模式识别课程

特征选择与提取

张俊超

中南大学
航空航天学院

模式识别-特征选择与提取

- 模式识别算法
  - 统计模式识别
    - 线性分类器
      - 感知器
      - LMSE算法
      - SVM
      - Fisher线性判别
    - 贝叶斯分类器
      - 最小错误率
      - 最小风险
    - 最近邻分类器
      - 模板匹配
      - K近邻算法
    - 神经网络分类器
      - 多层感知器
      - CNN
    - 统计聚类算法
      - 层次聚类
      - 动态聚类
    - 特征选择与特征提取
  - 结构模式识别

特征选择与提取– KL变换

- Karhunen-Loeve (KL)变换

对D维随机向量$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$,可以用一个完备的正交归一向量系$\mathbf{u}_j$,

$j = 1, 2, \cdots, \infty$来展开：

$$\boxed{\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j}$$

其中，$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$

c_j :线性组合的系数

特征选择与提取- KL变换

$$\mathbf{x}=\sum_{j=1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j$$

$$\boxed{\begin{gathered}\mathbf{u}_j^T\mathbf{x}=\sum_{j=1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j^T\mathbf{u}_j \\ c_j=\mathbf{u}_j^T\mathbf{x}\end{gathered}}$$

如果只用有限的d项$(d < D)$来逼近$\mathbf{x}$,即

$$\boxed{\bar{\bar{\mathbf{x}}}=\sum_{j=1}^{d} c_j \mathbf{u}_j}$$

特征选择与提取- KL变换

$\bar{\bar{\mathbf{x}}}$与原向量$\mathbf{x}$的均方差是：

$$c_j = \mathbf{u}_j^T \mathbf{x}$$

$$e = E\left[\left(\mathbf{x}-\bar{\bar{\mathbf{x}}}\right)^T\left(\mathbf{x}-\bar{\bar{\mathbf{x}}}\right)\right]$$

$$= E\left[\left(\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j\right)^T\left(\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j\right)\right] = \boxed{E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j^2\right]}$$

$$= E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T \mathbf{x}\mathbf{x}^T \mathbf{u}_j\right] = \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T E\left[\boxed{\mathbf{x}\mathbf{x}^T}\right]\mathbf{u}_j$$

$$= \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T \mathbf{\Phi} \mathbf{u}_j$$

特征选择与提取- KL变换

$$\min e=\sum_{j=d+1}^{\infty}\mathbf{u}_j^T\boldsymbol{\Phi}\mathbf{u}_j, s.t.\mathbf{u}_j^T\mathbf{u}_j=1, \forall j$$

拉格朗日乘子

$$f(\mathbf{u})=\sum_{j=d+1}^{\infty}\mathbf{u}_j^T\boldsymbol{\Phi}\mathbf{u}_j-\sum_{j=d+1}^{\infty}\lambda_j\left(\mathbf{u}_j^T\mathbf{u}_j-1\right)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{u})}{\partial\mathbf{u}_j}=\left(\boldsymbol{\Phi}\text{-}\lambda_j\mathbf{I}\right)\mathbf{u}_j=0, j=d+1,\cdots,\infty$$

特征值分解

$$\boxed{\boldsymbol{\Phi}\mathbf{u}_j=\lambda_j\mathbf{u}_j}$$

将该式子带入原式

特征选择与提取- KL变换

$$e=\sum_{j=d+1}^{\infty}\lambda_j\mathbf{u}_j^T\mathbf{u}_j=\sum_{j=d+1}^{\infty}\lambda_j$$

要用d项$(d<D)$来逼近$\mathbf{x}$,使误差最小：则应该把矩阵$\mathbf{\Phi}$的特征值从大到小的顺序排列，选择前d个特征值对应的特征向量。

$\mathbf{u}_j, j=1,2,\cdots,d$组成了新的特征空间，样本$\mathbf{x}$在新空间上的展开系数$c_j=\mathbf{u}_j^T\mathbf{x}$，$j=1,2,\cdots,d$就组成了样本的新的特征向量。(KL变换)

$$\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1^T\\ \mathbf{u}_2^T\\ \vdots\\ \mathbf{u}_d^T\end{bmatrix}\mathbf{x}=\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_d\end{bmatrix}$$

特征选择与提取–PCA

- 主成分分析(Principle Component Analysis)

样本做去均值的操作 $\boxed{\mathbf{x}=\mathbf{x}\text{-}\boldsymbol{\mu}=\sum_{j=1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j}$

$$e = E\left[\left(\mathbf{x}-\overline{\overline{\mathbf{x}}}\right)^T\left(\mathbf{x}-\overline{\overline{\mathbf{x}}}\right)\right]$$

$$= E\left[\left(\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j\right)^T\left(\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j \mathbf{u}_j\right)\right] = E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty} c_j^2\right]$$

$$= E\left[\sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T \mathbf{x}\mathbf{x}^T \mathbf{u}_j\right] = \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T E\left[\mathbf{x}\mathbf{x}^T\right]\mathbf{u}_j$$

$$= \sum_{j=d+1}^{\infty} \mathbf{u}_j^T \boldsymbol{\Phi} \mathbf{u}_j$$

Φ：协方差矩阵

非负正定

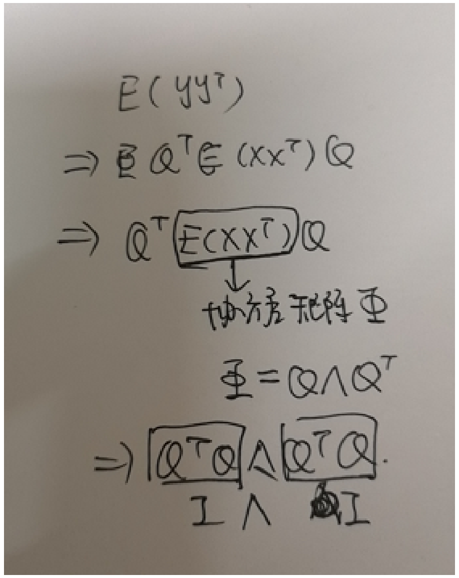
特征选择与提取–PCA

- **协方差矩阵的特征值分解：**

$$\mathbf{\Phi}=\mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^T$$

Q：正交矩阵（每一列是一个特征向量） Q^T Q=I

Λ：对角阵（主对角线上的元素是特征值）



PCA变换后：　$\mathbf{y}=\mathbf{Q}^T\mathbf{x}$

协方差矩阵为对角阵，意味着已经去相关

特征选择与提取–PCA

- PCA流程：
  - 样本进行去均值的操作
  - 估计协方差矩阵
  - 对协方差矩阵进行特征值分解，并按照特征值从大到小进行排序，对应地调整特征向量→**Q**
  - 变换矩阵**P=Q’**(转置)
  - 降维时：**选择变换矩阵的前*d*行**


谢谢聆听！