻找“均方误差最小” 下的最优线性映射，不考虑样本的类别属性，它所忽略的投影方向有可能恰恰包含了重要的可分性信息；

FDA的可分性：FDA是在可分性最大意义下的最优线性映射，充分保留了样本的类别可分性信息；

FDA别名： FDA还被称为多重判别分析： MDA, Multiple Discriminant Analysis 或LDA(Linear Discriminant Analysis)。

Fisher 线性判别准则





如何选择直线方向W，使样本可分性最好?

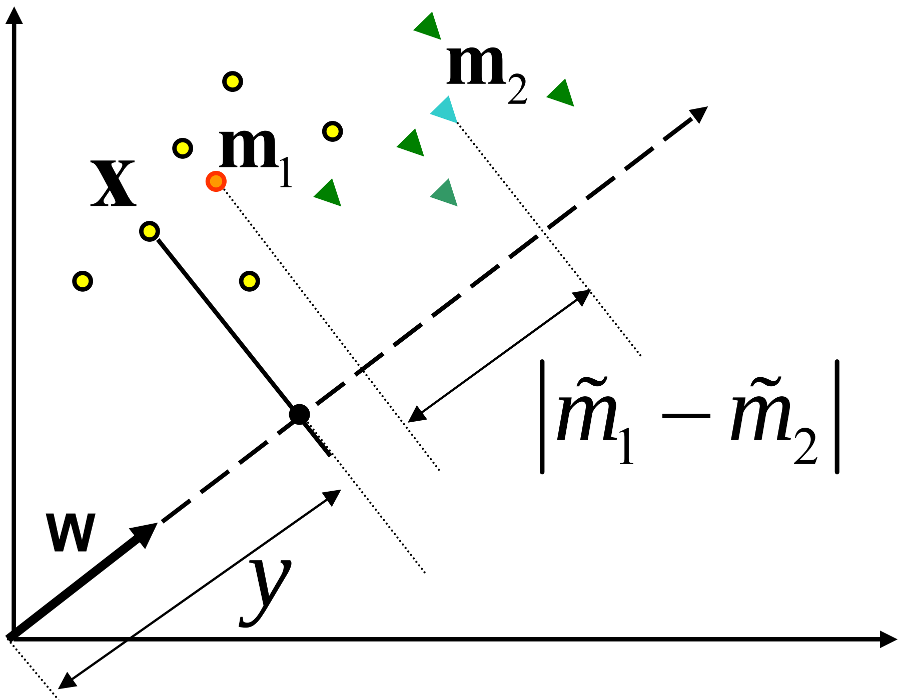
二分类问题 可分性准则函数的构造

样本点 **x** 在W方向上的投影 $y = \mathbf{w}^t \mathbf{x}$

两类样本均值M_1, M_2投影之差： $|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2| = |\mathbf{w}^t(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)|$

第 i类投影的内类散布： $\tilde{s}_i^2 = \sum_{y \in Y_i} (y - \tilde{m}_i)^2$

总体内类散布： $\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2$



可分性准则函数：
（ Fisher线性判别准则）

$$J(\mathbf{w}) = \frac{|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2|}{\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2}$$

准则函数的广义瑞利商形式

总类内散布矩阵：$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\mathbf{x}\in D_i} (\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t$

类间散布矩阵：$\mathbf{S}_B = (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t$

$$\tilde{s}_i^2 = \sum_{\mathbf{x}\in D_i} (\mathbf{w}^t\mathbf{x} - \mathbf{w}^t\mathbf{m}_i)^2 = \sum_{\mathbf{x}\in D_i} \mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t\mathbf{w} = \mathbf{w}S_i\mathbf{w}$$

$$\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2 = \mathbf{w}^t S_1 \mathbf{w} + \mathbf{w}^t S_2 \mathbf{w} = \mathbf{w}^t S_w \mathbf{w}$$

$$|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2| = (\mathbf{w}^t\mathbf{m}_1 - \mathbf{w}^t\mathbf{m}_2)^2 = \mathbf{w}^t(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t\mathbf{w} = \mathbf{w}^t\mathbf{S}_B\mathbf{w}$$

Fisher线性判别准则： $J(\mathbf{w}) = \dfrac{|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2|}{\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2} = \dfrac{\mathbf{w}^t\mathbf{S}_B\mathbf{w}}{\mathbf{w}^t\mathbf{S}_w\mathbf{w}}$ 广义瑞利商

广义特征向量

$\boldsymbol{A}$ 为 n 阶实对称矩阵，$\boldsymbol{B}$ 为 n 阶实对称正定矩阵

满足 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的数 λ 为 $\boldsymbol{A}$ **相对于** $\boldsymbol{B}$ **的特征值**

与 λ 相对应的非零解 $\boldsymbol{x}$ 称为**属于** λ **的特征向量**

广义瑞利商特性

非零向量 $\boldsymbol{x}_0$ 是 $R(\boldsymbol{x})$ 的驻点的充要条件是

$\boldsymbol{x}_0$ 为 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的属于特征值 λ 的特征向量

$$R(\mathbf{x})=\frac{\mathbf{x}^t\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x}}$$

$$\frac{dR}{d\mathbf{x}}=\frac{2\left(\mathbf{A}\mathbf{x}-R(\mathbf{x})\mathbf{B}\mathbf{x}\right)}{\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x}}=0$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_0=R(\mathbf{x}_0)\mathbf{B}\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x}R(\mathbf{x})=\mathbf{x}^t\mathbf{A}\mathbf{x}$$

$$2\mathbf{B}\mathbf{x}R(\mathbf{x})+\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x}\frac{dR}{d\mathbf{x}}=2\mathbf{A}\mathbf{x}$$

$\boldsymbol{x}_0$ 为 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的属于特征值 $\lambda=R(\boldsymbol{x}_0)$ 的特征向量

非零向量 $\boldsymbol{x}_0$ 是 $R(\boldsymbol{x})$ 的驻点的充要条件是 $\boldsymbol{x}_0$ 为 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{Bx}$ 的属于特征值 λ 的特征向量

Fisher线性判别准则： $J(\mathbf{w}) = \dfrac{|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2|}{\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2} = \dfrac{\mathbf{w}^t \mathbf{S}_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^t \mathbf{S}_w \mathbf{w}}$

类间散布矩阵： $\mathbf{S}_B = (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t$

总类内散布矩阵： $\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\mathbf{x} \in D_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^t$

最大化 $J(\mathbf{w})$ 必须满足： $\mathbf{S}_B \mathbf{w} = \lambda \mathbf{S}_w \mathbf{w}$

λ 为：$\mathbf{S}_B$ 相对于 $\mathbf{S}_w$ 的特征值， $\mathbf{w}$ 为对应的特征向量

当 $\mathbf{S}_w$ 非奇异时 $\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_B \mathbf{w} = \lambda \mathbf{w}$

c个类别向d'个方向投影——FDA算法

- 将**d**维特征降为**d'**维特征，使降维后的样本具有最大可分性

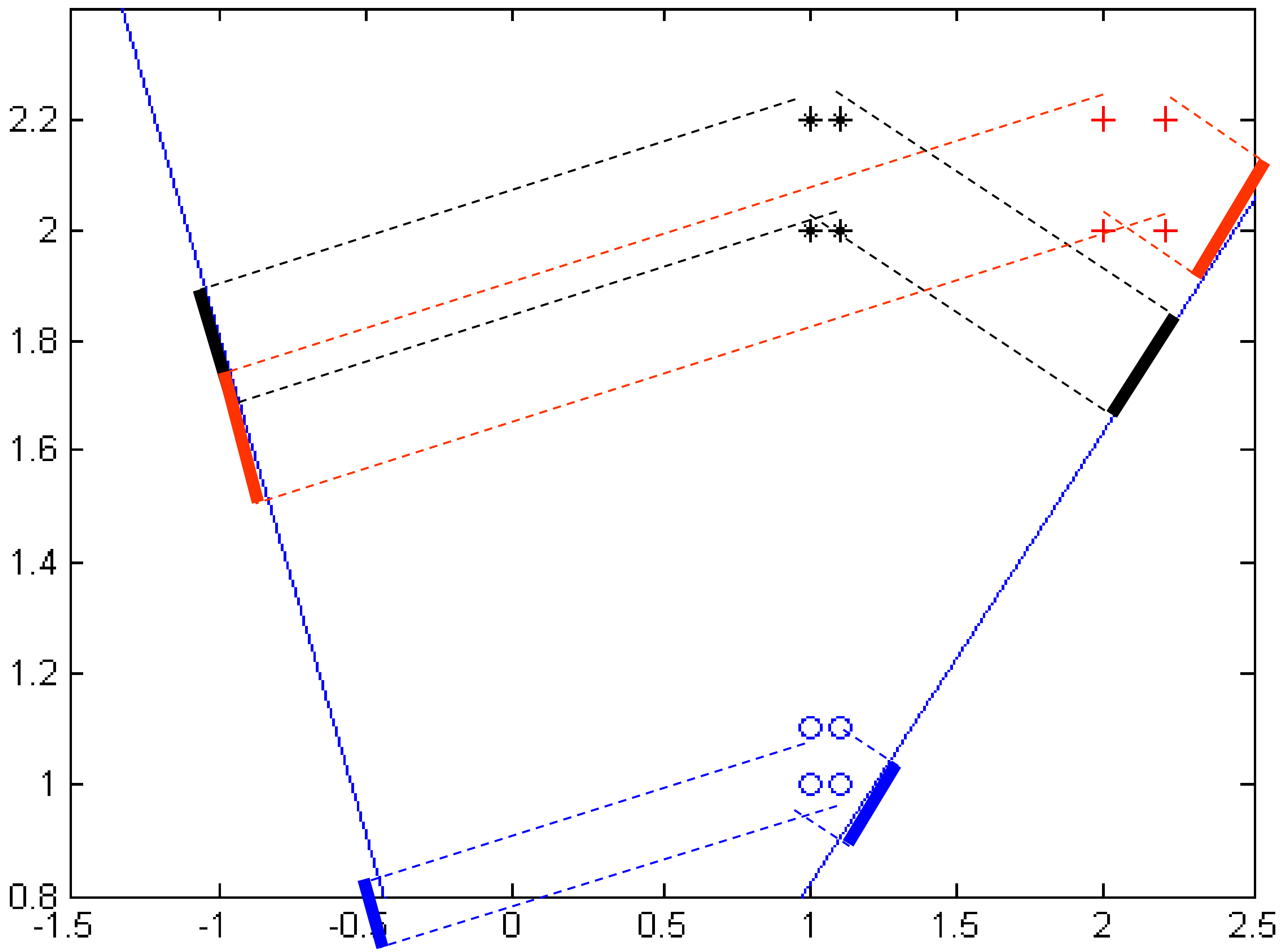
$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{c} \mathbf{S}_i \qquad \mathbf{S}_b = \sum_{i=1}^{c} n_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^t$$

1. 计算类内散布矩阵$\mathbf{S_w}$和类间散度矩阵$\mathbf{S_b}$；
2. 计算$\mathbf{S_w^{-1}S_b}$的特征值和特征矢量；
3. 选择前**d'**个特征矢量作为列矢量成变换矩阵

   $$\mathbf{E=[w_1, w_2, \ldots, w_{c-1}]};$$

4. 每一个输入的d维特征矢量**x**可以转换为d'维的新特征矢量$\mathbf{x' = E^t x}$。

3类问题FDA



FDA的讨论

- 经**FDA**变换后，新的坐标系不正交；
  - $S_w^{-1}S_b$不是对称阵，特征矢量不具正交性，变换后，特征之间仍具有一定相关性
- 只有当样本数足够多时，才能够保证类内散度矩阵$\mathbf{S_w}$为非奇异矩阵。
- 新坐标维数最多为**c-1**，**c**为类别数；
  - $S_w^{-1}S_b$至多存在**c-1**个大于**0**的特征值

FDA——作为线性分类器学习方法

- 找到使得两个类别样本可分性最强的投影方向w；
- 将所有的训练样本和待识别样本变换为1维特征$\mathbf{w}^t\mathbf{x}$
- 设定一个合适的阈值 $-w_0$ 进行分类

$$\mathbf{w}^t\mathbf{x}\begin{cases}\geq -w_0, & \mathbf{x}\in\omega_1\\ < -w_0, & \mathbf{x}\in\omega_2\end{cases}$$

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t\mathbf{x}+\underline{w_0}\begin{cases}\geq 0, & \mathbf{x}\in\omega_1\\ < 0, & \mathbf{x}\in\omega_2\end{cases}$$

阈值如何确定？——贝叶斯决策

作业

阅读李航-统计学习方法-第二版-第15章奇异值分解

1）求矩阵A的奇异值分解

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$