机器学习-降维

本章目录

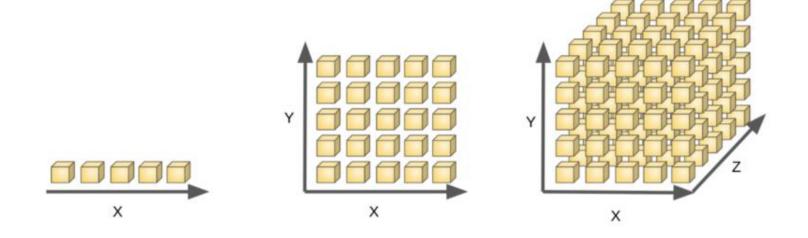
- 01 降维概述
- 02 SVD(奇异值分解)
- 03 PCA(主成分分析)

01 降维概述

- 02 SVD(奇异值分解)
- 03 PCA(主成分分析)

维数灾难(Curse of Dimensionality):通常是指在涉及到向量的计算的问题中,随着维数的增加,计算量呈指数倍增长的一种现象。

在很多机器学习问题中,训练集中的每条数据经常伴随着上干、甚至上万个特征。要处理这所有的特征的话,不仅会让训练非常缓慢,还会极大增加搜寻良好解决方案的困难。这个问题就是我们常说的维数灾难。



维数灾难

维数灾难涉及数字分析、抽样、组合、机器学习、数据挖掘和数据库等诸多领域。在机器学习的建模过程中,通常指的是随着特征数量的增多,计算量会变得很大,如特征达到上亿维的话,在进行计算的时候是算不出来的。有的时候,维度太大也会导致机器学习性能的下降,并不是特征维度越大越好,模型的性能会**随着特征的增加先上升后下降**。

什么是降维?

降维(Dimensionality Reduction)是将训练数据中的样本(实例)从高维空间转换到低维空间,该过程与信息论中有损压缩概念密切相关。同时要明白的,**不存在完全无损的降维。** 有很多种算法可以完成对原始数据的降维,在这些方法中,降维是通过对原始数据的线性变换实现的。

为什么要降维

- 高维数据增加了运算的难度
- 高维使得学习算法的泛化能力变弱(例如,在最近邻分类器中, 样本复杂度随着维度成指数增长),维度越高,算法的搜索难度 和成本就越大。
- 降维能够增加数据的可读性,利于发掘数据的有意义的结构

降维的主要作用

- 1.减少冗余特征,降低数据维度
- 2.数据可视化

减少冗余特征

假设我们有两个特征:

 x_1 :长度用厘米表示的身高; x_2 : 是用英寸表示的身高。

这两个分开的特征 x_1 和 x_2 ,实际上表示的内容相同,这样其实可

以减少数据到一维,只有一个特征表示身高就够了。

很多特征具有**线性关系**,具有线性关系的特征很多都是冗余的特征,去掉冗余特征对机器学习的计算结果不会有影响。

数据可视化

t-distributed Stochastic Neighbor Embedding(t-SNE)

t-SNE (TSNE) 将数据点之间的相似度转换为概率。原始空间中的相似度由高斯联合概率表示,嵌入空间的相似度由"学生t分布"表示。

虽然Isomap, LLE和variants等数据降维和可视化方法,更适合展开单个连续的低维的manifold。但如果要准确的可视化样本间的相似度关系,如对于下图所示的S曲线(不同颜色的图像表示不同类别的数据),t-SNE表现更好。因为t-SNE主要是关注数据的局部结构。

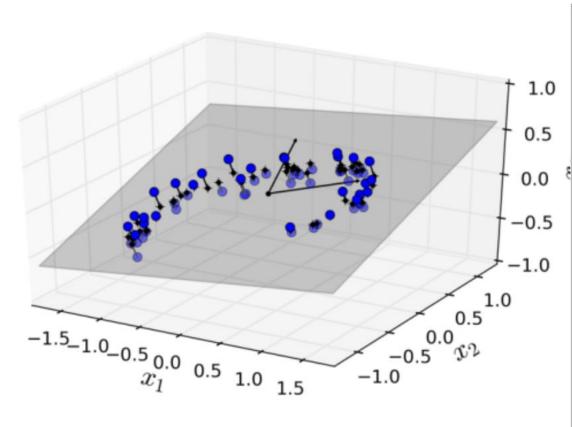
降维的优缺点

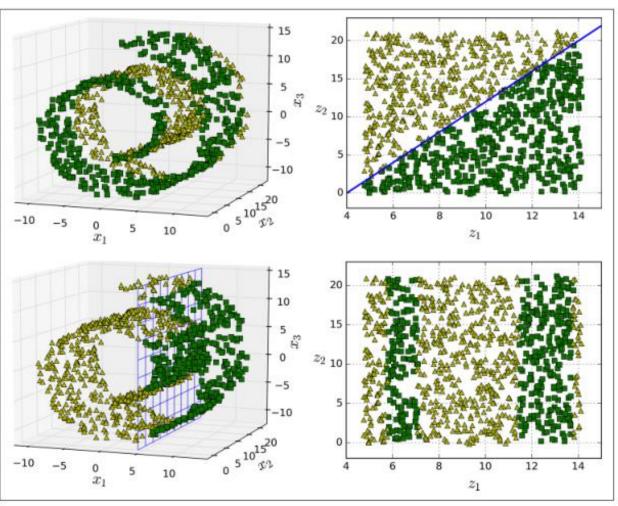
降维的优点:

- 通过减少特征的维数,数据集存储所需的空间也相应减少,减少了特征维数所需的计算 训练时间;
- 数据集特征的降维有助于快速可视化数据;
- 通过处理多重共线性消除冗余特征。

降维的缺点:

- 由于降维可能会丢失一些数据;
- 在主成分分析(PCA)降维技术中,有时需要考虑多少主成分是难以确定的,往往使用经验 法则





- 01 降维概述
- 02 SVD(奇异值分解)
- 03 PCA(主成分分析)

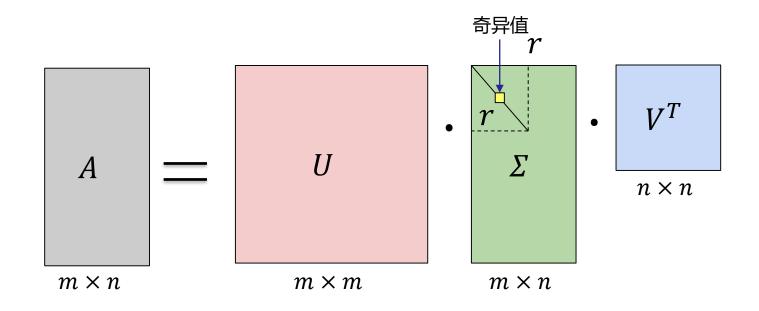
奇异值分解 (Singular Value Decomposition,以下简称 SVD)是在机器学习领域广泛应用的算法,它不光可以用于降维算法中的特征分解,还可以用于推荐系统,以及自然语言处理等领域。是很多机器学习算法的基石。

SVD可以将一个矩阵 A分解为三个矩阵的乘积:

- 一个正交矩阵 U(orthogonal matrix),
- 一个对角矩阵 Σ (diagonal matrix),
- 一个正交矩阵V的转置。

假设矩阵 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵,通过SVD是对矩阵进行分解,那么我们定义矩阵 A 的 SVD 为:

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



符号定义

$$A = U\Sigma V^T = u_1\sigma_1v_1^T + \dots + u_r\sigma_rv_r^T$$

其中U是一个 $m \times m$ 的矩阵,每个特征向量 u_i 叫做A的左奇异向量。

 Σ 是一个 $m \times n$ 的矩阵,除了主对角线上的元素以外全为 0,主对角线上的每个元素都称为奇异值 σ 。

V是一个 $n \times n$ 的矩阵,每个特征向量 v_i 叫做 A 的右奇异向量。

U 和 V都是酉矩阵,即满足: $U^TU = I, V^TV = I$ 。

r为矩阵A的秩(rank)。

SVD求解 U矩阵求解

方阵 AA^T 为 $m \times m$ 的一个方阵,那么我们就可以进行特征分解,得到的特征值和特征向量满足下式:

$$(AA^T)u_i = \lambda_i u_i$$

可以得到矩阵 AA^T 的 m 个特征值和对应的 m个特征向量u了。

SVD求解 U矩阵求解

将 AA^T 的所有特征向量组成一个 $m \times m$ 的矩阵U, 就是我们 SVD 公式里面的 U 矩阵了。

一般我们将U中的每个特征向量叫做A 的左奇异向量。

注意: $AA^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U(\Sigma \Sigma^T)U^T$

上式证明使用了 $V^TV = I, \Sigma^T = \Sigma$ 。可以看出的 AA^T 特征向量组成的矩阵就是我们 SVD 中的 U 矩阵。

V矩阵求解

如果我们将 A 的转置和 A 做矩阵乘法,那么会得到 $n \times n$ 的一个方阵 A^TA 。既然 A^TA 是方阵,那么我们就可以进行特征分解,得到的特征值和 特征向量满足下式:

$$(A^T A) v_i = \lambda_i v_i$$

2.V矩阵求解

这样我们就可以得到矩阵 A^TA 的 n个特征值和对应的n个特征向量v了。 将 A^TA 的所有特征向量组成一个 $n \times n$ 的矩阵V,就是我们 SVD 公式里面的 V 矩阵了。一般我们将 V中的每个特征向量叫做 A 的右奇异向量。

注意: 由于 $A^T A = (U\Sigma V^T)^T (U\Sigma V^T) = V(\Sigma^T \Sigma) V^T$

上式证明使用了 $U^TU=I, \Sigma^T=\Sigma$ 。可以看出 A^TA 的特征向量组成的矩阵就是我们 SVD 中的 V 矩阵。

Σ 矩阵求解

进一步我们还可以看出我们的特征值矩阵等于奇异值矩阵的平方,也就

是说特征值和奇异值满足如下关系: $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$

这样也就是说,我们可以不用 $\sigma_i = \frac{Av_i}{u_i}$ 来计算奇异值,也可以通过求出 A^TA 的特征值取平方根来求奇异值。

3.2 矩阵求解

由于奇异值矩阵 Σ 除了对角线上是奇异值,而其他位置都是 0,那我们只需要求出每个奇异值 σ 就可以了。

我们注意到:

 $A = U\Sigma V^T$, \mathbb{I} : $AV = U\Sigma V^T V$

由于: $V^TV = I$, 则: $AV = U\Sigma$

得到: $Av_i = \sigma_i u_i$, $\sigma_i = Av_i/u_i$

这样我们可以求出我们的每个奇异值,进而求出奇异值矩阵 Σ 。

SVD计算案例

设矩阵
$$A$$
定义为: $A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$ 则 A 的秩 $r = 2$ 。

$$A^T A = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 & 20 \\ 20 & 25 \end{bmatrix}$$

$$AA^{T} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 12 \\ 12 & 41 \end{bmatrix}$$

两者都有相同的迹,都是50。

SVD计算案例

 $A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$

进而求出 A^TA 的特征值和特征向量:

$$\begin{vmatrix} 25 - \lambda & 20 \\ 20 & 25 - \lambda \end{vmatrix} = (25 - \lambda)^2 - 400 = (\lambda - 45)(\lambda - 5) = 0$$

求解得到特征值: $\lambda_1 = 45$, $\lambda_2 = 5$

由
$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$$
,可以得到奇异值为: $\sigma_1 = \sqrt{45}$, $\sigma_2 = \sqrt{5}$

接着求出 AAT的特征值和特征向量:

同理求得: $\lambda_1 = 45$, $\lambda_2 = 5$

$$v_1 = egin{bmatrix} rac{1}{\sqrt{2}} \\ rac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$
, $v_2 = egin{bmatrix} -rac{1}{\sqrt{2}} \\ rac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$

利用 $Av_i = \sigma_i u_i, i = 1,2$,求奇异值:

$$Av_{1} = \begin{bmatrix} \frac{3}{\sqrt{2}} \\ \frac{9}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{45} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} \end{bmatrix} = \sigma_{1}u_{1}, \quad Av_{2} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{5} \begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} \end{bmatrix} = \sigma_{2}u_{2}$$

最终得到 A 的奇异值分解为:

$$U = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \end{bmatrix}, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sqrt{45} & 0 \\ 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$A = U\Sigma V^{T} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{45} & 0 \\ 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}^{T} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$

同理:

$$A = U\Sigma V^T = \sigma_1 u_1 v_1^T + \sigma_2 u_2 v_2^T + \dots + \sigma_r u_r v_r^T$$

SVD分解可以将一个矩阵进行分解,对角矩阵对角线上的特征值递减存放,而且奇异值的减少特别的快,在很多情况下,前 10%甚至 1%的奇异值的和就占了全部的奇异值之和的 99%以上的比例。

也就是说,对于奇异值,它跟我们特征分解中的特征值类似,我们也可以用最大的 k 个的奇异值和对应的左右奇异向量来近似描述矩阵。

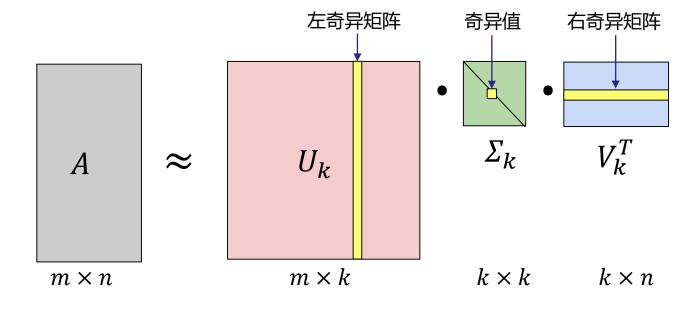
也就是说:

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} \Sigma_{m \times n} V_{n \times n}^T \approx U_{m \times k} \Sigma_{k \times k} V_{k \times n}^T$$

其中 k 要比 n小很多,也就是一个大的矩阵A可以用三个小的矩阵 $U_{m \times k}$, $\sum_{k \times k}$, $V_{k \times n}^T$ 来表示。

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} \Sigma_{m \times n} V_{n \times n}^T \approx U_{m \times k} \Sigma_{k \times k} V_{k \times n}^T$$

如图所示,现在我们的矩阵A 只需要黄色的部分的三个小矩阵就可以近似描述了。



SVD案例



原始图像

m = 575, n = 1081, k = 150

原始维度A = 575 × 1081 × 3 = 1864725



处理后的图像

设k = 150,则经过SVD分解后的矩阵及维度:

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

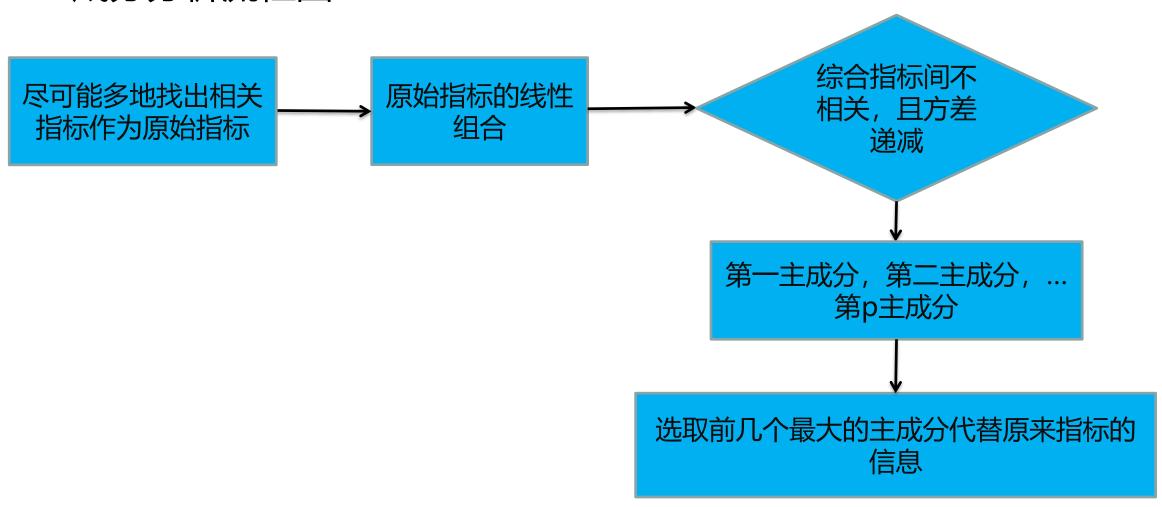
则原始图像经过压缩后的维度: $3 \times (575 \times 150 + 150 \times 150 + 1081 \times 150) = 812700$

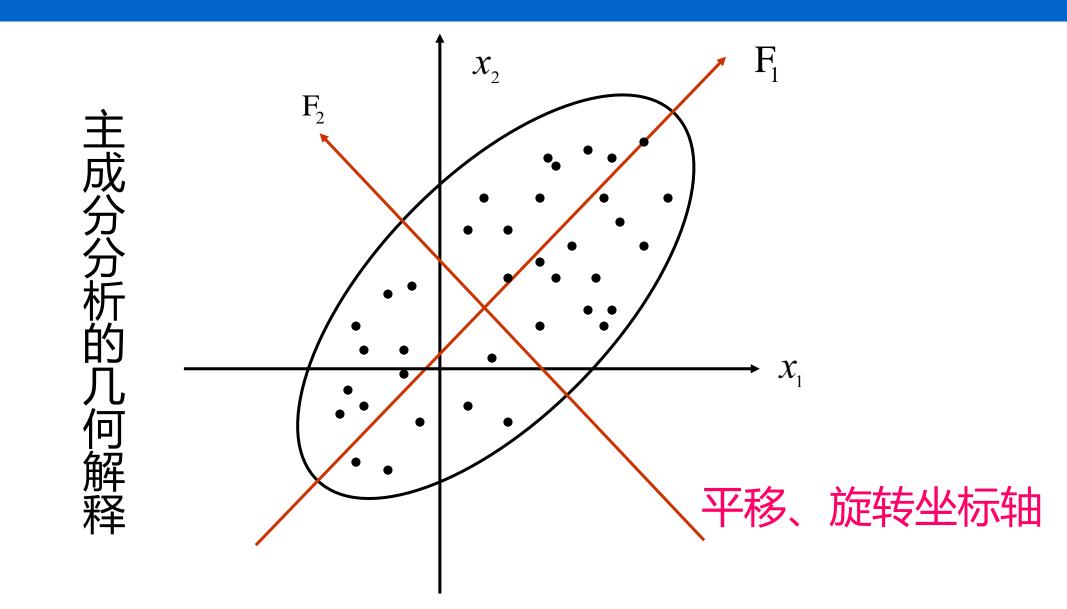
- 01 降维概述
- 02 SVD(奇异值分解)
- 03 PCA(主成分分析)

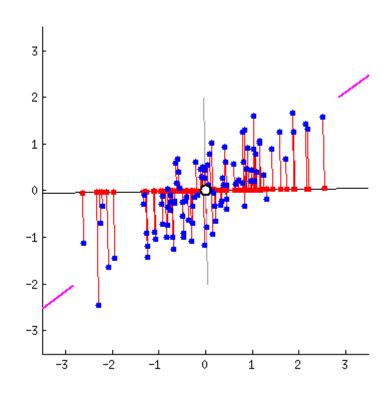
主成分分析 (Principal Component Analysis,PCA) 是一种降维方法,通过将一个大的特征集转换成一个较小的特征集,这个特征集仍然包含了原始数据中的大部分信息,从而降低了原始数据的维数。

减少一个数据集的特征数量自然是以牺牲准确性为代价的,但降维的诀窍是用一点准确性换取简单性。因为更小的数据集更容易探索和可视化,并且对于机器学习算法来说,分析数据会更快、更容易,而不需要处理额外的特征。

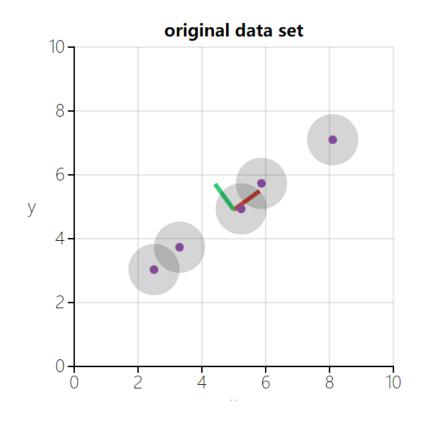
主成分分析流程图:

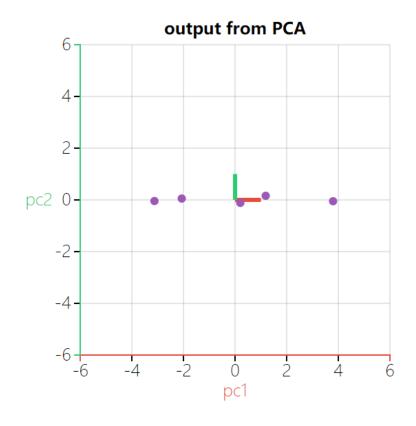






PCA的思想很简单——减少数据集的特征数量,同时尽可能地保留信息。





通过平移、旋转坐标轴,找到主成分pc1和pc2

PCA识别在训练集中占最大方差量的轴。

在图1中,它是实线。它还找到与第一个轴正交的第二个轴,它考虑了剩余方差的最大量。在这个2D示例中,没有选择:它是虚线。如果它是一个更高维的数据集,PCA还会找到与前两个轴正交的第三个轴,以及第四个,第五个等等-与数据集中的维数一样多的轴。

定义第i轴的单位向量称为第i个主成分(PC)。

- 在图1中,第一个 **PC**为 c_1 ,第二个 **PC** 为 c_2 。
- 在图2中,前两个 **PC**由平面中的正交箭头表示,第三个 PC与平面正交(向上或向下)。

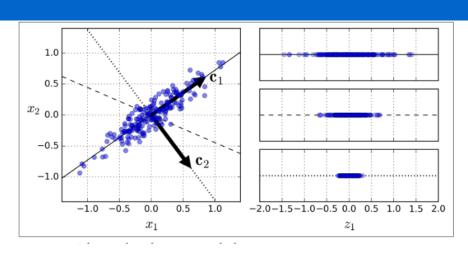
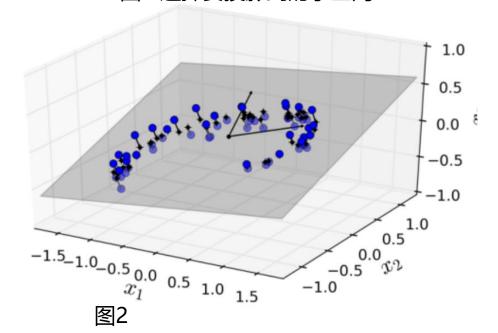


图1选择要投影到的子空间



如何得到这些包含最大差异性的主成分方向呢?

通过计算数据矩阵的协方差矩阵

然后得到协方差矩阵的特征值特征向量

选择特征值最大(即方差最大)的k个特征所对应的特征向量组成的矩阵。

这样就可以将数据矩阵转换到新的空间当中,实现数据特征的降维。

PCA的算法两种实现方 法

- (1) 基于SVD分解协方差矩阵实现PCA算法
- (2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

(1)基于SVD分解协方差矩阵实现PCA算法

PCA 减少n维到k维:

设有m条n维数据,将原始数据按列组成n行m列矩阵X

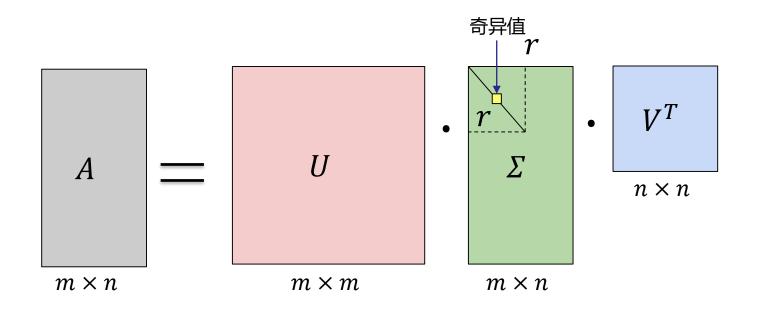
第一步是均值归一化。我们需要计算出所有特征的均值,然后令 $x_j = x_j - \mu_j$ 。(μ_j 为均值)。如果特征是在不同的数量级上,我们还需要将其除以标准差 σ^2 。

第二步是计算**协方差矩阵**(covariance matrix) Σ :

$$\sum = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} \right) \left(x^{(i)} \right)^{T}$$

第三步是计算协方差矩阵 Σ 的**特征向量**(eigenvectors),可以利用奇异值分解(SVD)来求解。

奇异值分解 (SVD) 的标准矩阵分解技术可以将训练集矩阵 A 分解为**三个 矩阵** $U \cdot \Sigma \cdot V^T$ **的点积**,其中 V^T 包含我们正在寻找的所有主成分。



(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

背景知识

1) 特征值与特征向量

如果一个向量v是矩阵A的特征向量,将一定可以表示成下面的形式:

$$Av = \lambda v$$

其中, λ 是特征向量A对应的特征值,一个矩阵的一组特征向量是一组正交向量。

- (2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法
- 2) 特征值分解矩阵

对于矩阵A ,有一组特征向量v ,将这组向量进行正交化单位化,就能得到一组正交单位向量。特征值分解,就是将矩阵A分解为如下式:

$$A = P\Sigma P^{-1}$$

其中,P是矩阵A的特征向量组成的矩阵, Σ 则是一个对角阵,对角线上的元素就是特征值。

备注:对于正交矩阵P,有 $P^{-1} = P^{T}$

(2) 基于特征值分解协方差矩阵实现PCA算法

设有m条n维数据,将原始数据按列组成n行m列矩阵X

- 1)均值归一化。我们需要计算出所有特征的均值,然后令 $x_j = x_j \mu_j$ 。(μ_j 为均值)。如果特征是在不同的数量级上,我们还需要将其除以标准差 σ^2 。
- 2) 计算协方差矩阵 Σ 。 $\Sigma = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{n} (x^{(i)}) (x^{(i)})^T$
- 3) 用特征值分解方法计算协方差矩阵Σ的特征值和特征向量。
- 4) 对特征值从大到小排序,选择其中最大的k个。然后将其对应的k个特征向量分别作为行向量组成特征向量矩阵P。
- 5)将数据转换到k个特征向量构建的新空间中,即 Y = PX。

PCA的算法案例

$$X = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

以这个为例,我们用PCA的方法将这组二维数据降到一维

因为这个矩阵的每行已经是零均值,所以我们可以直接求协方差矩阵:

$$\Sigma = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ -1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{6}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{6}{5} \end{pmatrix}$$

然后求∑的特征值和特征向量:

$$|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} \frac{6}{5} - \lambda & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{6}{5} - \lambda \end{vmatrix} = (\frac{6}{5} - \lambda)^2 - \frac{16}{25} = (\lambda - 2)(\lambda - 2/5) = 0$$

求解得到特征值: $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = 2/5$

其对应的特征向量分别是: $\Sigma_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\Sigma_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$

由于对应的特征向量分别是一个通解, \sum_1 和 \sum_2 可取任意实数。那么标准化后的特征向量为:

$$\binom{1/\sqrt{2}}{1/\sqrt{2}}$$
, $\binom{-1/\sqrt{2}}{1/\sqrt{2}}$

因此我们的矩阵P是:

$$P = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

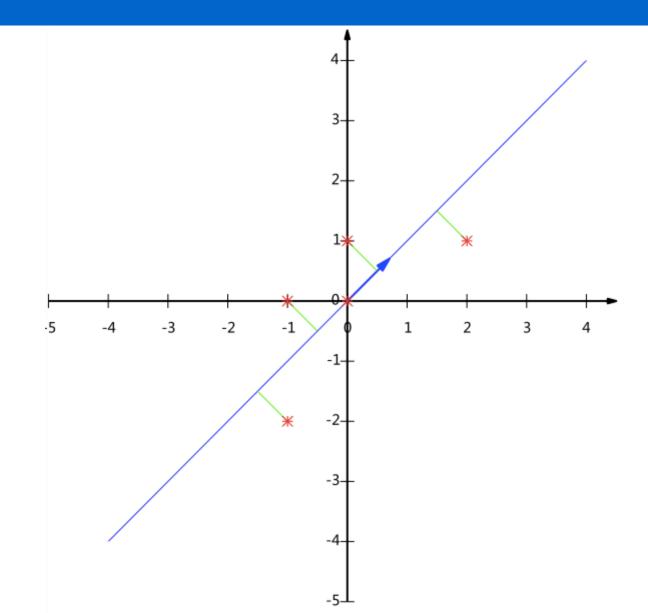
可以验证协方差矩阵∑的对角化

$$P\Sigma P^{T} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6/5 & 4/5 \\ 4/5 & 6/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2/5 \end{pmatrix}$$

最后我们用P的第一行乘以数据矩阵,就得到了降维后的数据表示:

$$Y = (1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 & 3/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

降维后的投影结果如下图:



PCA算法优点

- 1.仅仅需要以方差衡量信息量,不受数据集以外的因素影响
- 2.各主成分之间正交,可消除原始数据成分间的相互影响的因素
- 3.计算方法简单,主要运算时特征值分解,易于实现
- 4.它是无监督学习,完全无参数限制的

PCA算法缺点

- 1.主成分各个特征维度的含义具有一定的模糊性,不如原始样本特征的解释性强
- 2.方差小的非主成分也可能含有对样本差异的重要信息,因降维丢弃可能对后续数据处理有影响

参考文献

- [1] Andrew Ng. Machine Learning[EB/OL]. Stanford University,2014. https://www.coursera.org/course/ml
- [2] Hinton, G, E, et al. Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks.[J]. Science, 2006.
- [3] Jolliffe I T. Principal Component Analysis[J]. Journal of Marketing Research, 2002, 87(4):513.
- [4] 李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社,2019.
- [5] Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning[M]. Springer, New York, NY, 2001.
- [6] Peter Harrington.机器学习实战[M]. 人民邮电出版社,2013.