



四川大學
SICHUAN UNIVERSITY

机器学习-第十六章 聚类与降维

教师：胡俊杰 副教授

邮箱：hujunjie@scu.edu.cn

大纲



无监督学习

■ 有监督学习 (Supervised learning)

在一个有监督学习中，数据集**具有标签 y** ，目标是找到能够区分各类样本的决策边界

■ 无监督学习 (Unsupervised learning)

在无监督学习中，数据集**没有附带标签 y** ，无监督学习应用主要包括聚类、降维、关联规则、推荐系统等方面

K-means聚类

K-均值 (K-means)聚类

- K-means算法是一种常用的聚类算法，其目的在于将无标签数据划分成不同的组
- K-means算法包含一个迭代过程，其预设 k 个中心点，将样本划分至 k 个中心所构成的簇，并计算新的 k 个中心点，再迭代地划分样本

K-means聚类

K-means算法流程

输入： n 个样本的集合 X

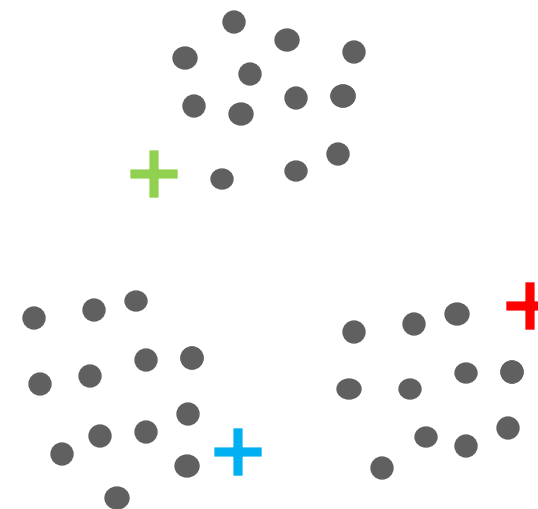
输出： 样本集合的聚类结果 C

1. 初始化。令 $t = 0$ ，**随机选择** k 个样本作为**初始聚类中心** $m^{(0)} = (m_1^{(0)}, m_2^{(0)}, \dots, m_k^{(0)})$
2. 对样本聚类。对固定的类中心 $m^{(t)} = (m_1^{(t)}, m_2^{(t)}, \dots, m_k^{(t)})$ ，计算每个样本到类中心的距离
，将每个样本指派到与其最近的中心的类中，构成聚类结果 $C^{(t)}$
3. 计算新的类中心。对聚类结果 $C^{(t)}$ ，计算当前各个类中的样本的均值，作为新的类中心
$$m^{(t+1)} = (m_1^{(t+1)}, m_2^{(t+1)}, \dots, m_k^{(t+1)})$$
4. 如果已收敛，则输出聚类结果 $C^{(t)}$ ；否则令 $t := t + 1$ ，返回第2步

K-means聚类

K-means算法流程

1. 初始化。随机选择 k 个样本作为初始聚类中心

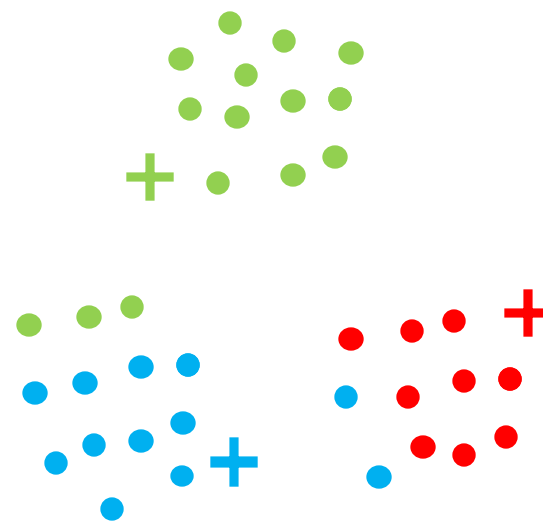


初始化中心

K-means聚类

K-means算法流程

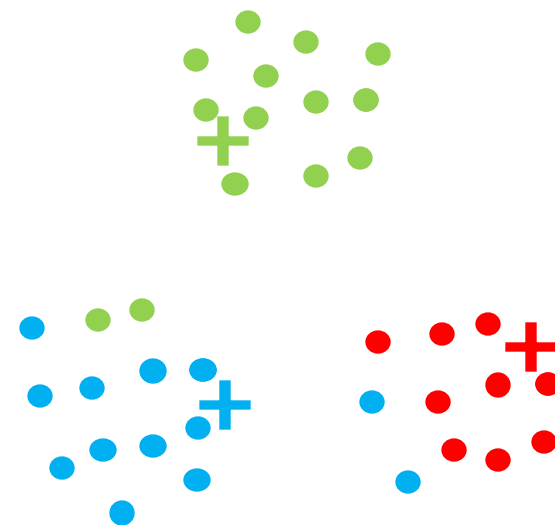
2. 对样本聚类。遍历所有样本，计算每个样本与 k 个中心之间的距离。将样本指派到与其最近的中心的类中，构成聚类结果 $C^{(t)}$



K-means聚类

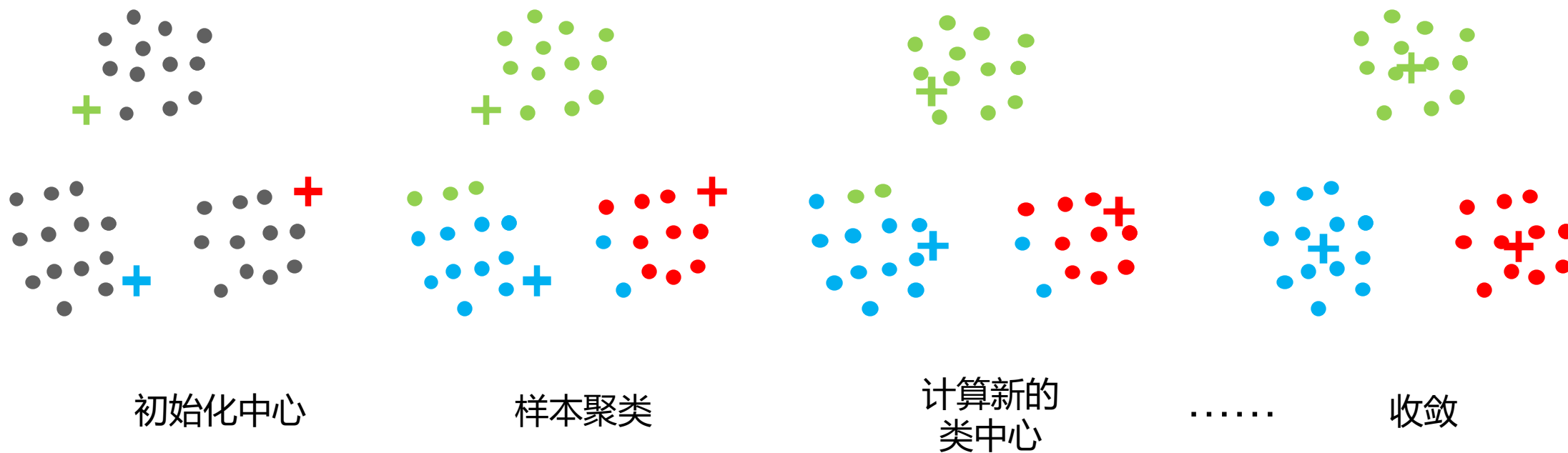
K-means算法流程

3. 计算新的类中心。对聚类结果 $C^{(t)}$ ，计算当前各个类中的样本的均值，作为新的类中心



K-means聚类

K-means算法流程总结



K-means聚类

K-means的优点

- 计算速度快
- 算法简单，易于理解

K-means的缺点

- 需要预先指定类的数量 k ，依赖人工经验
- 初始中心的选择直接影响聚类结果

大纲



奇异值分解

奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD) : 将一个非零的 $m \times n$ 实矩阵 $A \in R^{m \times n}$ 表示为以下三个实矩阵的乘积:

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

其中 U 是 m 阶正交矩阵, V 是 n 阶正交矩阵, Σ 是由降序排列的非负对角线元素组成的 $m \times n$ 矩形对角矩阵, 即

- $UU^T = I$
- $VV^T = I$
- $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_p)$
- $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$
- $p = \min(m, n)$

奇异值分解

子空间

若 S 是向量空间 V 的非空子集，且 S 满足以下条件：

- 对任意实数 a ，若 $x \in S$ ，则 $ax \in S$
- 若 $x \in S$ 且 $y \in S$ ，则 $x + y \in S$

则 S 称为 V 的子空间

设 v_1, v_2, \dots, v_n 为向量空间 V 的向量，则其线性组合

$$a_1 v_1 + a_2 v_2 + \dots + a_n v_n$$

构成 V 的子空间，称为 v_1, v_2, \dots, v_n 张成（span）的子空间

如果满足以下两个条件：

1. v_1, v_2, \dots, v_n 线性无关
2. v_1, v_2, \dots, v_n 张成向量空间 V

则 v_1, v_2, \dots, v_n 构成向量空间 V 的基（base），基的个数即向量空间的维数

奇异值分解

行空间

- 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 则由 A 的行向量张成的 R^n 的子空间, 称为 A 的行空间
- 由 A 的列向量张成的 R^m 的子空间, 称为 A 的列空间

零空间

- 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 令 $N(A)$ 为齐次方程组 $Ax = 0$ 的所有解的集合, 则 $N(A)$ 为 R^n 的一个子空间, 称为 A 的零空间 (null space) , 即

$$N(A) = \{x \in R^n | Ax = 0\}$$

正交补

- 设 Y 为 R^n 的子空间, R^n 中与 Y 中的每一向量正交的向量集合记为 Y^\perp , 即

$$Y^\perp = \{x \in R^n | x^T y = 0, \forall y \in Y\}$$

集合 Y^\perp 称为 Y 的正交补

奇异值分解

$$A \in R^{m \times n}$$

$$Ax = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \blacksquare \text{ 从列的角度理解 } \left[\begin{array}{c|c|c} \text{column 1} & & \text{column n} \end{array} \right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1(\text{column 1}) + \cdots + x_n(\text{column n}) = 0 \\ \blacksquare \text{ 从行的角度理解, } A \text{ 的行向量与 } x \text{ 正交} \end{array} \right.$$

奇异值分解

$$A \in R^{m \times n}$$

$$Ax = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} -row_1 & - \\ -row_2 & - \\ \dots & \\ -row_{\textcolor{red}{m}} & - \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

■ 矩阵的A的**行空间**与**零空间**正交

$$A^T y = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} -column_1 & - \\ -column_1 & - \\ \dots & \\ -column_{\textcolor{red}{n}} & - \end{bmatrix} y = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

■ 矩阵的A的**列空间**与**左零空间**正交

注: $A^T y = 0$ 与 $y^T A = 0^T$ 含义一样

奇异值分解

四个基本子空间：行空间、列空间、零空间、左零空间



■ 零空间是行空间的正交补

■ 左零空间是列空间的正交补

奇异值分解

$$A = U\Sigma V^T \quad \blacksquare \quad A \in R^{m \times n}, U \in R^{m \times m}, V \in R^{n \times n}, \Sigma \in R^{m \times n}, UU^T = I, VV^T = I$$

首先考虑 $A^T A$ ，其为 n 阶实对称矩阵，且特征值非负（证明如下）

假设 λ 是 $A^T A$ 的特征值， x 是 λ 对应的特征向量

$$\|Ax\|^2 = (Ax)^T(Ax) = x^T A^T A x = \lambda x^T x = \lambda \|x\|^2, \text{其中 } \lambda = \frac{\|Ax\|^2}{\|x\|^2} \geq 0$$

设矩阵 A 的秩为 r ，则 $A^T A$ 的秩也是 r ，由于 $A^T A$ 是对称矩阵， $A^T A$ 的秩等于正特征值的个数，因此

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0$$

$$\lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \cdots = \lambda_n = 0$$

令 $\sigma_j = \sqrt{\lambda_j}$ ，对应地

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

$$\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \cdots = \sigma_n = 0$$

注： σ_j 即为奇异值

奇异值分解

令 v_1, \dots, v_r 为 $A^T A$ 正特征值对应的向量, v_{r+1}, \dots, v_n 为 0 特征值对应的向量

$V = [V_1, V_2]$, 其中 $V_1 = [v_1, \dots, v_r]$ $V_2 = [v_{r+1}, \dots, v_n]$

$$\text{令 } \Sigma_1 = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \sigma_r \end{bmatrix} \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \Sigma \in R^{m \times n}$$

$$A = \boxed{[U_1, U_2]} \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} \quad \text{其中 } U = [U_1, U_2], \quad U \in R^{m \times m}, \text{ 且 } U \text{ 为正交矩阵}$$

?

奇异值分解

$$A = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix}$$
$$= U_1 \Sigma_1 V_1^T$$

■ 当 $U_1 \Sigma_1 = A V_1$ 时, 上式成立

即要求 $u_j = \frac{1}{\sigma_j} A v_j, j = 1, 2, \dots, r$ $U_1 = [u_1 \quad u_2 \quad \dots \quad u_r]$

已知

$$u_i, u_j \in U_1, \quad u_i^T u_j = \frac{1}{\sigma_i} v_i^T A^T \frac{1}{\sigma_j} A v_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T (A^T A v_j) = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} \sigma_j^2 v_i^T v_j = 0$$

u_1, u_2, \dots, u_r 构成 A 的列空间的一组标准正交基 (因为 $\frac{1}{\sigma_j} A v_j$ 是对 A 的列向量的线性组合)

■ 如何确定剩下的 U_2 ?

奇异值分解

$$A = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix}$$

$U_1 = [u_1, u_2, \dots, u_r]$ 构成 A 的列空间的一组标准正交基

要求 $U = [U_1, U_2]$ 为正交矩阵, 即求 U_1 的正交补

因为 $U_1 = [u_1, u_2, \dots, u_r]$ 张成 A 的列空间, 可知 U_2 即 A 的左零空间 (左零空间是列空间的正交补)

即求 $A^T y = 0$ 的解, 进而构建 $U_2 = [u_{r+1}, u_{r+2}, \dots, u_m]$

$$\text{至此, 已实现 } A = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} = U \Sigma V^T$$

■ 以上也称为矩阵的完全奇异值分解 (full singular value decomposition)

奇异值分解

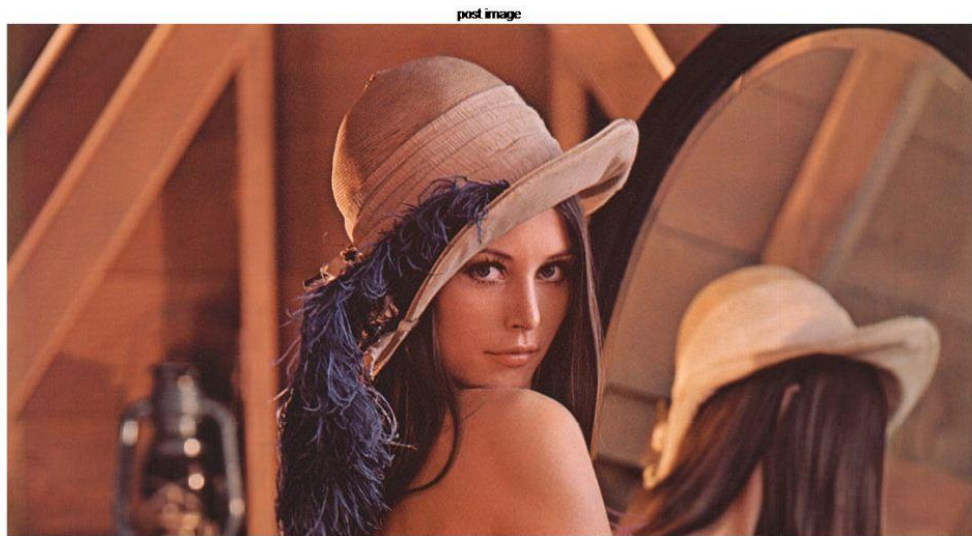
- 在矩阵的奇异值分解中，只取最大的 k 个奇异值对应的部分，则得到矩阵的截断奇异值分解 (truncated singular value decomposition)

设 A 为 $m \times n$ 实矩阵，秩为 r ，对于 $0 < k < r$ ，称 $U_k \Sigma_k V_k^T$ 为矩阵 A 的截断奇异值分解

$$A \approx U_k \Sigma_k V_k^T$$

其中 U_k 是 $m \times k$ 矩阵，对应完全奇异值分解中 U 的前 k 列。 V_k 是 $n \times k$ 矩阵，对应 V 的前 k 列。 Σ_k 是 k 阶对角矩阵，由 Σ 的前 k 个对角线元素构成。截断奇异值分解对应**有损压缩**。

奇异值分解

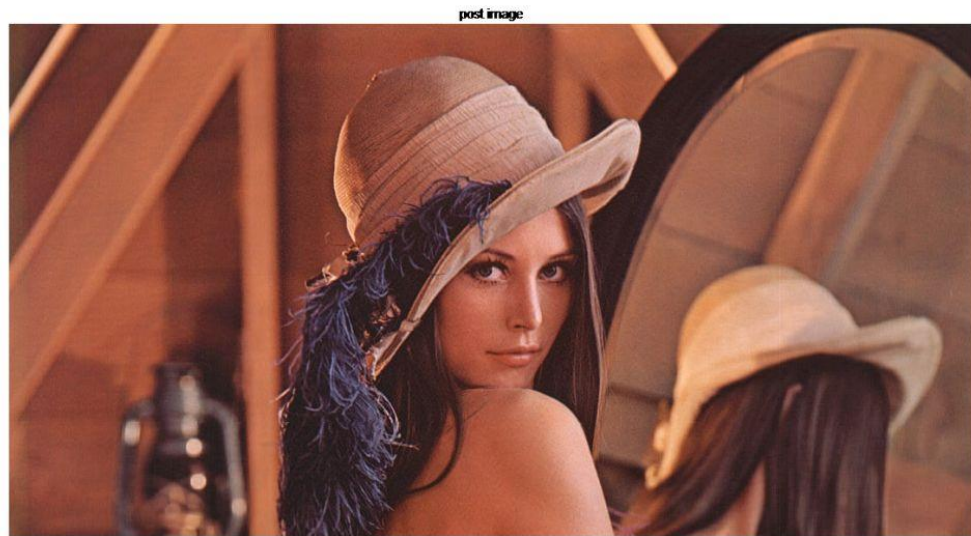


原始图像

$$m = 575, \quad n = 1081$$

原始图像维度 $575 \times 1081 \times 3 = 1,864,725$

原始图像经过压缩后的维度: $3 \times (575 \times 150 + 150 \times 150 + 1081 \times 150) = 812,700$



处理后的图像

设 $k = 150$, 则经过截断奇异值分解后的矩阵及维度:

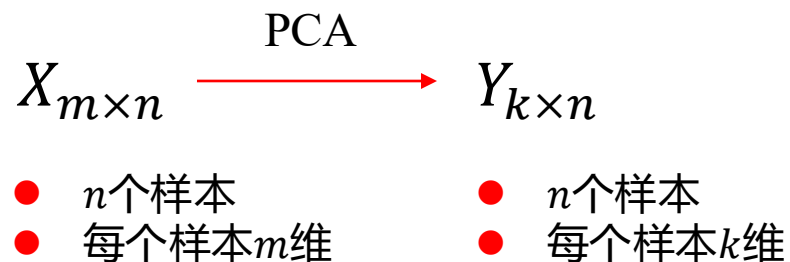
$$U_{m \times k} = 575 \times 150, \quad \Sigma_{k \times k} = 150 \times 150, \quad V_{k \times n}^T = 1081 \times 150$$

大纲



主成分分析

- 主成分分析（Principal Component Analysis, PCA）是一种常用的无监督学习方法，其利用正交变换把由线性相关变量表示的观测数据转换为少数几个由线性无关变量表示的数据，线性无关的变量称为主成分
- 主成分的个数（如 k ）通常小于原始变量（如 m ）的个数，所以主成分分析属于降维方法



主成分分析

核心思想

- 主成分分析中，首先对给定数据进行规范化，使得数据每一变量的平均值为0，方差为1
- 之后对数据进行正交变换，原来由线性相关变量表示的数据，通过正交变换变成由若干个线性无关的新变量表示的数据
- 新变量是可能的正交变换中变量的方差（信息保存）最大的，方差表示在新变量上信息的大小
- 可以把数据由少数主成分表示，实现对数据的降维

主成分分析

- 在数据总体 (population) 上进行的主成分分析称为**总体主成分分析**
- 在有限样本上进行的主成分分析称为**样本主成分分析**
- 总体主成分分析是样本主成分分析的基础

主成分分析

- 假设 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$ 是 m 维随机变量, 其均值向量是 \mathbf{u}

$$\mathbf{u} = E(\mathbf{x}) = (u_1, u_2, \dots, u_m)^T$$

- 协方差矩阵为 Σ

$$\Sigma = \text{cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = E[(\mathbf{x} - \mathbf{u})(\mathbf{x} - \mathbf{u})^T]$$

- 考虑 m 维随机变量 \mathbf{x} 到 m 维随机变量 $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$ 的线性变换

$$y_i = \boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{x} = \alpha_{1i}x_1 + \alpha_{2i}x_2 + \dots + \alpha_{mi}x_m \quad \text{其中 } \boldsymbol{\alpha}_i^T = (\alpha_{1i}, \alpha_{2i}, \dots, \alpha_{mi}), i = 1, 2, \dots, m$$

- y_i 性质如下

$$E(y_i) = \boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{u}, i = 1, 2, \dots, m$$

$$\text{var}(y_i) = E \left[(\boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{u})(\boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{u})^T \right] = \boldsymbol{\alpha}_i^T \Sigma \boldsymbol{\alpha}_i$$

$$\text{cov}(y_i, y_j) = E \left[(\boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_i^T \mathbf{u})(\boldsymbol{\alpha}_j^T \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_j^T \mathbf{u})^T \right] = \boldsymbol{\alpha}_i^T \Sigma \boldsymbol{\alpha}_j$$

主成分分析

总体主成分

$$y_i = \boldsymbol{\alpha}_i^T \boldsymbol{x} = \alpha_{1i}x_1 + \alpha_{2i}x_2 + \cdots + \alpha_{mi}x_m$$

- y_1, y_2, \dots, y_m 为 \boldsymbol{x} 的第1主成分、第2主成分、...、第 m 主成分，当满足以下条件时：
 - 系数向量 $\boldsymbol{\alpha}_i^T$ 是单位向量，即 $\boldsymbol{\alpha}_i^T \boldsymbol{\alpha}_i = 1, i = 1, 2, \dots, m, \boldsymbol{\alpha}_i^T \boldsymbol{\alpha}_j = 0 (i \neq j)$
 - 变量 y_i 与 y_j 互不相关，即 $\text{cov}(y_i, y_j) = 0, (i \neq j)$
 - 变量 y_1 是 \boldsymbol{x} 的所有线性变换中方差最大的； y_2 是与 y_1 不相关的 \boldsymbol{x} 的所有线性变换中方差最大的；一般地， y_i 是与 y_1, y_2, \dots, y_{i-1} 都不相关的 \boldsymbol{x} 的所有线性变换中方差最大的

主成分分析

- **定理**: 设 \mathbf{x} 是 m 维随机变量, Σ 是 \mathbf{x} 的协方差矩阵, Σ 的特征值分别是 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0$, 特征值对应的单位特征向量分别是 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$, 则 \mathbf{x} 的第 k 个主成分是

$$y_k = \alpha_k^T \mathbf{x} = \alpha_{1k}x_1 + \alpha_{2k}x_2 + \dots + \alpha_{mk}x_m, k = 1, 2, \dots, m$$

\mathbf{x} 的第 k 主成分的方差即协方差矩阵 Σ 的第 k 个特征值

$$\text{var}(y_k) = \alpha_k^T \Sigma \alpha_k = \lambda_k$$

主成分分析

证明：采用拉格朗日乘子法求出主成分

首先求 x 的第一主成分 $y_1 = \alpha_1^T x$ ，即求系数向量 α_1 。由主成分定义可知， α_1 是在 $\alpha_1^T \alpha_1 = 1$ 条件下，使得方差 $\text{var}(\alpha_1^T x) = \alpha_1^T \Sigma \alpha_1$ 达到最大的，即求解带约束的优化问题：

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1} \quad & \alpha_1^T \Sigma \alpha_1 \\ \text{s.t.} \quad & \alpha_1^T \alpha_1 = 1 \end{aligned}$$

定义拉格朗日函数 $\alpha_1^T \Sigma \alpha_1 - \lambda(\alpha_1^T \alpha_1 - 1)$ ，其中 λ 是拉格朗日乘子。对 α_1 求导，并令其为0，得

$$\Sigma \alpha_1 - \lambda \alpha_1 = 0$$

即 λ 是 Σ 的特征值， α_1 是对应的单位特征向量。假设 α_1 是 Σ 最大特征值 λ_1 对应的单位特征向量，则 α_1 与 λ_1 为最优化问题的解， $\alpha_1^T x$ 构成第一主成分，其方差为协方差矩阵的最大特征值

主成分分析

求第二主成分即求解以下带约束的优化问题：

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_2} \quad & \alpha_2^T \Sigma \alpha_2 \\ \text{s. t.} \quad & \alpha_2^T \alpha_2 = 1, \text{cov}(y_1, y_2) = \alpha_1^T \Sigma \alpha_2 = 0 \end{aligned}$$

$$\text{注意到 } \alpha_1^T \Sigma \alpha_2 = \alpha_2^T \Sigma \alpha_1 = \alpha_2^T \lambda_1 \alpha_1 = \lambda_1 \alpha_2^T \alpha_1 = \lambda_1 \alpha_1^T \alpha_2$$

(协方差矩阵对称)

定义拉格朗日函数 $\alpha_2^T \Sigma \alpha_2 - \lambda(\alpha_2^T \alpha_2 - 1) - \phi \alpha_2^T \alpha_1$ ，其中 λ 和 ϕ 是拉格朗日乘子，对 α_2 求导，并令其为0，得

$$\begin{aligned} 2\Sigma\alpha_2 - 2\lambda\alpha_2 - \phi\alpha_1 &= 0 \\ &\downarrow \text{左乘}\alpha_1^T \\ 2\alpha_1^T \Sigma \alpha_2 - 2\lambda \alpha_1^T \alpha_2 - \phi \alpha_1^T \alpha_1 &= 0 \end{aligned}$$

可知 $\phi = 0$ ，因此 $\Sigma\alpha_2 - \lambda\alpha_2 = 0$

λ 是 Σ 的特征值， α_2 是对应的单位特征向量。假设 α_2 是 Σ 的第二大特征值 λ_2 对应的单位特征向量，则 α_2 与 λ_2 构成以上优化问题的解。于是 $\alpha_2^T x$ 构成第二主成分，其方差为协方差矩阵的第二大特征值

主成分分析

- 一般地, 系数向量 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ 分别是 Σ 的第1直至第 m 个单位特征向量, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0$ 为对应的特征值。第 k 个主成分的方差为 Σ 的第 k 大特征值:

$$\text{var}(y_k) = \text{var}(\alpha_k^T \mathbf{x}) = \lambda_k, k = 1, 2, \dots, m$$

- 主成分分析的主要目的在于降维, 因此一般选择 $k(k \ll m)$ 个主成分 (线性无关变量) 来代替 m 个原有变量 (线性相关变量), 从而简化问题, 并能保留原有变量的大部分信息

主成分分析

样本主成分分析

- 假设对 m 维随机变量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$ 进行 n 次独立观测, 得到 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ 个观测样本, 用样本矩阵 X 表示

$$X = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_n] = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{m1} & x_{m2} & \dots & x_{mn} \end{bmatrix}$$

- 样本主成分分析即先规范化处理 X (各变量均值为0, 方差为1), 计算样本的协方差矩阵 Σ , 并对 Σ 进行特征值分解, 得到前 k 个特征值对应的单位特征向量 $\alpha_i, i = 1, 2, \dots, k$
- 计算 n 个样本的 k 个主成分

$$Y = A^T X$$

$$A_{m \times k} = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k] \quad X_{m \times n} = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_n] \quad Y_{k \times n} = [\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \dots \ \mathbf{y}_n]$$

主成分分析

数据矩阵的奇异值分解算法

- 对于规范化后的 $m \times n$ 样本矩阵 X ，构造新的 $n \times m$ 矩阵 X'

$$X' = \frac{1}{\sqrt{n-1}} X^T$$

可知 $X'^T X' = \left(\frac{1}{\sqrt{n-1}} X^T \right)^T \left(\frac{1}{\sqrt{n-1}} X^T \right) = \frac{1}{n-1} X X^T$ ，即 $X'^T X'$ 为 X 的协方差矩阵，主成分分析转化为求

$\Sigma = X'^T X'$ 的特征值和对应的特征向量

- 假设 X' 的截断奇异值分解为 $X' = U \Sigma V^T$ ，则 V 的列向量就是 $\Sigma = X'^T X'$ 的单位特征向量，即 X 的主成分可通过 X' 的奇异值分解实现

大纲



总结

考试时间地点

6月17日（17周周二） 16:45-18:45，综合楼B407

考试题型：名词解释、填空、问答题

谢 谢!

