机器学习 Machine learning

第七章 降维与特征选择 Feature Reduction & Selection

授课人: 周晓飞 zhouxiaofei@iie.ac.cn 2022-11-11

第七章 降维与特征选择

- 7.1 概述
- 7.2 特征选择
- 7.3 特征提取

特征提取问题

特征变换:

$$y=W(x)$$

x: D维→y: d维; D>>d

优点:

- 数据更紧致的压缩
- 优化预测性能
- 加快学习速度

应用领域广:模式识别、图像处理、信号处理、数据压缩、微波、雷达、...

特征提取问题

不同的应用问题会有不同的特征提取研究问题:

例如:

图像: SIFT 特征、纹理特征

微波: 频段、多普勒

文本: 情感极性特征、依存关系

语音: 音色、饱和度、爆破音

. . .

本讲从数据压缩表示和机器学习数据处理的角度

特征提取问题

本章讲授的特征提取方法

・线性变换

方法 1: 主成分分析 (PCA)

方法 2: 线性鉴别分析 (LDA)

・非线性变换

方法 3: 核方法的特征提取 KPCA、KFDA

方法 4: 流行学习

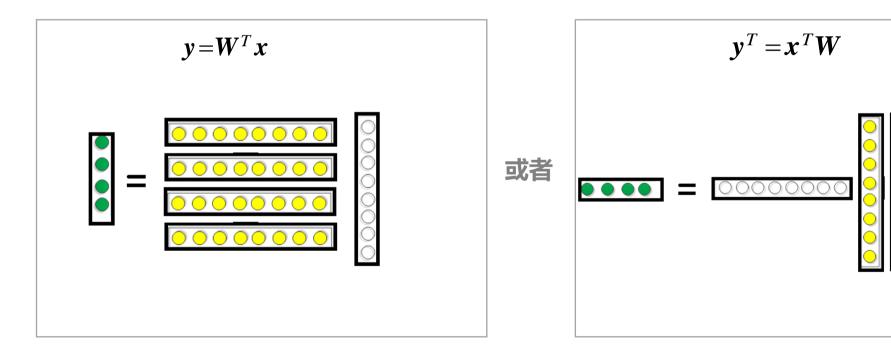
方法 5: 非负矩阵分解

线性变换

线性变换的直观表示:

Chapter 7 Feature Reduction & Selection

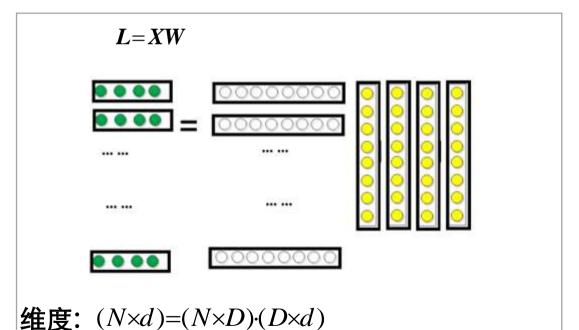
(x, y, w 为列向量)_, W是 $D \times d$ 维 $W = (w_1, w_2, ..., w_d)$



线性变换

特征提取目标:学习变换矩阵

给定 $X = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$,通过某种降维准则,学习变换矩阵 $W = (w_1, w_2, ..., w_d)$ 。



 $W \neq d$ 个基向量,向量x 被映射到基向量线性张成的子空间内。

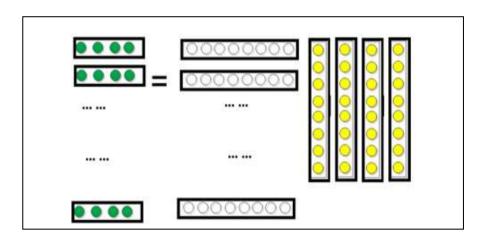
线性变换

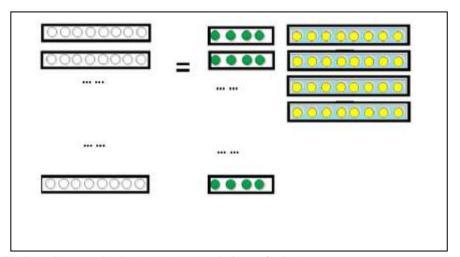
常见的两种降维表示途径:

• 投影: *L=XW*

• 矩阵分解: 低秩表示X=LR

思考 1:矩阵分解 X = LR 的等号一定存在吗?

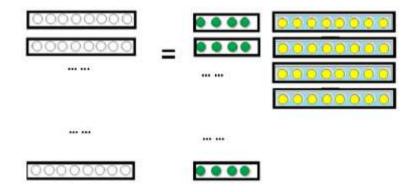




线性变换

思考 1:矩阵分解 X = LR 的等号一定存在吗?

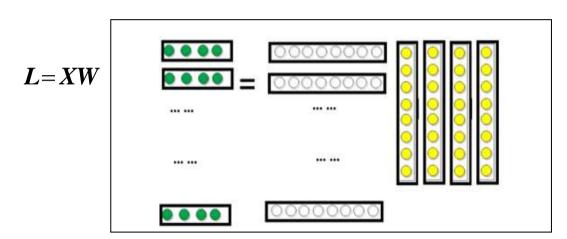
至少要 rank(X)=rank(L)=rank(R)

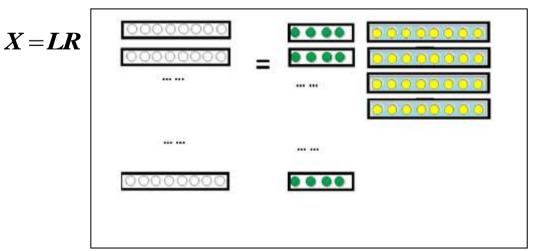


线性变换

思考 2: 如果X=LR成立,

两种低维表示 L 什么情况等价?

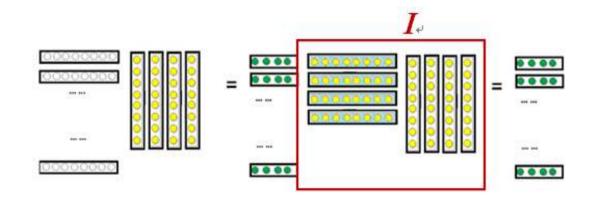




线性变换

如果X=LR成立,式子两边同时右乘W:XW=LRW

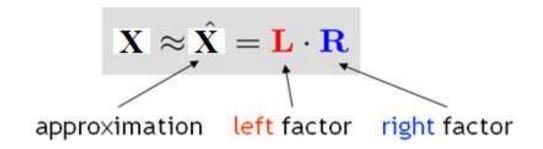
当 R 行满秩、W 列满秩,且当RW=I (即 $W=R^{-1}$)时,L=XW.



此时,两个式子的低维表示L等价。

线性变换

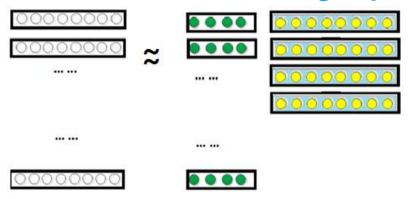
无损压缩时为等号;通常会有损降维:



主分量分析(PCA)

PCA 降维表示:

Pattern ≈ low-dimensional representation * eigen patterns

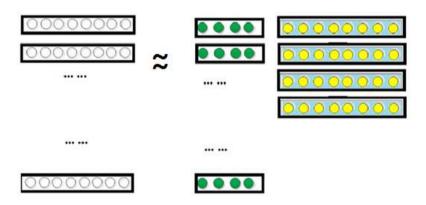


目标: 学习 eigen pattern

主分量分析(PCA)

目标函数:均方误差最小原则(求最优重构子空间)

$$\min_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{R}} \|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{R}\|^2 \qquad \text{s.t. } \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^T = \boldsymbol{I}$$



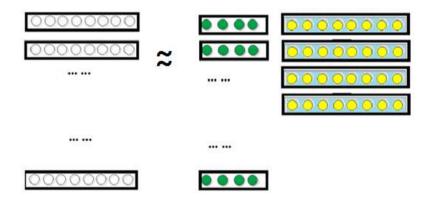
主分量分析(PCA)

目标函数:均方误差最小原则(求最优重构子空间)

$$\min_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{R}} \|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{R}\|^2 \qquad \text{s.t. } \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^T = \boldsymbol{I}$$

如果将因子 R 由投影 W 表示,

$$RW = I$$
, $RR^T = I$ \Longrightarrow $R = W^T$



主分量分析(PCA)

目标函数:均方误差最小原则(求最优重构子空间)

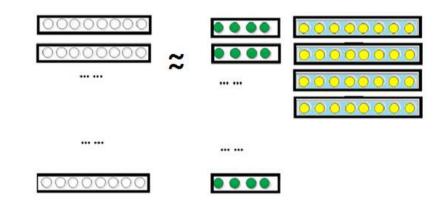
$$\min_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{R}} \|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{R}\|^2 \qquad \text{s.t. } \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^T = \boldsymbol{I}$$

如果将因子R 由投影W 表示,

$$RW=I$$
 , $RR^T=I$ \Longrightarrow $R=W^T$ 推导 $RW=I$,

$$W=R^*$$
(右伪逆)= $R^T(RR^T)^{-1}$

$$W = R^T$$



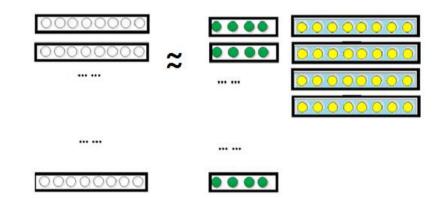
投影向量关系: $RR^T = I$, 则 $W^TW = I$, $R = W^T$

主分量分析(PCA)

重写目标函数

$$\min_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{W}} \left\| \boldsymbol{X} - \boldsymbol{L} \boldsymbol{W}^T \right\|^2 \qquad \text{s.t. } \boldsymbol{W}^T \boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}$$

$$\left\| \boldsymbol{X} - \boldsymbol{L} \boldsymbol{W}^T \right\|^2 = \sum_{i} \left\| \boldsymbol{x}_i^T - \boldsymbol{l}_i^T \boldsymbol{W}^T \right\|^2$$



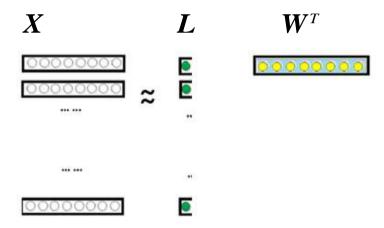
求解该优化问题,可以先固定W,

求出L关于W和X的表示,将该问题转化为只与W相关的优化问题。

主分量分析(PCA)

如何理解重构?

一个投影方向情况:

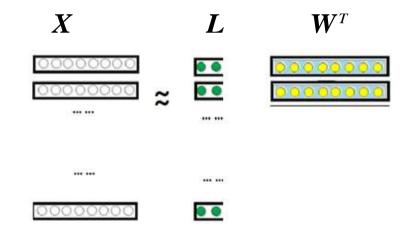


$$\|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{L} \boldsymbol{W}^T\|^2 = \sum_{i} \|\boldsymbol{x}_i^T - \boldsymbol{l}_i^T \boldsymbol{W}^T\|^2$$

主分量分析(PCA)

如何理解重构?

2个投影方向情况:

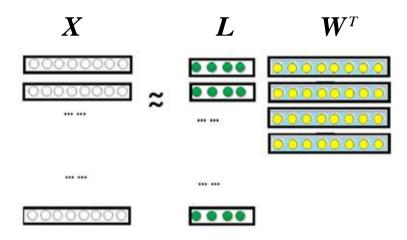


$$\left\| \boldsymbol{X} - \boldsymbol{L} \boldsymbol{W}^T \right\|^2 = \sum_{i} \left\| \boldsymbol{x}_i^T - \boldsymbol{l}_i^T \boldsymbol{W}^T \right\|^2$$

主分量分析(PCA)

如何理解重构?

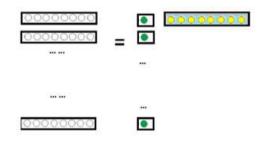
多个投影方向情况:



$$\left\| \boldsymbol{X} - \boldsymbol{L} \boldsymbol{W}^T \right\|^2 = \sum_{i} \left\| \boldsymbol{x}_i^T - \boldsymbol{l}_i^T \boldsymbol{W}^T \right\|^2$$

主分量分析(PCA)

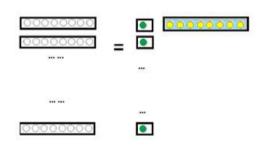
一般性讨论一个投影方向情况:



$$\sum_{i} \left\| \boldsymbol{x}_{i}^{T} - \boldsymbol{l}_{i}^{T} \boldsymbol{W}^{T} \right\|^{2}$$

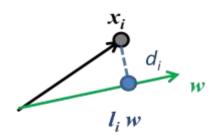
主分量分析(PCA)

一般性讨论一个投影方向情况:



$$\sum_{i} \left\| \boldsymbol{x}_{i}^{T} - \boldsymbol{l}_{i}^{T} \boldsymbol{W}^{T} \right\|^{2}$$

当固定w时,每个样本 $l_i = x_i^T w$ 时,重构误差 $\|x_i^T - l_i w^T\|^2$ 最小,



(几何比较直观,该结论也可以通过求解 $\min_{l_i} \| \boldsymbol{x}_i^T - l_i \boldsymbol{w}^T \|^2$)

主分量分析(PCA)

目标函数的等价形式:

$$\min_{L,w} \sum_{i} \|\boldsymbol{x}_{i}^{T} - \boldsymbol{l}_{i} \boldsymbol{w}^{T}\|^{2} = \min_{w} \sum_{i} d_{i}^{2}$$

$$= \min_{w} \sum_{i} (\|\boldsymbol{x}\|^{2} - \|\boldsymbol{l}_{i} \boldsymbol{w}^{T}\|^{2}) = \max_{w} \sum_{i} \|\boldsymbol{l}_{i} \boldsymbol{w}^{T}\|^{2}$$

$$= \max_{w} \sum_{i} l^{2} \|\boldsymbol{w}\|^{2}$$

$$= \max_{w} \sum_{i} l^{2}$$

$$= \max_{w} \sum_{i} \boldsymbol{w}^{T} \boldsymbol{x}_{i} \boldsymbol{x}_{i}^{T} \boldsymbol{w} \qquad \Rightarrow \qquad \max_{w} \sum_{i} \|\boldsymbol{w}^{T} \boldsymbol{x}_{i}\|^{2}$$

$$= \max_{w} \boldsymbol{w}^{T} (\sum_{i} \boldsymbol{x}_{i} \boldsymbol{x}_{i}^{T}) \boldsymbol{w}$$

主分量分析(PCA)

目标函数的等价形式:

$$\min_{L,w} \sum_{i} \|\boldsymbol{x}_{i}^{T} - l_{i}\boldsymbol{w}^{T}\|^{2} = \min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} d_{i}^{2}$$

$$= \min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} (\|\boldsymbol{x}\|^{2} - \|l_{i}\boldsymbol{w}^{T}\|^{2}) = \max_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} \|l_{i}\boldsymbol{w}^{T}\|^{2}$$

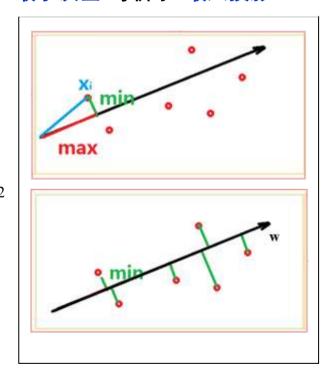
$$= \max_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} l^{2} \|\boldsymbol{w}\|^{2}$$

$$= \max_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} l^{2}$$

$$= \max_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} \boldsymbol{w}^{T} \boldsymbol{x}_{i} \boldsymbol{x}_{i}^{T} \boldsymbol{w} \qquad \Rightarrow \qquad \max_{\boldsymbol{w}} \sum_{i} \|\boldsymbol{w}^{T} \boldsymbol{x}_{i}\|^{2}$$

$$= \max_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{w}^{T} (\sum_{i} \boldsymbol{x}_{i} \boldsymbol{x}_{i}^{T}) \boldsymbol{w}$$

最小误差 等价于 最大投影



主分量分析(PCA)

求解目标函数:

$$\max_{\mathbf{w}} \mathbf{w}^T \mathbf{S} \mathbf{w}$$

其中,
$$w^T w = 1$$
, $S = E[xx^T] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} x_i x_i^T = \frac{1}{n} X^T X$

• Lagrange 函数:

$$L = -\mathbf{w}^{T} \mathbf{S} \mathbf{w} + \lambda (\mathbf{w}^{T} \mathbf{w} - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (\mathbf{S} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{w} = 0$$

• 等价于求 S 的特征值和对应的特征向量:

$$Sw = \lambda w$$

主分量分析(PCA)

特征值对应目标函数值,最大特征值对应特征向量为最优方向:

$$Sw = \lambda w$$
 \Rightarrow $w^T Sw = \lambda$

目标函数

$$\max_{\mathbf{w}} \mathbf{w}^T \mathbf{S} \mathbf{w}$$

主分量分析(PCA)

5的特征值分解

$$Sw_j = \lambda w_j, j = 1,2,...m$$
,相应的特征值: $\lambda_1 > \lambda_2 > ... > \lambda_j > ... > \lambda_m$,特征向量: $W = [w_1, w_2,...w_j,...w_m]$

• SW=WA, 其中 $A=diag[\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_j,...,\lambda_m]$,

$$\boldsymbol{W}^T \boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}$$
, $\boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{w}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$, $\boldsymbol{W}^T = \boldsymbol{W}^{-1}$

主分量分析(PCA)

5的特征值分解

$$Sw_j = \lambda w_j, j = 1,2,...m$$
,相应的特征值: $\lambda_1 > \lambda_2 > ... > \lambda_j > ... > \lambda_m$,特征向量: $W = [w_1, w_2,...w_j,...w_m]$

• SW=WA, 其中 $A=diag[\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_j,...,\lambda_m]$,

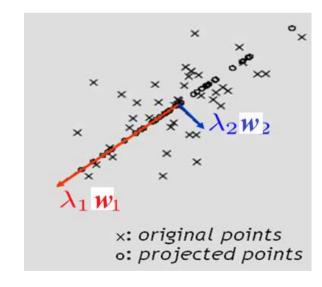
$$\boldsymbol{W}^T \boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}$$
, $\boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{w}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$, $\boldsymbol{W}^T = \boldsymbol{W}^{-1}$

•
$$\mathbf{W}^T \mathbf{S} \mathbf{W} = \mathbf{\Lambda}$$
, $\mathbf{w}_i^T \mathbf{S} \mathbf{w}_j = \begin{cases} \lambda_j, & i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$

主分量分析(PCA)

注意问题

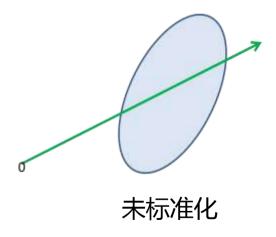
- $S=(1/N)X^TX$, (1/N) 可以省略
- 特征值的意义: 样本在 w 方向的投影平均值(或和)最大.

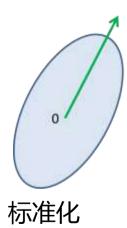


主分量分析(PCA)

标准化样本

$$x_i = x_i - \overline{x}$$
, $\overline{x} = (1/n) \sum_i x_i$



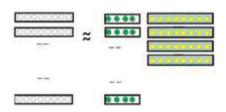


主分量分析(PCA)

注意:特征方向也是特征模式(特征因子 R)

Pattern ≈ low-dimensional representation * eigen patterns

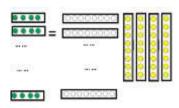
• 矩阵分解: *X=LR*



 $\qquad \qquad \Box \rangle$

特征因子R就是 投影方向的转置 $R=W^T$

• 投影: *L=XW*



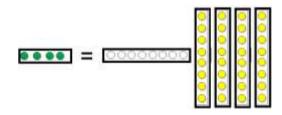
主分量分析(PCA)

数据的变换、降维、主成分:

$$\mathbf{y}^{T} = [y_1, y_2, ..., y_m]$$

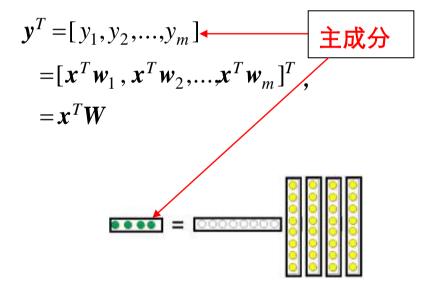
$$= [\mathbf{x}^{T} \mathbf{w}_1, \mathbf{x}^{T} \mathbf{w}_2, ..., \mathbf{x}^{T} \mathbf{w}_m]^{T},$$

$$= \mathbf{x}^{T} \mathbf{W}$$



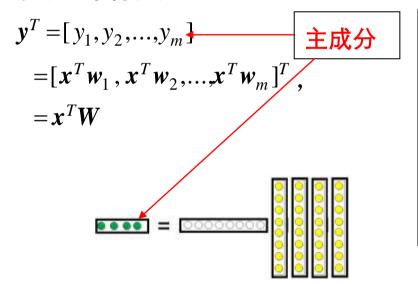
主分量分析(PCA)

数据的变换、降维、主成分:



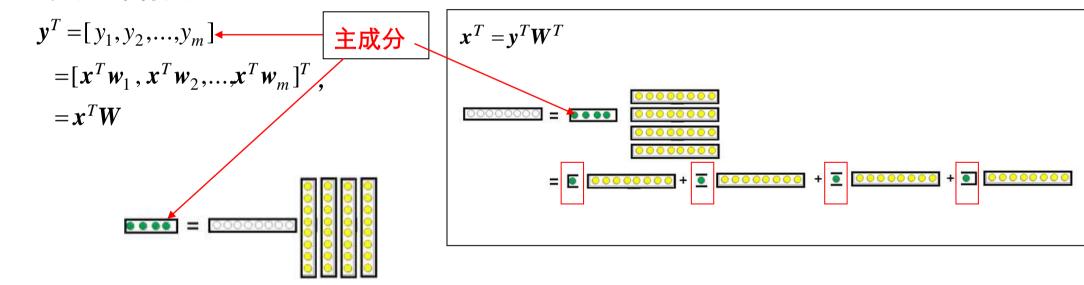
主分量分析(PCA)

数据的变换、降维、主成分:



主分量分析(PCA)

数据的变换、降维、主成分:



主分量分析(PCA)

PCA 算法流程

(1) 标准化样本

$$x_i = x_i - \overline{x}$$
, $\overline{x} = (1/n) \sum_i x_i$

- (2) 求样本的协方差矩阵 XX^T 特征值,并降排序 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$,对应非零特征向量: w_1, w_2, \dots, w_m ,
- (4) 变换矩阵

Case 1: 无损压缩 $W = (w_1, w_2, ..., w_m)$

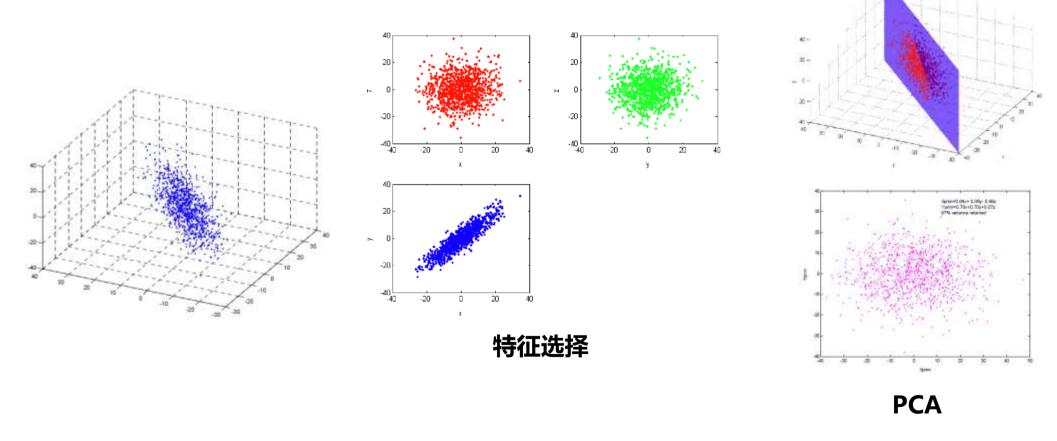
Case 2: 有损压缩 $W = (w_1, w_2, ..., w_l), l < m$

(5) 降维表示

训练样本: L=XW 新样本标准化后,降维表示: $y^T=x^TW$

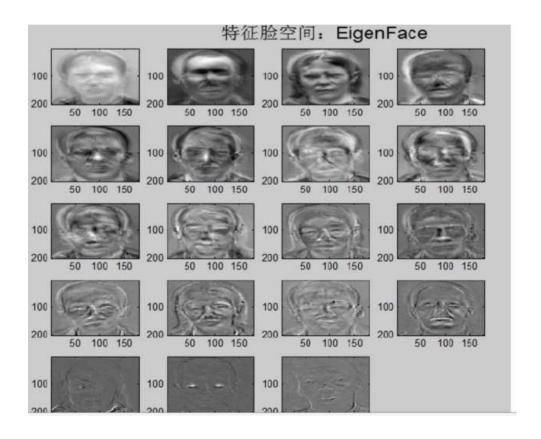
主分量分析(PCA)

Chapter 7 Feature Reduction & Selection



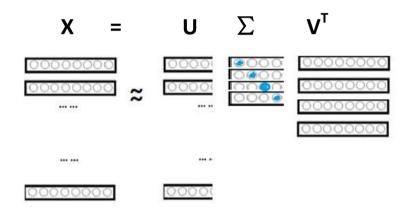
主分量分析(PCA)

人脸识别例子



主分量分析(PCA)

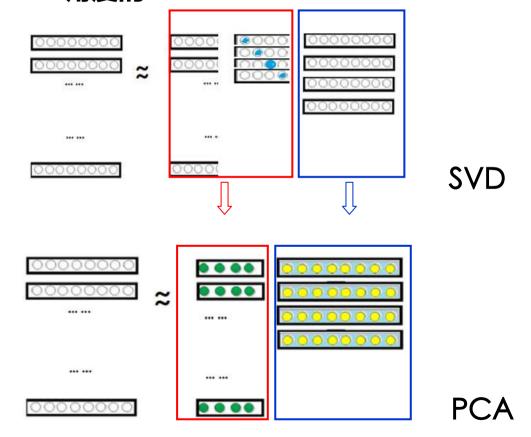
SVD 角度的 PCA:



 X^TX 与 XX^T 特征值分解,具有相同的非零特征值 $\{\lambda_i\}$, X^TX 的特征向量构成矩阵 V^T , XX^T 的特征向量构成矩阵 U Σ 仅在对角线上有奇异值,奇异值与特征值的关系: $\sqrt{\lambda_i}$

主分量分析(PCA)

SVD 角度的 PCA:



线性鉴别分析(LDA)

线性鉴别分析的意义:

PCA 不能保证类别区分的有效性, LDA 特征的优点: 类内最小、类间最大。

线性鉴别准则(回顾第三章):

$$J_F(w) = \frac{w^T S_b w}{w^T S_w w}$$

注: 向量 w, x, m, y 都为列向量

线性鉴别分析(LDA)

特征方向的提取:

$$S_w^{-1}S_b w = \lambda w$$

 $w \in S_w^{-1} S_b$ 的特征向量

设矩阵 $S_w^{-1}S_b$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_D$

且
$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_D$$

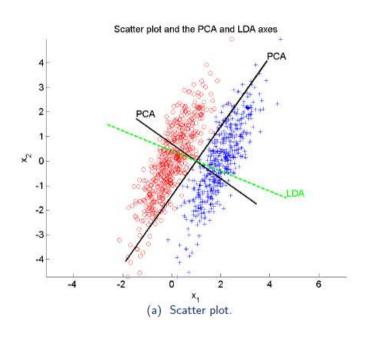
选前 d 个特征值对应的特征向量 $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_d$

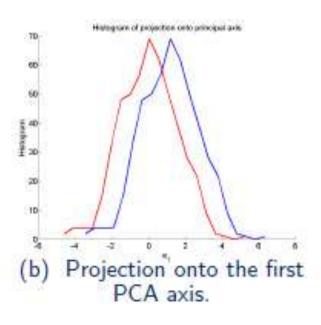
组成矩阵
$$W = [\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_d]$$

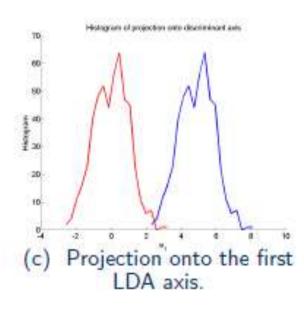
(对于多类可以提取多个特征,如果只有两类, S_b 的秩为1,每次只能提取一维特征)

线性鉴别分析(LDA)

LDA 与 PCA 的比较







核主成分分析(KPCA)

高维映射后的线性变换

高维映射: $x \in X \mapsto \phi(x) \in H$, $\phi(x)$ 为列向量

变换矩阵: $\Phi = (\phi(x_1), \phi(x_2), ..., \phi(x_n))$

线性变换: $L=W^T\Phi$, $W=(w_1,w_2,...,w_d)$

高维映射 $\phi(x)$? 线性变换 W^T ?

核主成分分析(KPCA)

高维空间的主成分分析

$$Sw = \lambda w \quad \Box \quad \Phi \Phi^{\mathrm{T}} \Phi \alpha = \lambda \Phi \alpha$$

如何可以引入核函数?

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \langle \phi(\boldsymbol{x}_i), \phi(\boldsymbol{x}_j) \rangle$$

核主成分分析(KPCA)

核函数引入到主成分分析

两边左乘
$$\Phi$$
: $\Phi^T\Phi\Phi^T\Phi\alpha = \lambda\Phi^T\Phi\alpha$ K K K K K

其中
$$K = \begin{pmatrix} k(x_1, x_1) k(x_1, x_2) & \dots & k(x_1, x_n) \\ k(x_2, x_1) k(x_2, x_2) & \dots & k(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ k(x_n, x_1) k(x_n, x_2) & \dots & k(x_n, x_n) \end{pmatrix}$$

核主成分分析(KPCA)

核主成分分析 KPCA 流程

- (1) 求核矩阵 K 的特征值,对应特征向量 α 的问题: $K\alpha = \lambda \alpha$
- (2) 核矩阵 K 的特征值降排序 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$,前 d 个特征值对应特征向量 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d$
- (3) 高维空间中的投影方向 $w_i = \Phi \alpha_i \Lambda = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_d)$,投影矩阵 $W = \Phi \Lambda$
- (4) 降维表示

训练集低维表示:

$$L = \Phi^T W = \Phi^T \Phi \Lambda = K \Lambda$$

新样本 x 的低维表示:

$$y = \phi(x)^{\mathrm{T}} \Phi \Lambda = K(x, X) \Lambda$$
,

其中 $K(x,X)=(k(x,x_1),k(x,x_2),...,k(x,x_n))$

局部线性变换(LLE)

基本思想:LLE 方法是一种流形学习[Saul 01],保持样本间的局部线性关系,

整体实现非线性映射。

局部线性结构:

每一个样本与近邻 k 个样本的局部线性关系

$$\underset{w}{\operatorname{argmin}} \ E_{w} = \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{x}_{i} - \sum_{j=1}^{k} w(i,j) \mathbf{x}_{ij} \right\|^{2}, \quad \sum_{j=1}^{k} w(i,j) = 1$$

计算降维数据

$$\arg \min_{Y} \inf nE_{Y} = \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{y}_{i} - \sum_{j=1}^{n} w(i, j) \mathbf{y}_{j} \right\|^{2}$$

局部线性变换(LLE)

算法流程:

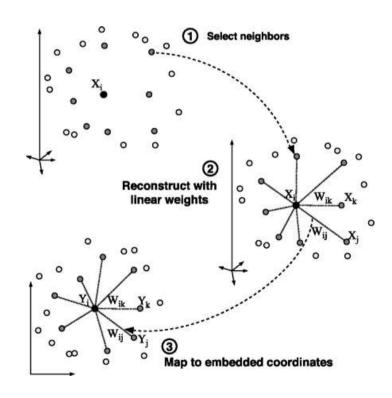
- (1) 对每个点 x_i , 收集它的最近邻 m 个实例;
- (2) 求局部线性的权值 W(i,j)

$$\underset{w}{\operatorname{argmin}} E_{w} = \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{x}_{i} - \sum_{j=1}^{k} w(i,j) \mathbf{x}_{ij} \right\|^{2}, \quad \sum_{j=1}^{k} w(i,j) = 1$$

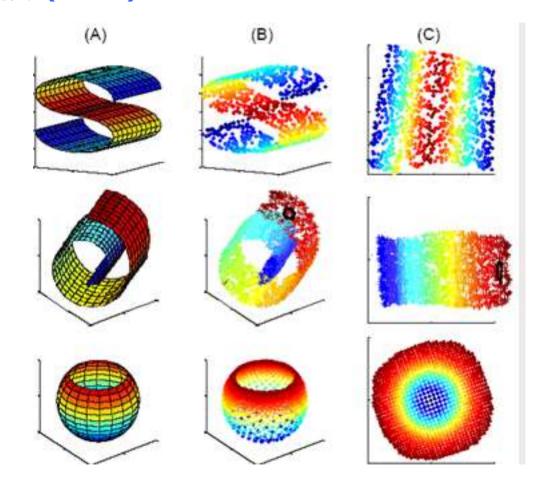
(3) 根据求得的权值,计算更新的实例

$$\underset{Y}{\operatorname{arg\,min}} \ E_{Y} = \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{y}_{i} - \sum_{j=1}^{n} w(i,j) \mathbf{y}_{j} \right\|^{2}$$

- Performing an eigendecomposition of the matrix $(I W)^T (I W)$.
- Discarding the eigenvector that corresponds to the smallest eigenvalue.
- Taking the eigenvectors that correspond to the next (lower) eigenvalues. These yield the low-dimensional outputs y_i , i = 1, 2, ..., n.



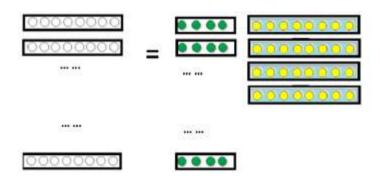
局部线性变换(LLE)



非负矩阵分解

基本思想:通过矩阵分解,进行数据降维;分解后的矩阵为非负矩阵

非负矩阵分解: $X = L \cdot R$



非负矩阵分解

不同的目标函数情况

(1) 范数误差最小

minimize
$$\|V - WH\|_F \equiv \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^n (V(i, j) + [WH](i, j))^2$$

subject to $W(i, k) \ge 0, H(k, j) \ge 0 \quad \forall i, k, j$

迭代规则

$$H_{au} \leftarrow H_{au} \frac{(W^{T}V)_{au}}{(W^{T}WH)_{au}}$$

$$W_{ia} \leftarrow W_{ia} \frac{(VH^{T})_{ia}}{(WHH^{T})_{ia}}$$

非负矩阵分解

不同的目标函数情况

(2) K-L 误差

minimize
$$\sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{n} \left(V(i,j) \ln \frac{V(i,j)}{[WH](i,j)} - V(i,j) + [WH](i,j) \right)$$
subject to $W(i,k) \ge 0, H(k,j) \ge 0 \quad \forall i,k,j$

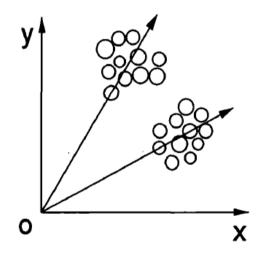
迭代规则

$$\begin{split} H_{au} \leftarrow H_{au} & \frac{\sum_{i} W_{ia} V_{iu} / (WH)_{iu}}{\sum_{k} W_{ka}} \\ W_{ia} \leftarrow W_{ia} & \frac{\sum_{u} W_{au} V_{iu} / (WH)_{iu}}{\sum_{i} H_{ai}} \end{split}$$

非负矩阵分解

几何直观

由非负矩阵分解得到的基向量:



小 结

- 1. 掌握特征选择的基本框架
- 2. 掌握三种特征选择方法 Filer, Wrapper, Embedded
- 3. 掌握经典的 PCA 特征提取方法;

中国科学院大学网安学院 2022-2023 学年研究生秋季课程

参考文献

- 1. 周志华,机器学习,清华大学出版社,2016.
- 2. Duda, R.O. et al. Pattern classification. 2nd, 2003.
- 3. 边肇祺,张学工等编著,模式识别(第二版),清华大学,1999。
- 4. Chris Bishop. Pattern recognition and Machine Learning. Springer, 2006. (PR&ML)