

1 隐藏连续变量: 降维

1.1 主成分分析

定义 1.1 主成分分析 主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 是一种统计方法, 用于通过线性变换将数据从高维空间映射到低维空间, 以保留数据的主要特征和结构.

一般而言, 数据的分布在空间中是各向异性的, 即在某些方向上数据的变化更显著. 通过 PCA 可以找到点云数据的主要方向 (即主轴), 舍弃变化较小的方向, 从而实现数据降维.

首先, 考虑给定的一组点 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ 以及中心坐标

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i$$

首先, 为了防止平移对 PCA 结果的影响, 我们需要将点云数据进行中心化处理, 即将每个点减去中心坐标:

$$\mathbf{x}'_n = \mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}, \quad n = 1, \dots, N$$

构造矩阵

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}'_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}'_N \end{bmatrix}$$

然后计算 \mathbf{X} 的协方差矩阵

$$\Sigma_X = \mathbf{X} \mathbf{X}^t$$

二维情况下的协方差矩阵的两个特征向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 表示数据的两条轴线. 对应于更大的特征值的特征向量 \mathbf{v}_1 表示数据变化更显著的方向, 即主成分方向, 而 \mathbf{v}_2 则表示数据变化最小的方向. 对于更高维的情况也是同理.

对协方差矩阵 Σ_X 进行特征值分解, 可得:

$$\Sigma_P = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^t$$

其中矩阵 \mathbf{V} 的列向量即为 Σ_X 的特征向量, 它们也就确定了点云的主轴方向. 矩阵 $\mathbf{\Lambda}$ 为对角矩阵, 其对角线上的元素为对应的特征值, 这些特征值表示了数据在各个主轴方向上的方差大小.

通过选择前 k 个最大的特征值所对应的特征向量, 我们可以构造一个降维映射矩阵 \mathbf{W} :

$$\mathbf{W} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k]$$

然后, 我们可以将原始数据投影到这个低维空间中, 得到降维后的数据表示:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \mathbf{W}$$

这就完成了数据的降维.