内容太多，请大家提前预习

第7章第2讲
特征提取与特征选择
Feature Extraction and Feature Selection

向 世 明

smxiang@nlpr.ia.ac.cn

https://people.ucas.ac.cn/~xiangshiming

时空数据分析与学习课题组(STDAL)

中科院自动化研究所 模式识别国家重点实验室

助教： 张明亮(zhangmingliang2018@ia.ac.cn)
程真(chengzhen2019@nlpr.ia.ac.cn)
张姣(zhangjiao2019@ia.ac.cn)

中国科学院大学 University of Chinese Academy of Sciences

7.7 多维缩放

- **多维缩放(Multiple Dimensional Scaling, MDS)**
  - 假定m维空中的n个样本$\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n\} \subset R^d$ 在原始空间的距离矩阵为$\mathbf{D} \in R^{n\times n}$
  - 其第i行j列的元素为样本$\mathbf{x}_i$到$\mathbf{x}_j$的距离，记为d_{ij}。
  - 目标：获得这n个样本在m ($m<d$) 维空间中的表示$\mathbf{Z}=[\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \ldots, \mathbf{z}_n] \in R^{m\times n}$ 。
  - 准则：假定降维后的样本仍保持两两之间的距离：

$$d_{ij}^2 = \|\mathbf{z}_i\|_2^2 + \|\mathbf{z}_j\|_2^2 - 2\mathbf{z}_i^T\mathbf{z}_j = b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij}$$

where $b_{ij} = \mathbf{z}_i^T\mathbf{z}_j, \quad i, j = 1, 2 \cdots, n$

7.7 多维缩放

- **MDS**
  - 不失一般性，令降维后的样本是零均值化（零中心化）的，即

$$\sum_{i=1}^{n} \mathbf{z}_i = \mathbf{0} \in R^d$$

  - 令$\mathbf{e}=[1,1,\ldots,1]^T \in R^{m\times n}$，则 $\mathbf{Ze} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{z}_i = \mathbf{0}$
  - 引入数据中心化矩阵： $\mathbf{H}=\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{ee}^T \in R^{n\times n}$

$$\mathbf{ZH} = \mathbf{Z}(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{ee}^T) = \mathbf{Z}-\frac{1}{n}\mathbf{Zee}^T = \mathbf{Z} \quad \in R^{m\times n}$$

（**I**为单位矩阵）

7.7 多维缩放

- **MDS**
  - 令B为降维后样本的内积矩阵：$\mathbf{B}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\in R^{n\times n}$，有：

$$\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H}=\mathbf{H}^T\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\mathbf{H}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}=\mathbf{B}$$

  - 现在构造一个距离元素平方的矩阵$\mathbf{D}_2$，采用新表示：

$$\mathbf{D}_2=\begin{pmatrix} d_{11}^2 & d_{12}^2 & \cdots & d_{1n}^2 \\ d_{21}^2 & d_{22}^2 & \cdots & d_{2n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1}^2 & d_{n2}^2 & \cdots & d_{nn}^2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_n-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_n\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n-\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix}$$

- **MDS**
  - 令**B**为降维后样本的内积矩阵：$\mathbf{B}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\in R^{n\times n}$，有：

$$\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H}=\mathbf{H}^T\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\mathbf{H}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}=\mathbf{B}$$

  - 现在构造一个距离元素平方的矩阵$\mathbf{D}_2$，采用新表示：

$$\mathbf{D}_2=\begin{pmatrix} 0 & \|\mathbf{z}_1\|_2^2+\|\mathbf{z}_2\|_2^2-2\mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \|\mathbf{z}_1\|_2^2+\|\mathbf{z}_n\|_2^2-2\mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_n \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2+\|\mathbf{z}_2\|_2^2-2\mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_2 & 0 & \cdots & \|\mathbf{z}_2\|_2^2+\|\mathbf{z}_n\|_2^2-2\mathbf{x}_2^T\mathbf{z}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2+\|\mathbf{z}_n\|_2^2-2\mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_n & \|\mathbf{z}_2\|_2^2+\|\mathbf{z}_n\|_2^2-2\mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_n & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Uparrow$$

$$\begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_1-\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_n-\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_n\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n-\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix}$$

- **MDS**
  - 令**B**为降维后样本的内积矩阵：$\mathbf{B}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\in R^{n\times n}$，有：

$$\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H}=\mathbf{H}^T\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\mathbf{H}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}=\mathbf{B}$$

  - 现在构造一个距离元素平方的矩阵$\mathbf{D}_2$，采用新表示：

$$\mathbf{D}_2=\begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_1\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_n\|_2^2 & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix}$$

$$-2\begin{pmatrix} \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_n \\ \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_n \end{pmatrix}$$

- **MDS**
  - 令向量c为样本点的新表示的模的平方所组成的向量：

$$\mathbf{c} = \left[\|\mathbf{z}_1\|_2^2, \|\mathbf{z}_2\|_2^2, \ldots, \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \right]^T \in R^n$$

  - 我们有：

$$\mathbf{D}_2 = \mathbf{c}\mathbf{e}^T + \mathbf{e}\mathbf{c}^T - 2\mathbf{B}$$

$$\mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_1\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_n\|_2^2 & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\mathbf{z}_1\|_2^2 & \|\mathbf{z}_2\|_2^2 & \cdots & \|\mathbf{z}_n\|_2^2 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_1^T\mathbf{z}_n \\ \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_n^T\mathbf{z}_n \end{pmatrix}$$

- **MDS**
  - 进一步，我们有：

$$\mathbf{H}=\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^T \in R^{n\times n}$$

$$\mathbf{D}_2=\mathbf{c}\mathbf{e}^T+\mathbf{e}\mathbf{c}^T-2\mathbf{B}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}^T\mathbf{D}_2\mathbf{H} &= \mathbf{H}^T(\mathbf{c}\mathbf{e}^T+\mathbf{e}\mathbf{c}^T-2\mathbf{B})\mathbf{H} \\
&= \mathbf{H}^T\mathbf{c}\mathbf{e}^T(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^T)+(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^T)\mathbf{e}\mathbf{c}^T\mathbf{H}-2\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H} \\
&= \mathbf{H}^T\mathbf{c}\mathbf{e}^T-\frac{1}{n}\mathbf{H}^T\mathbf{c}\mathbf{e}^T\mathbf{e}\mathbf{e}^T+\mathbf{e}\mathbf{c}^T\mathbf{H}-\frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^T\mathbf{e}\mathbf{c}^T\mathbf{H}-2\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H} \\
\left(\because\ \mathbf{e}^T\mathbf{e}=n\right) \quad &= \mathbf{H}^T\mathbf{c}\mathbf{e}^T-\mathbf{H}^T\mathbf{c}\mathbf{e}^T+\mathbf{e}\mathbf{c}^T\mathbf{H}-\mathbf{e}\mathbf{c}^T\mathbf{H}-2\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H} \\
&= -2\mathbf{H}^T\mathbf{B}\mathbf{H} \\
&= -2\mathbf{B}
\end{aligned}$$

7.7 多维缩放

- **MDS**
  - 于是有： $\mathbf{B}=-\frac{1}{2}\mathbf{H}^T\mathbf{D}_2\mathbf{H}$
  - 在获得矩阵B之后，则可对矩阵B进行特征值分解。
  - 注重到：$\mathbf{B}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\in R^{n\times n}$，且B是对称矩阵，于是有：

$$\mathbf{B}=\mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T,$$

$$\mathbf{Z}=\mathbf{\Lambda}_d^{1/2}\mathbf{U}_d^T\in R^{m\times n},$$

$$\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}=diag(\sqrt{\lambda_1},\sqrt{\lambda_2},\ldots,\sqrt{\lambda_m})\in R^{m\times m},\ \mathbf{U}_m=\left[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\ldots,\mathbf{u}_m\right]\in R^{n\times m}$$

其中，$\Lambda_m^{1/2}$表示由矩阵B的前m个最大的特征值开根号后对应的对角矩阵；$\mathbf{U}_m$由前m个最大的特征值对应的特征向量组成。

7.7 多维缩放

MDS算法步骤：

1　给定数据的距离矩阵D$\in R^{n\times n}$

2　构造矩阵$\mathbf{D}_2$；

3　构造矩阵**B**；

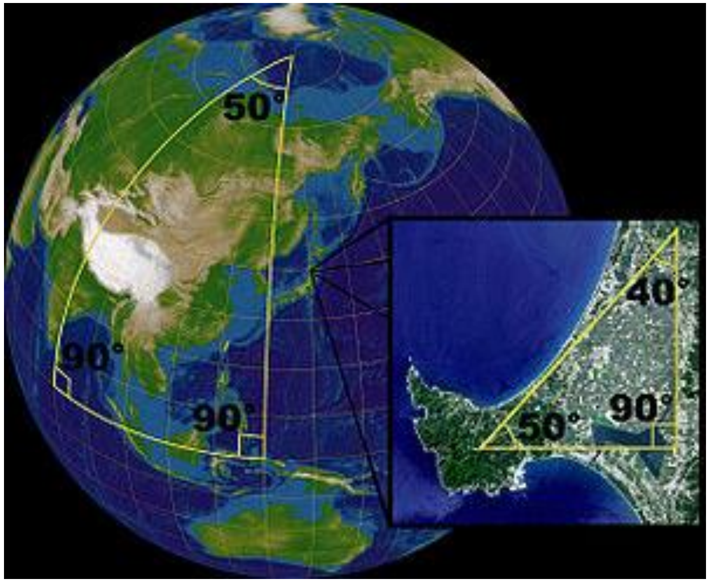
4　对矩阵B进行特征值分解：$\mathbf{B}=\mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T$;

5　$\mathbf{Z}=\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}\mathbf{U}_m^T\in R^{m\times n}$　；

输出：**Z**

7.8 流形学习

- **What are manifolds**



- ✓ 定义：流形上的每一个点的开邻域，与欧氏空间的开集同胚。
- ✓ 几何：流形是一块一块欧氏空间拼装而成的弯曲空间。
- ✓ 直观：流形是欧氏空间的一种推广，是在低维空间来表达高维空间所难以表达的空间结构。

The surface of a sphere is a two-dimensional manifold as it can be represented by a collection of two-dimensional maps.

(image from: http://en.wikipedia.org/wiki/Manifold)

7.8 流形学习

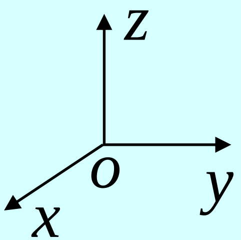
- **Mathematical definition**
  - **A manifold is a mathematical space that on a small enough scale resembles the Euclidean space of a specific dimension.**
  - **Local region can be coordinatized!**

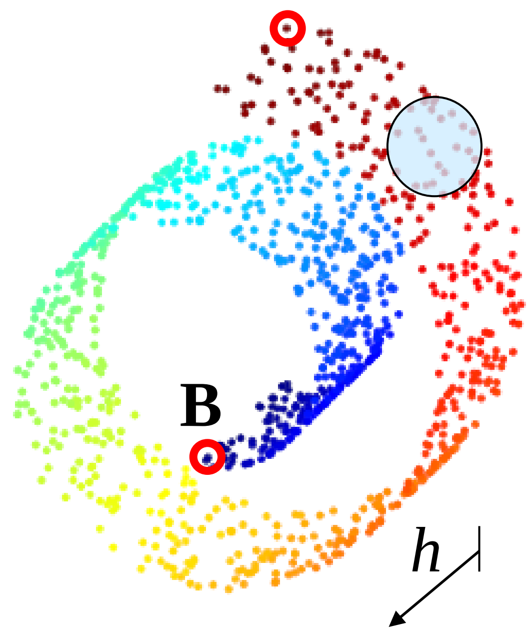
在数学上，流形用于描述一个几何形体，它在局部具有欧氏空间的性质。即可以应用欧氏距离来描述局部区域，但在全局部欧氏距离不成立。

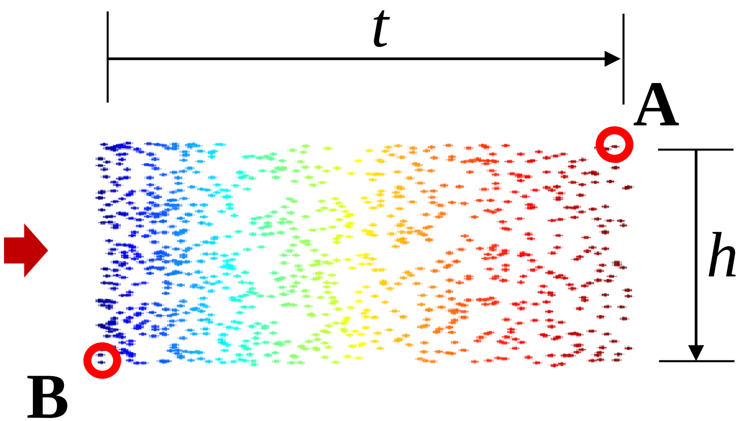
7.8 流形学习

- **What are manifolds**
  - **Swiss roll surface**

$$\begin{cases} x = h \\ y = t\cos(t) \\ z = t\sin(t) \end{cases}$$



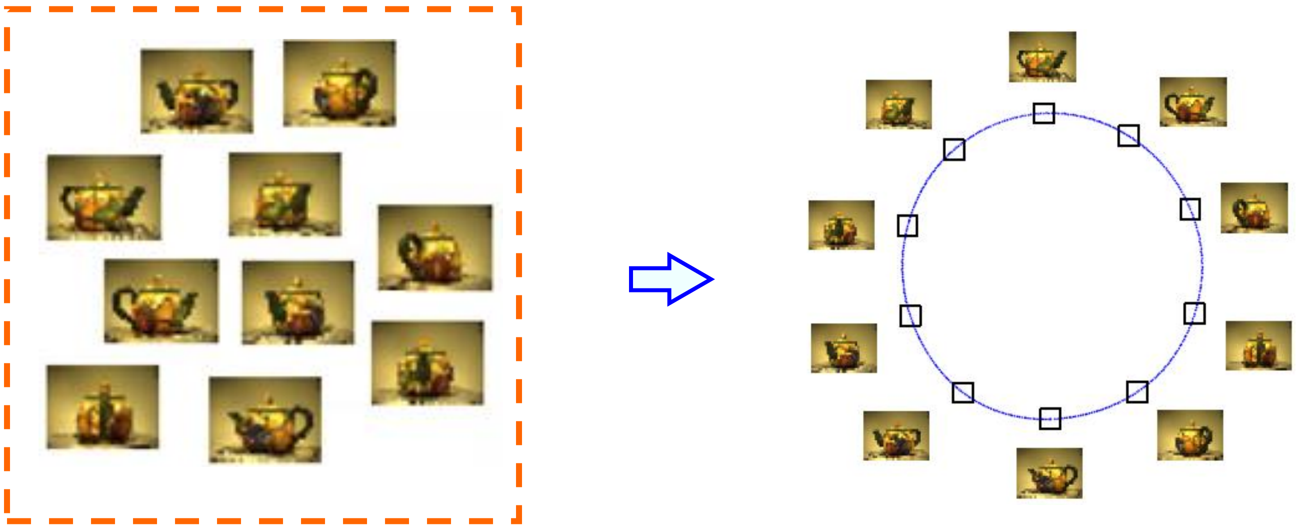




Swiss roll surface is a 2D manifold

7.8 流形学习

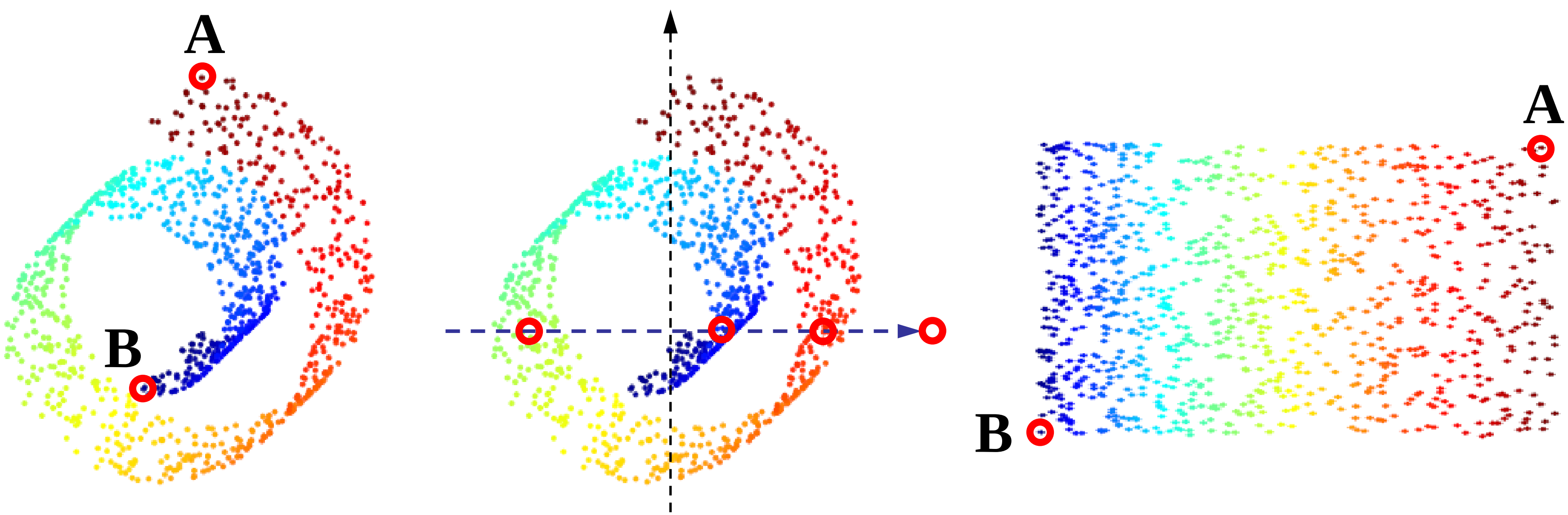
- **What are manifolds**
  - **一个直观的例子**



400张360度全角度拍摄的图片会排列成一个圆！

7.8 流形学习

- **非线性维数缩减**
  - Problem formulation in machine learning：in view of dimensionality reduction



source data　　linearly projecting　　nonlinearly unfolding

通过线性投影将高维数据降到低维将难以展开非线性结构！

7.8 流形学习

- **Problem Formulation**

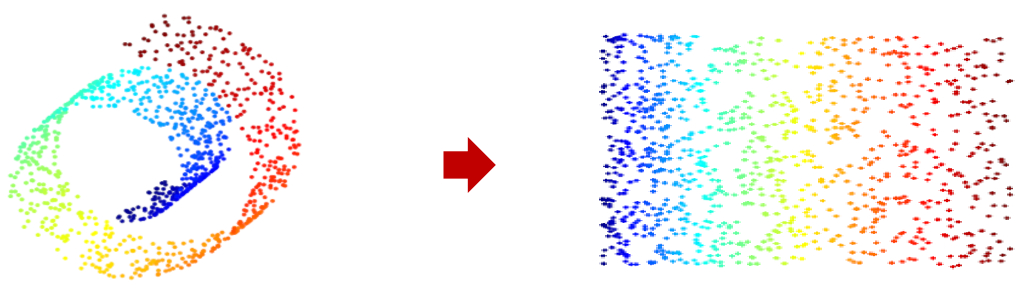
??

Given $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{n} \subset R^{m}$ → $\{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^{n} \subset R^{d}$

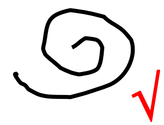
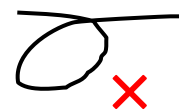
$\mathbf{x}_i = f(\mathbf{y}_i)$

unknown

$(d < m)$

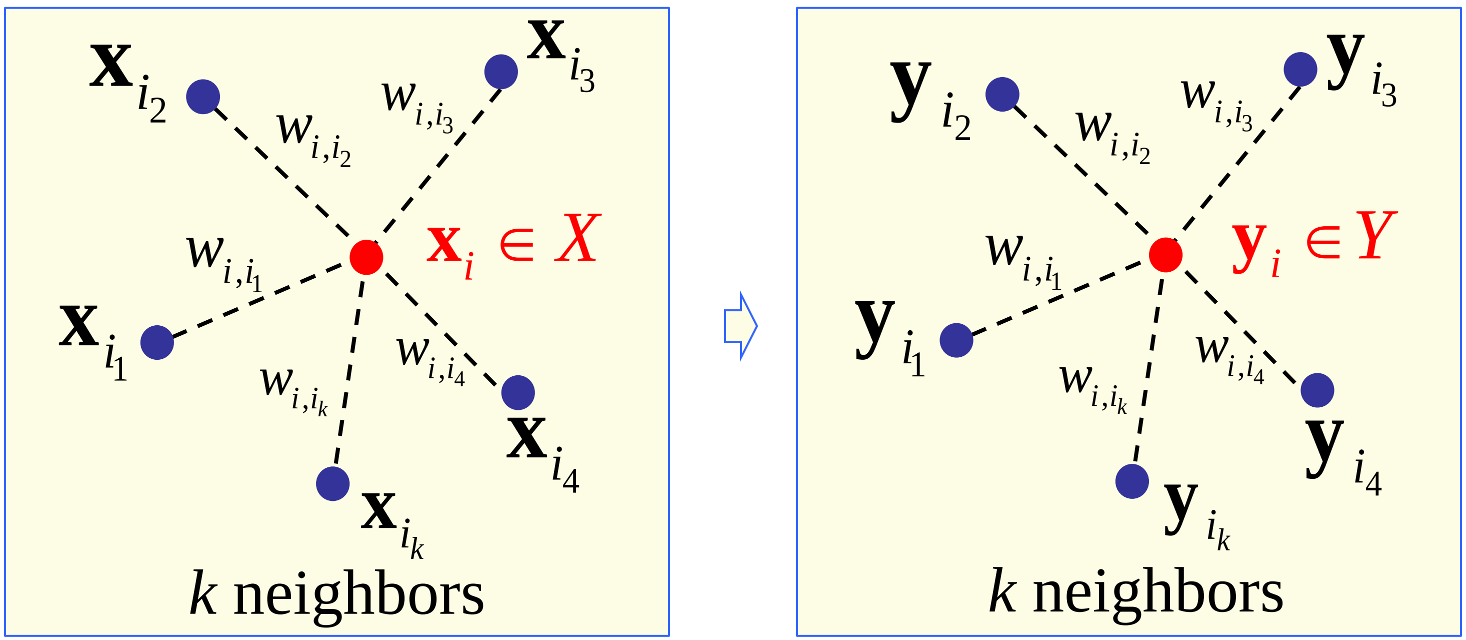


7.8 流形学习

- **一些假定**
  - **smooth manifold:** $(f: \mathrm{C} \subset \mathrm{R}^d \rightarrow \mathrm{R}^m)$
  - **densely sampling:**
  - **no self-intersections:**  
- **基本思想：**
  - 高维空间相似的数据点，映射到低维空间距离也是相似的
- **经典算法**
  - Isomap，LLE， Laplacian Eigenmap，HLLE， MVU，LTSA，LSE，t-SNE（stochastic neighbor embedding），etc

7.8 流形学习--LLE

- **LLE (Locally linear embedding)**
  - **基本思想：**给定数据集，通过最近邻等方式构造一个数据图(data graph)。然后在每一个局部区域，高维空间中的样本线性重构关系在低维空间中均得以保持



$$\mathbf{x}_i \approx \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{x}_{i_j} \qquad \mathbf{y}_i \approx \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{y}_{i_j}$$

- **LLE**
  - 最优线性表示系数

$$\min_{\mathbf{w}_i} \left\| \mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{x}_{i_j} \right\|_2^2, \quad s.t. \quad \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} = 1$$

通过拉格朗日乘子法，可得如下有关线性表示系数的解：

$$\mathbf{w}_i = \frac{(\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{e}}{\mathbf{e}^T (\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{e}} \qquad \text{(自己推导)}$$

$$\mathbf{w}_i = [w_{i,i_1}, w_{i,i_2}, \ldots, w_{i,i_k}]^T \in R^k,$$

$$\mathbf{X}_i = [\mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2}, \ldots, \mathbf{x}_{i_k}] \in R^{m \times k},$$

$$\mathbf{e} = [1, 1, \ldots, 1]^T \in R^k$$

防止矩阵奇异

$$\mathbf{w}_i = \frac{(\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{e}}{\mathbf{e}^T (\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{e}}$$

- **LLE**
  - 全局嵌入：利用在原始空间中获得的局部线性重构关系，在低维空间中重构对应的样本点：

$$\mathbf{y}_i \approx \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{y}_{i_j}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

  - 考虑所有新样本点的重构误差，得到全局嵌入的目标函数：

$$\sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{y}_i - \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{y}_{i_j} \right\|_2^2 = tr\left(\mathbf{Y}(\mathbf{I}-\mathbf{W})^T (\mathbf{I}-\mathbf{W}) \mathbf{Y}^T \right)$$

where $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_n] \in R^{d \times n}$.

W为**权重矩阵**，其第i行记录对应样本点x_i的k个权重，只有在对应的邻居位置i_1, i_2…, i_k处才有值，其余全为零。

7.8 流形学习--LLE

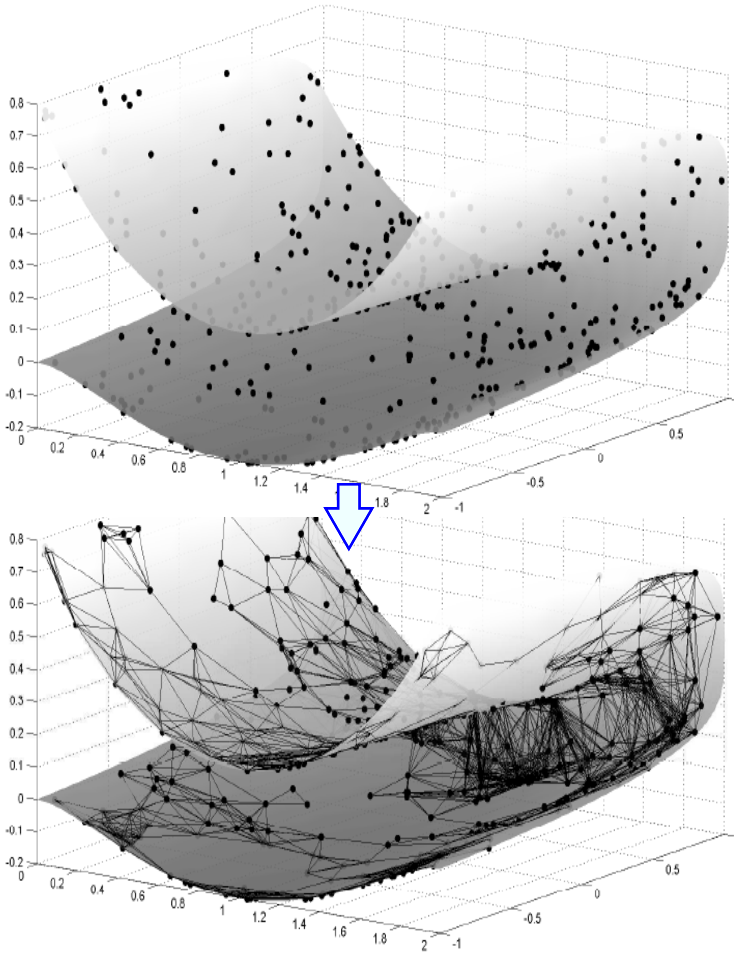
- **LLE**
  - 全局嵌入学习模型：

$$\min_{\mathbf{Y}} \quad tr\left(\mathbf{Y}(\mathbf{I}-\mathbf{W})^T(\mathbf{I}-\mathbf{W})\mathbf{Y}^T\right), \quad s.t. \quad \mathbf{YY}^T=\mathbf{I}$$

  - 求解：通过求矩阵**(I-W)**^{T}**(I-W)**的特征值分解来得到。
    - 取出该矩阵最小的k+1个特征值对应的特征向量；
    - 丢弃特征值零对应的分量全相等的特征向量；
    - 即采用第2至第d+1个最小的特征值对应的特征向量组成样本的新的坐标。

S. Roweis and L. Saul, “Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding,” Science, vol. 290, pp. 2323–2326, 2000.

- **LLE计算流程：**



对每个样本点，找出其k个近邻

线性表示

$$\mathbf{x}_i \approx \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{x}_{i_j}$$

$$s.t. \quad \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} = 1$$

保持表示

$$\mathbf{y}_i \approx \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j} \mathbf{y}_{i_j}$$

全局误差

$$E(\mathbf{Y}) = \mathrm{tr}(\mathbf{YMY}^T)$$

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I}-\mathbf{W})^T(\mathbf{I}-\mathbf{W})$$

低维嵌入

$$\min E(\mathbf{Y}), \quad s.t. \ \mathbf{YY}^T = \mathbf{I}$$

几乎所有的流形学习方法都需要首先构建一个关于数据的图

LLE算法步骤：

1 Given Data $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n]\subset R^{m\times n}$，近邻参数$k$，低维空间$d$

2 for i=1,2,…,n

3 确定$\mathbf{x}_i$的k个近邻；

4 对$\mathbf{x}_i$进行线性最优表示，获取近邻重构权重

5 end for

6 构造权重矩阵**W**；

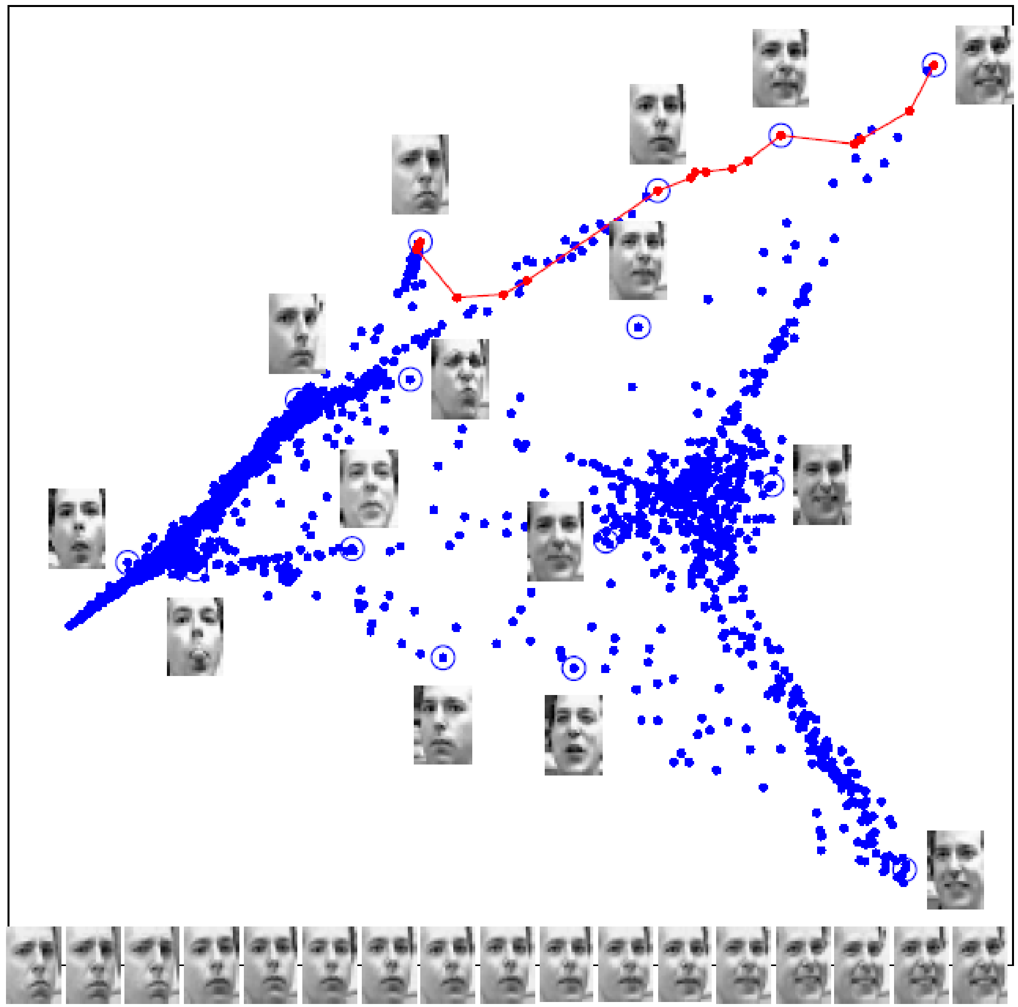
7 求解：$\min_{\mathbf{Y}} \ tr\left(\mathbf{Y}(\mathbf{I}-\mathbf{W})^T(\mathbf{I}-\mathbf{W})\mathbf{Y}^T\right), \quad s.t. \quad \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T=\mathbf{I}$

8 采用第2至第d+1个最小的特征值对应的特征向量组成新坐标

9 输出嵌入结果

S. Roweis and L. Saul, “Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding,” Science, vol. 290, pp. 2323–2326, 2000.

- **LLE一些结果：**

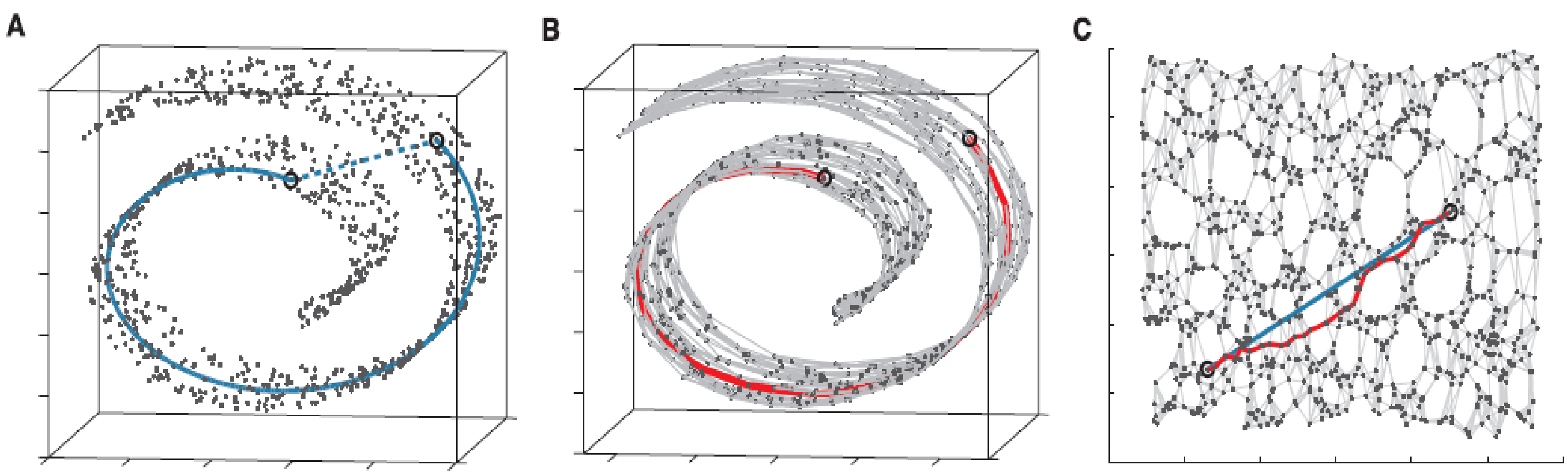


n=1965, m=250,d=2, k=12

University of Chinese Academy of Sciences

7.8 流形学习--Isomap

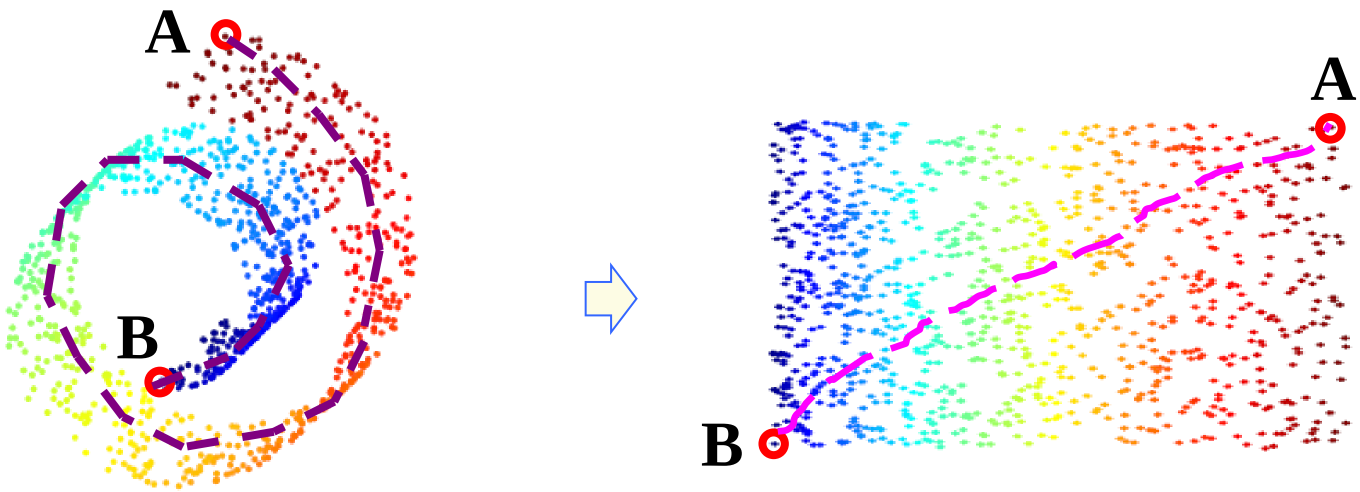
- **Isomap (isometric feature mapping)**
  - **基本思想：**给定数据集，通过最近邻等方式构造一个数据图(data graph)。然后，计算任意两个点之间的最短路径（即测地距离）。对于所有的任意两个点对，期望在低维空间中保持其测地距离。



Given a data set　　K-nn data graph　　Dijkstra shortest path

7.8 流形学习--Isomap

- **Isomap (isometric feature mapping)**
  - **基本思想：**给定数据集，通过最近邻等方式构造一个数据图(data graph)。然后，计算任意两个点之间的最短路径（即测地距离）。对于所有的任意两个点对，期望在低维空间中保持其测地距离。



Isomap算法步骤：

1 Given Data $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n]\subset R^{m\times n}$，近邻参数$k$，低维空间$d$

2 for $i=1,2,\ldots,n$

3 确定$\mathbf{x}_i$的k个近邻；

4 $\mathbf{x}_i$与k个近邻点之间的距离设定为欧氏距离，与非近邻点的距离设置为无穷大

5 end for

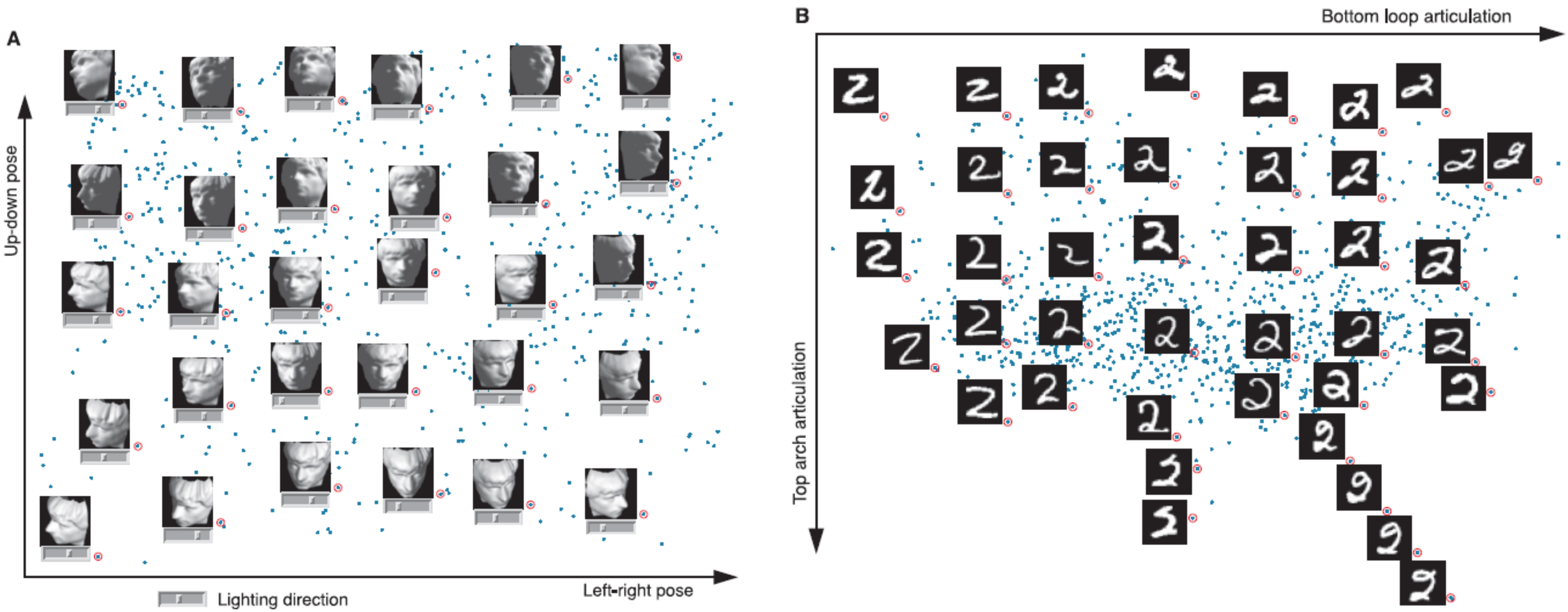
6 调用最短路径法计算任意两样本点$\mathbf{x}_i$与$\mathbf{x}_j$之间的距离d_{ij}。由此可构造距离矩阵。

7 调用MDS算法

输出：MDS算法的计算结果作为低维嵌入结果

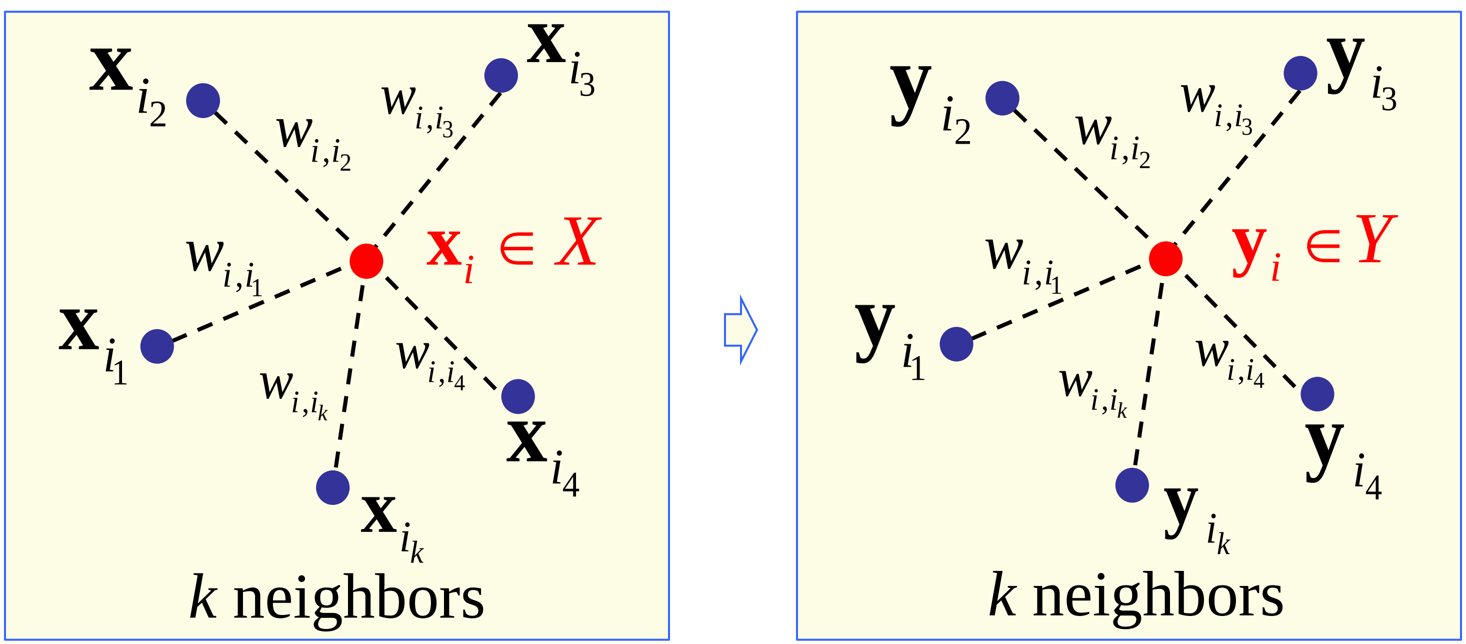
J. B. Tenenbaum, V. de Silva, and J. C. Langford, “A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction,” Science, vol. 290, pp. 2319–2323, 2000.

7.8 流形学习--Isomap



7.8 流形学习--LE

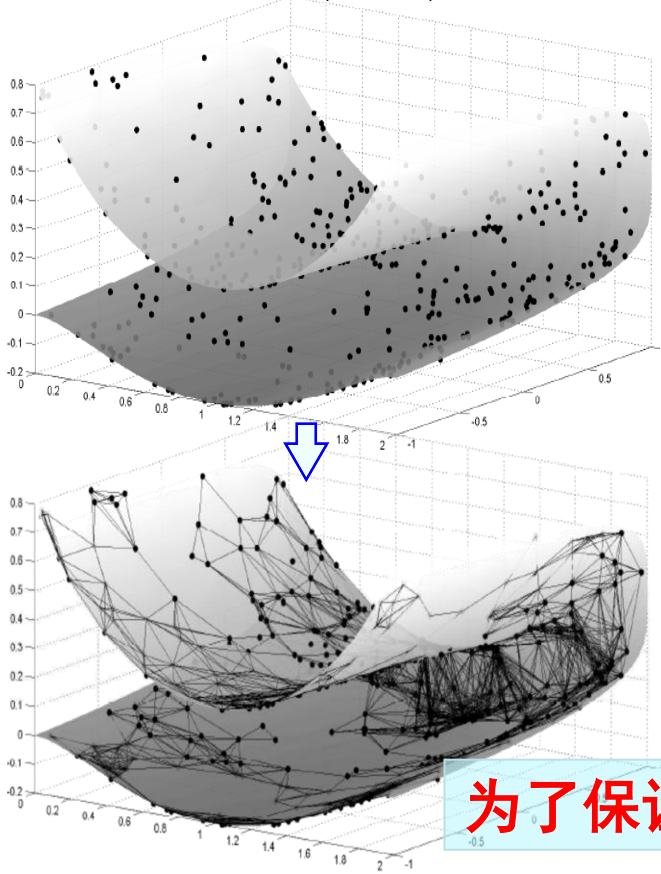
- **Laplacian Eigenmapping（LE）**
  - **基本思想：**给定数据集，通过最近邻等方式构造一个数据图(data graph)。然后，在每一个局部区域，计算点与点之间的亲合度（相似度），期望点对亲合度在低维空间中也得到保持。



7.8 流形学习--LE

- **LE**
  - 如何计算点对亲合度？
  - 图构造 G(V, E)

$$w_{i,i_j} = \exp\left(-\frac{\| \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i_j} \|_2^2}{2\sigma^2} \right)$$



$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} & w_{13} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & 0 & w_{23} & \cdots & w_{2n} \\ w_{31} & w_{32} & 0 & \cdots & w_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{n1} & w_{n2} & w_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

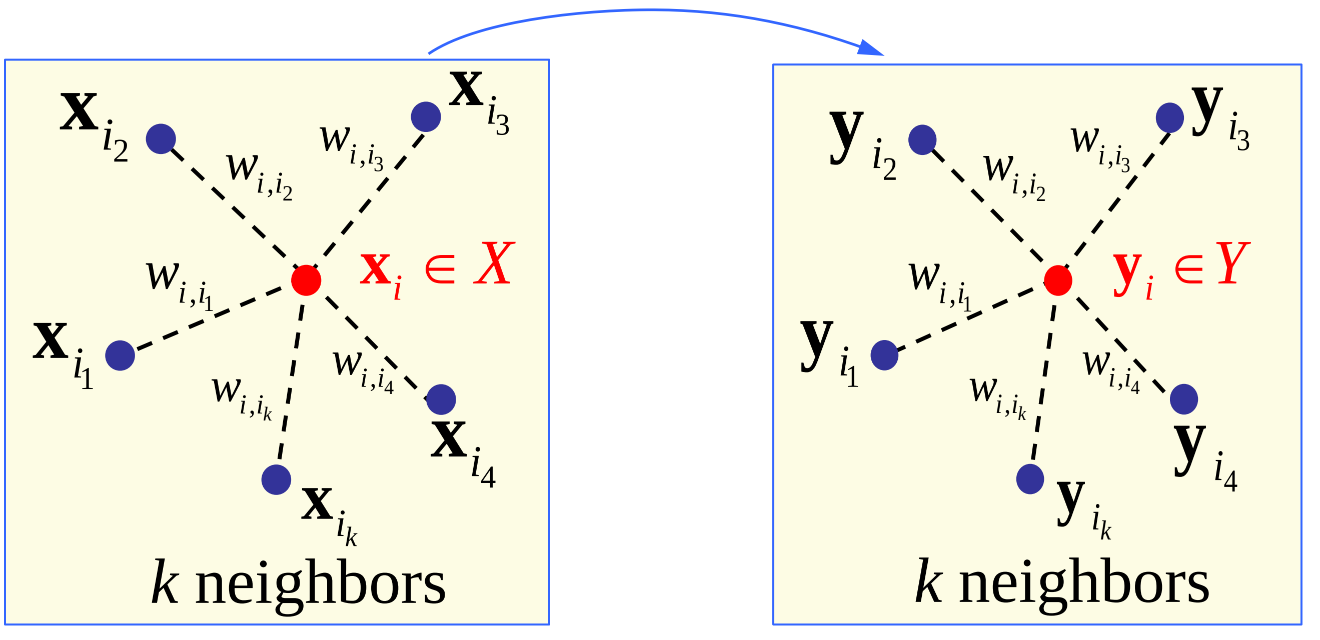
(每行只有k个元素为非零)

为了保证W矩阵的对称性，可以令W=(W^T+W)/2

7.8 流形学习--LE

- **LE**
  - 如何在低维空间保持亲合度？构造如下目标函数:

$$E(\mathbf{Y})=\sum_{i,j} w_{i,i_j}\|\mathbf{y}_i-\mathbf{y}_{i_j}\|_2^2$$



7.8 流形学习--LE

- **LE：考虑目标函数：**
  - 对任意向量 $\mathbf{f} = [\, f_1, f_2, \ldots, f_n \,]^T$, 有如下结论：

令

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix}$$

$$d_i = \sum_{j=1}^{k} w_{i,i_j}, \quad i = 1, \ldots, n$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}^T(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{f} &= \sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{n} f_i f_j w_{ij} \\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 - 2\sum_{i,j=1}^{n} f_i f_j w_{ij} + \sum_{j=1}^{n} d_j f_j^2 \right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}(f_i - f_j)^2 \right) \\
&\geq 0
\end{aligned}$$

7.8 流形学习--LE

- **LE：考虑目标函数：**

$$\text{Let}\quad \mathbf{Y}=[\mathbf{y}_1,\mathbf{y}_2,\ldots,\mathbf{y}_n]=\begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1n} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{d1} & y_{d2} & \cdots & y_{dn} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \mathbf{f}_1^T \\ \mathbf{f}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{f}_d^T \end{pmatrix}\in R^{d\times n}$$

$$\text{where，}\ \mathbf{f}_i=[y_{i1},y_{i2},\ldots,y_{in}]^T\in R^n,\quad i=1,2,\ldots,d$$

$$E(\mathbf{Y})=\sum_{i,j} w_{i,i_j}\|\mathbf{y}_i-\mathbf{y}_{i_j}\|_2^2=\sum_{i,j} w_{i,i_j}\left((y_{1i}-y_{1i_j})^2+\cdots+(y_{di}-y_{di_j})^2\right)$$

$$=\mathbf{f}_1^T(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{f}_1+\mathbf{f}_2^T(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{f}_2+\cdots+\mathbf{f}_d^T(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{f}_d$$

$$=tr(\mathbf{Y}(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{Y}^T)$$

7.8 流形学习--LE

- **LE**
  - **学习模型**

$$\min E(\mathbf{Y}) = tr\left(\mathbf{Y}(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{Y}^T\right), \quad s.t.\ \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T = \mathbf{I}$$

  - **令M=D-W**
    - M有一个特征值为零，对应的特征向量全为1：

$$\mathbf{Me} = (\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{e} = (\mathbf{D}-\mathbf{W})\begin{pmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}d_1 - \sum_{j=1}^{k} w_{1,1_j}\\ d_2 - \sum_{j=1}^{k} w_{1,1_j}\\ \vdots \\ d_n - \sum_{j=1}^{k} w_{n,n_j}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \in R^n$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{Me} = 0\mathbf{e}$$

7.8 流形学习--LE

- **LE算法步骤**

LE算法步骤：

1 Given Data $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n]\subset R^{m\times n}$，近邻参数$k$，低维空间$d$

2 确定$\mathbf{x}_i$的k个近邻；确定亲合度矩阵**W**，计算度矩阵**D**

3 求解模型 $\min E(\mathbf{Y}), \quad s.t.\ \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T=\mathbf{I}$

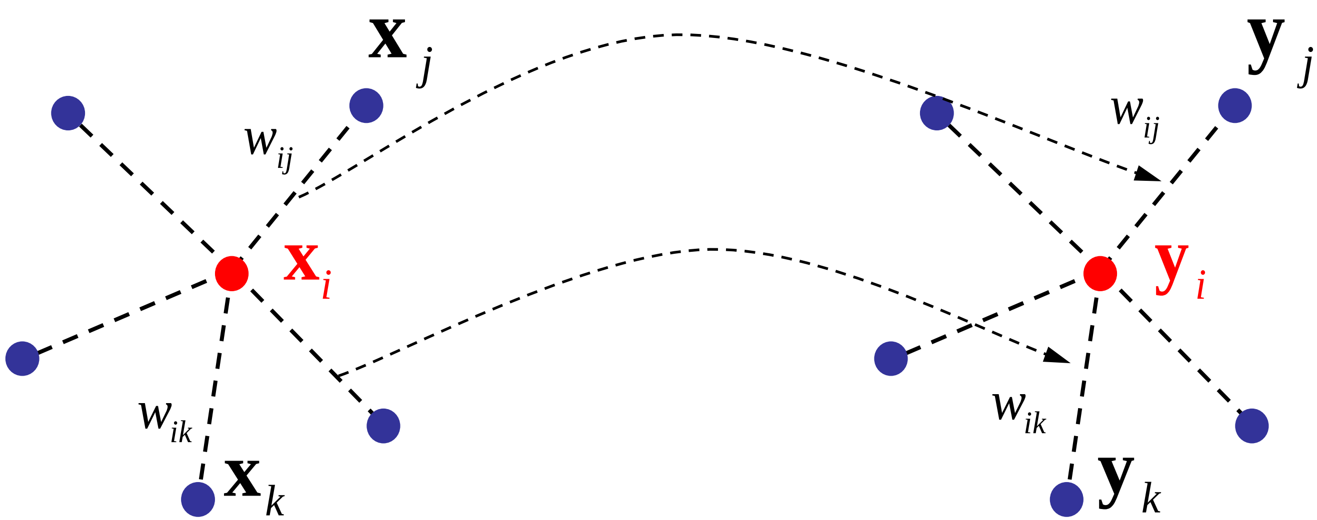
4 采用第2至第d+1个最小的特征值对应的特征向量组成低维嵌入**Y**

输出：$\mathbf{Y}\in \boldsymbol{R}^{d\times n}$

M. Belkin and P. Niyogi, “Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation,” Neural Computation, vol. 15, no. 6, pp. 1373–1396, 2003

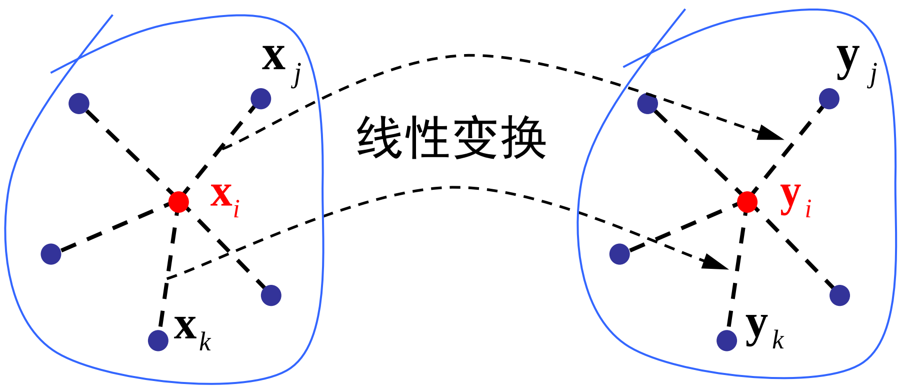
7.8 流形学习--LE

- **其它流形学习思想**
  - 处理好局部是构造新的流形学习算法的关键



7.8 流形学习--LE

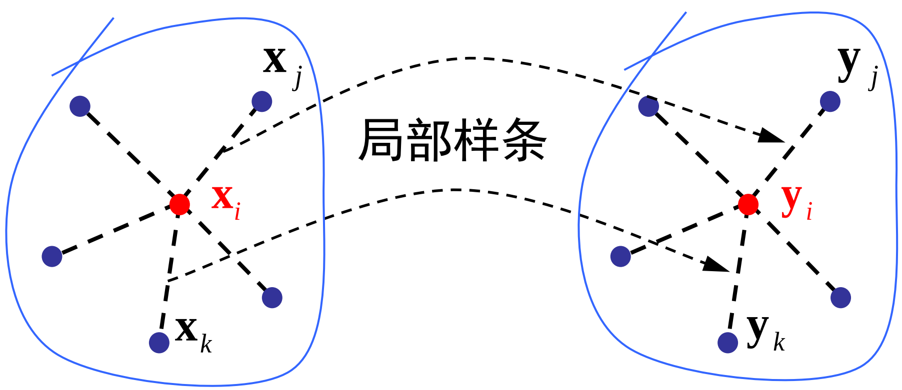
- **局部切空间对齐（LTSA）**
  - **基本思想：**对每一个数据，在局部引入一个线性变换，将其近邻点映射到低维坐标系中的对应近邻点
    - 在最优局部线性变换下，可以计算映射误差。然后将所有局部邻域中计算的误差进行累加，获得全局购入的目标函数，
    - 这就是LTSA算法（浙江大学数学系张振跃老师提出）



Z. Zhang and H. Zha. “Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via tangent space alignment,” SIAM Journal on Scientific Computing, vol. 26, no. 1, pp. 313–338, 2004.

7.8 流形学习--LE

- **局部样条嵌入**
  - 对每一个数据，局部引入一个非线性变换，将其近邻点映射到低维坐标系中的对应近邻点
    - 在最优局部样条映射下，可以计算映射误差。然后将所有局部邻域中计算的误差进行累加，获得全局购入的目标函数，
    - 这就是局部样条嵌入(local spline embedding, LSE)



Shiming Xiang, et al.. Nonlinear Dimensionality Reduction with Local Spline Embedding. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, vol. 21, no. 9, pp. 1285-1298, 2009

7.8 流形学习--LE

- **其它流形学习方法**
  - Hessian LLE (HLLE)
  - Maximum variance unfolding
  - Relative distance comparison preserving
  - Stochastic neighbor embedding

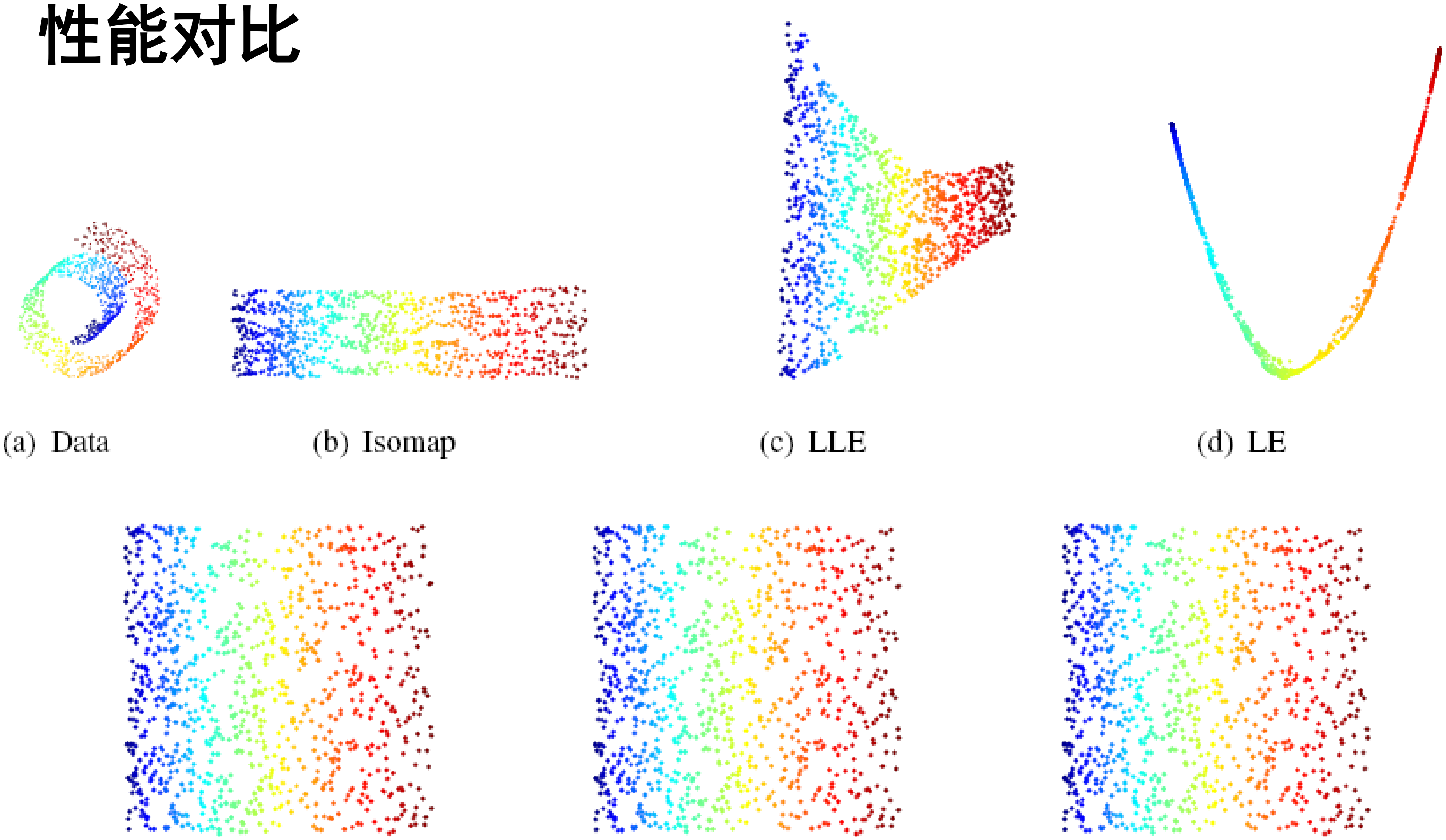
✓ K. Q. Weinberger, F. Sha, and L. K. Saul, “Learning a kernel matrix for nonlinear dimensionality reduction,” in International Conference on Machine learning, Banff, Canada, 2004, pp. 888–905.

✓ D. L. Donoho and C. Grimes, “Hessian eigenmaps: locally linear embedding techniques for highdimensional data,” Proceedings of the National Academy of Arts and Sciences, vol. 100, no. 10, pp. 5591–5596, 2003.

✓ Van der Maaten L, Hinton G. Visualizing data using t-SNE. Journal of Machine Learning Research, 9(2579-2605): 85，2008.

7.8 流形学习--LE

- 性能对比

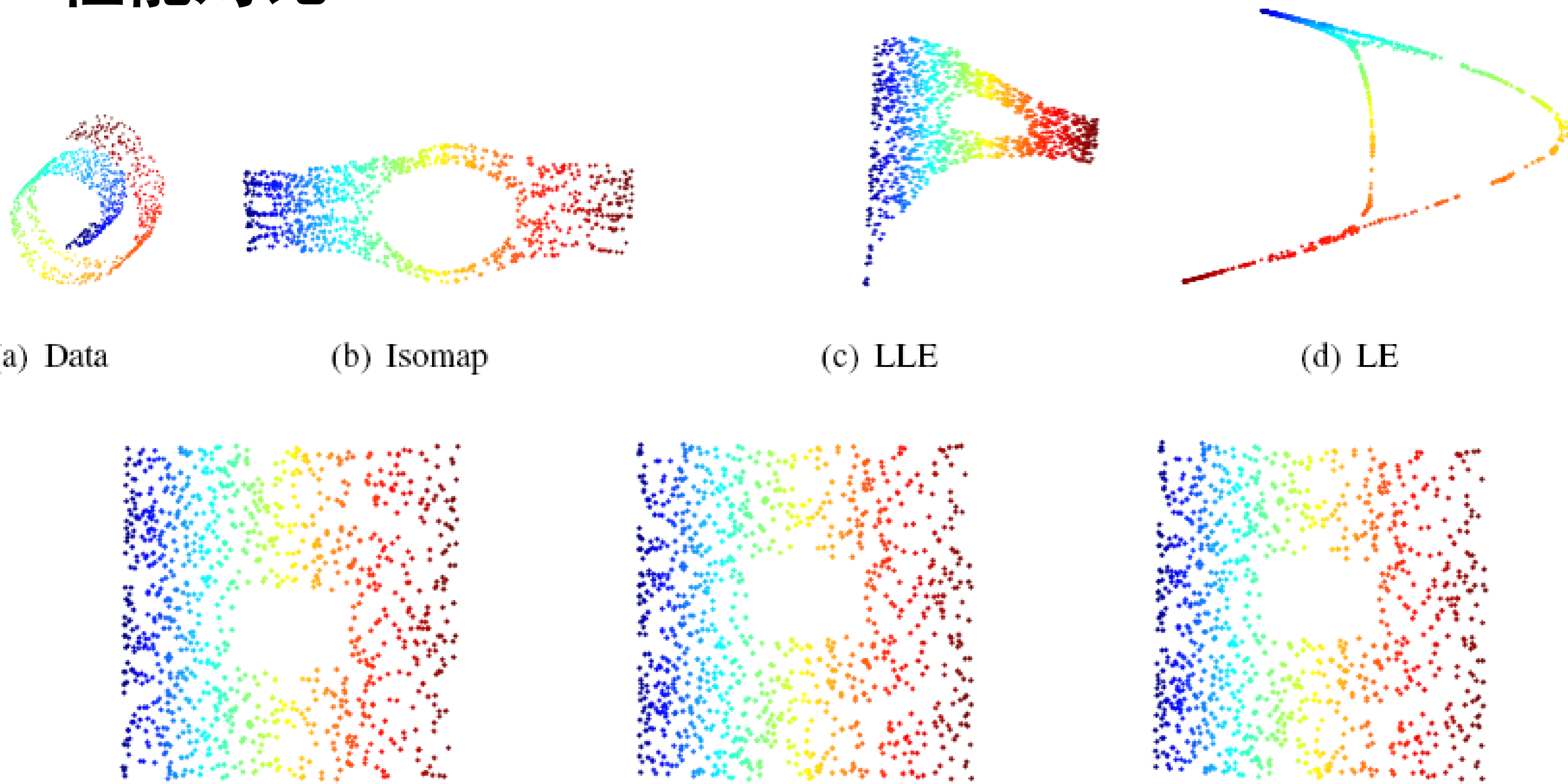


(a) Data (b) Isomap (c) LLE (d) LE

(e) HLLE (f) LTSA (g) LSE

7.8 流形学习--LE

- 性能对比

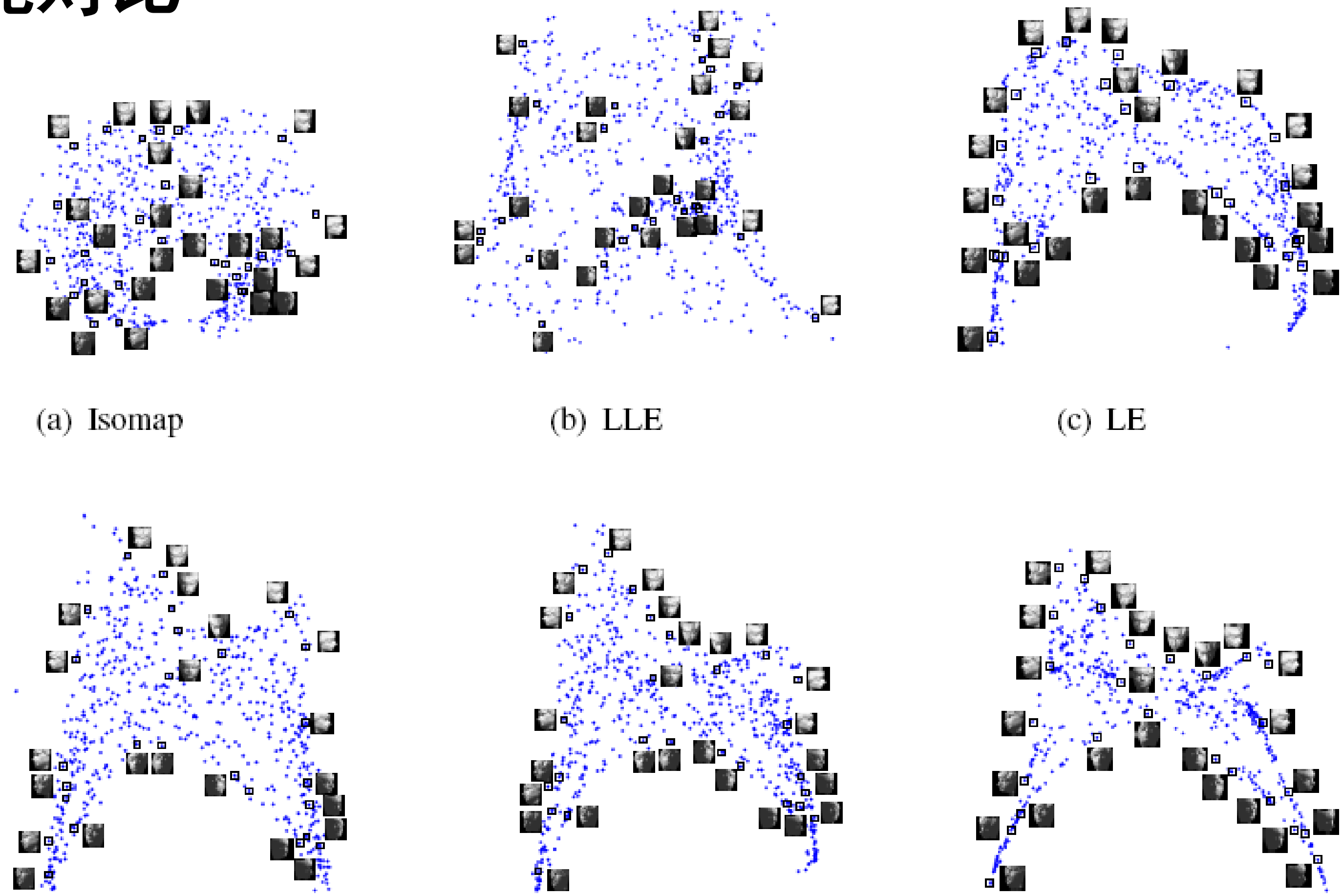


(a) Data (b) Isomap (c) LLE (d) LE

(e) HLLE (f) LTSA (g) LSE

7.8 流形学习--LE

- **性能对比**

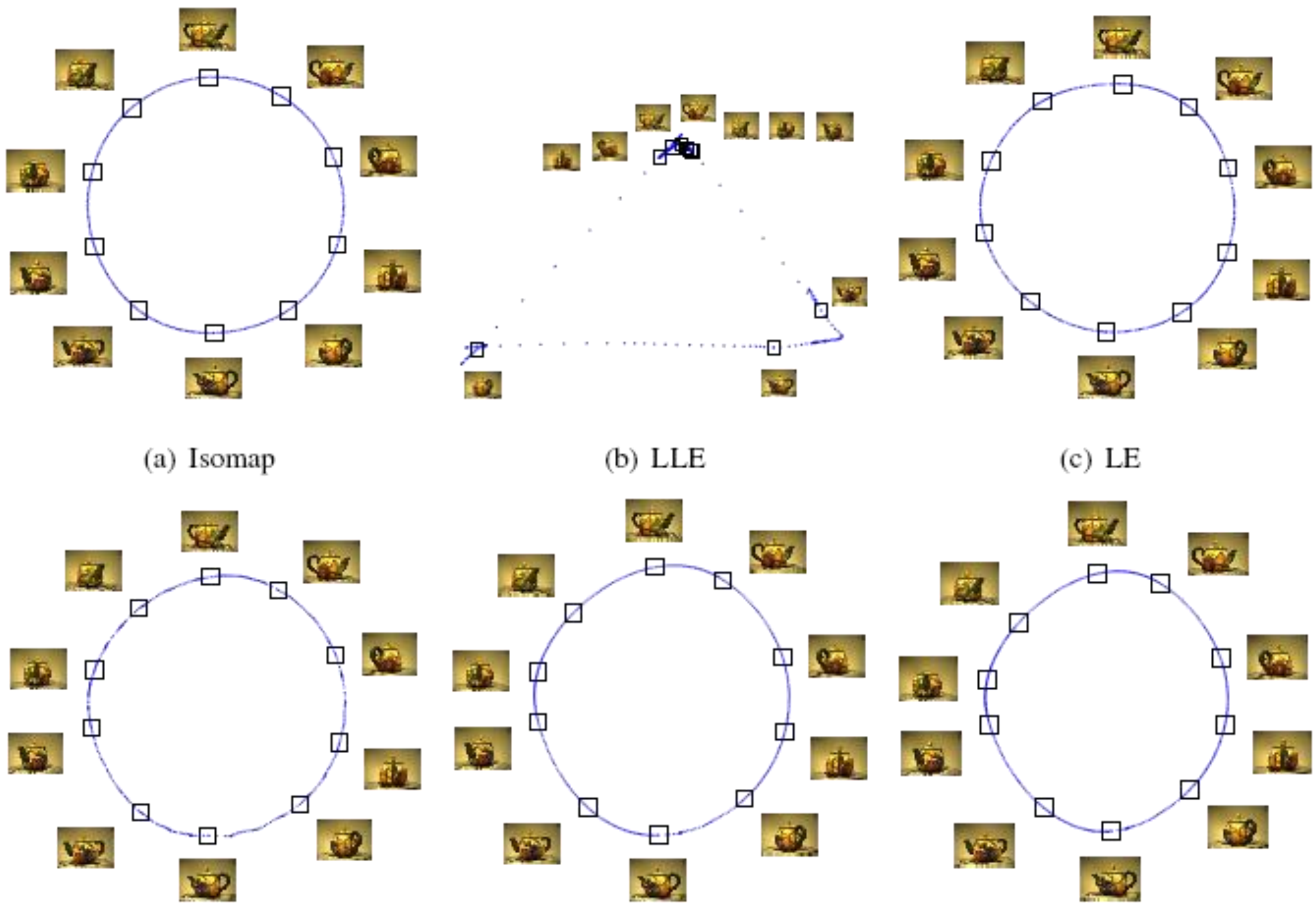


(a) Isomap (b) LLE (c) LE

(d) HLLE (e) LTSA (f) LSE

7.8 流形学习--LE

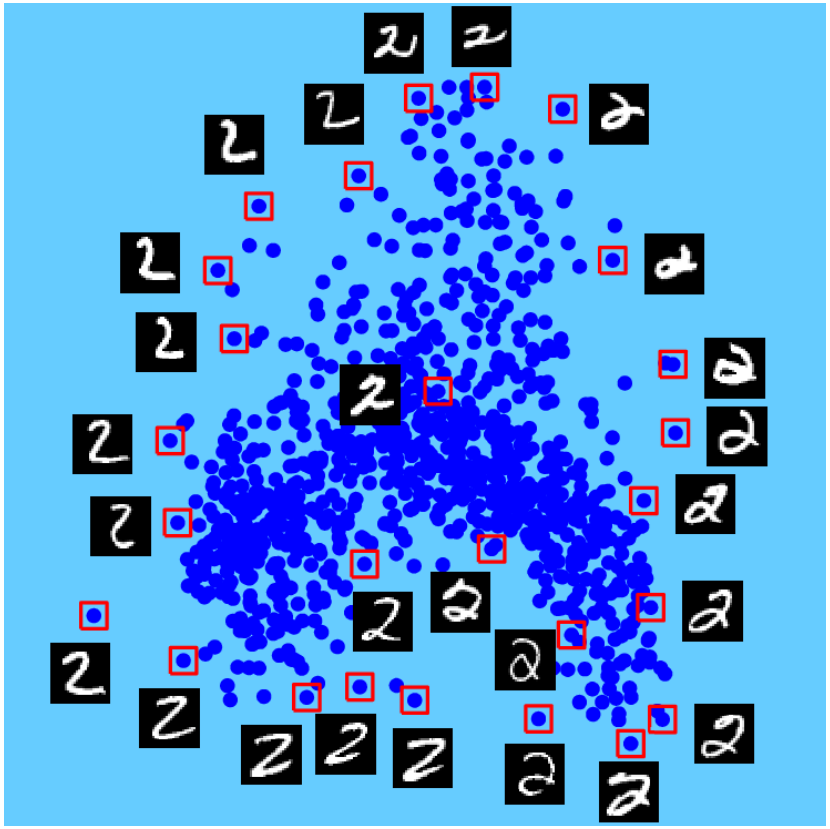
- **性能对比**



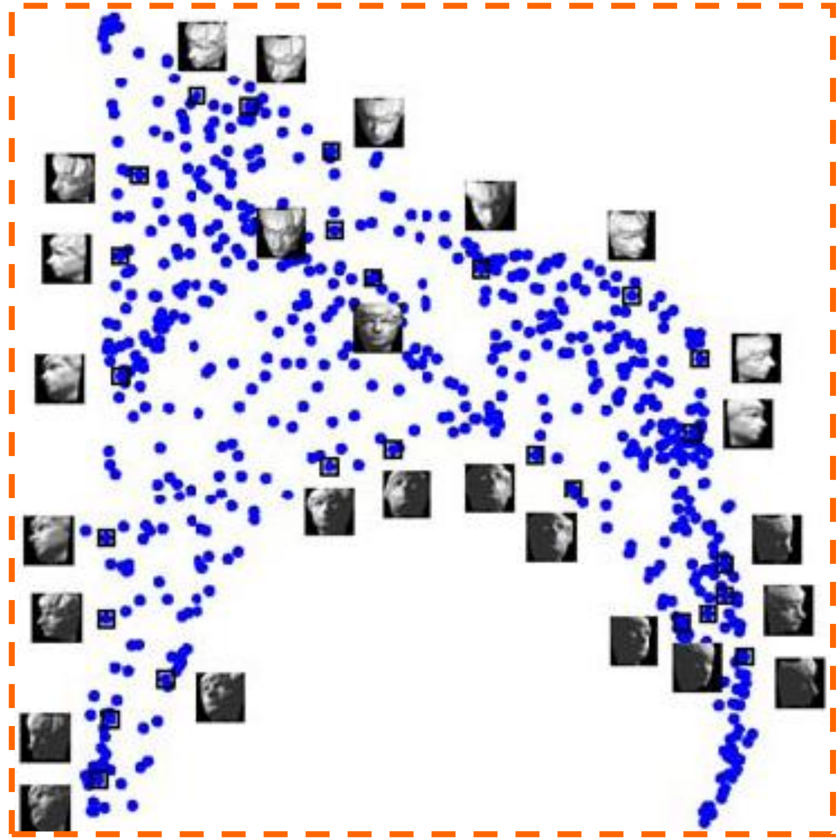
(a) Isomap (b) LLE (c) LE

(d) HLLE (e) LTSA (f) LSE

7.8 流形学习--LE



风格



姿态+光照

Shiming Xiang, et al.. Nonlinear Dimensionality Reduction with Local Spline Embedding. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, vol. 21, no. 9, pp. 1285-1298, 2009

7.8 流形学习--LE

- **统一的学习模型**
  - ✓目标：给定高维数据 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{n} \subset R^{m}$ 寻找其低维表示
  - ✓学习模型：$\{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^{n} \subset R^{d} \quad (d < m)$

图拉普拉斯矩阵

对L 进行特征值分解

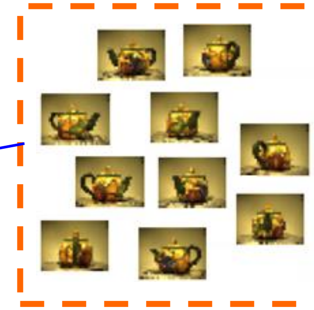
$$\min_{\mathbf{Y}} \quad \mathrm{trace}(\mathbf{YMY}^T)$$

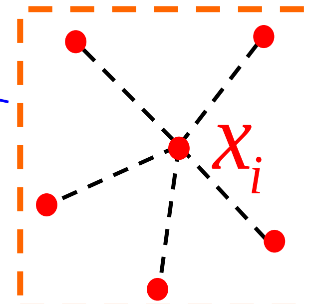
$$s.t. \quad \mathbf{YY}^T = \mathbf{I} \quad (\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_n] \in R^{d \times n})$$

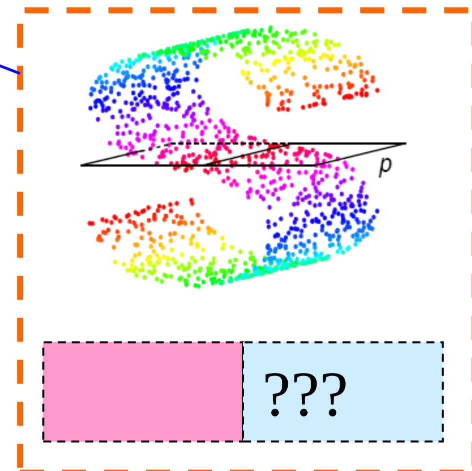
任务：构造 M 矩阵--与数据图构造和局部描述紧密相关！

7.8 流形学习--LE

- **流形学习中的一些挑战性问题**
  - 低维本质维数的确定
  - 如何构建一个好的数据图
  - 如何将新样本嵌入到已有的低维结构中去，即所谓的out-of-embedding problem
  - 超大规模计算

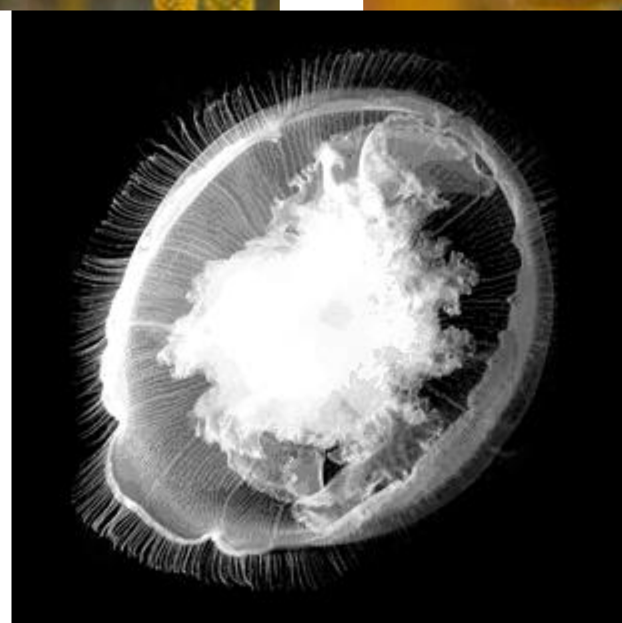






比如：1千万个数据，意味着需要对1千万x1千万大小的矩阵进行特征值分解！

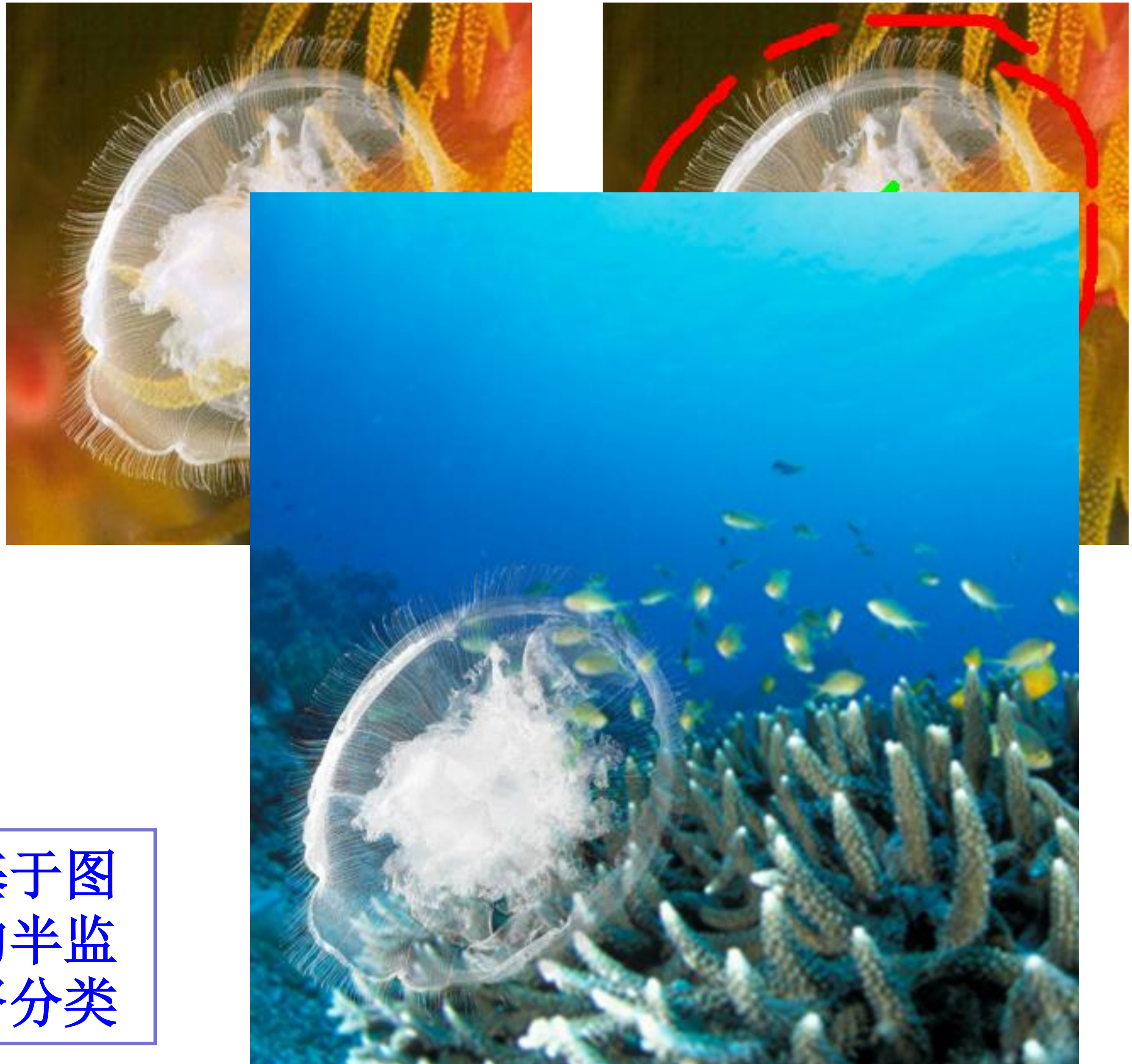
流形学习应用



基于图的半监督分类

Shiming Xiang, et al., Semi-Supervised Classification via Local Spline Regression, T-PAMI, 2010.

流形学习应用



基于图的半监督分类

Shiming Xiang, et al., Semi-Supervised Classification via Local Spline Regression, T-PAMI, 2010.

7.8 局部保持投影

- **局部保持投影**（**local preserving projection, LPP**）
  - 由浙江大学何晓飞教授(2002年于芝加哥大学）提出，一个十分著名的线性降维方法。
  - 是拉普拉斯映射(LE)的线性近似，但同时具备流形学习方法和线性降维方法的优点。
  - 在机器学习、模式识别、数据挖掘中得到广泛应用。

7.8 局部保持投影

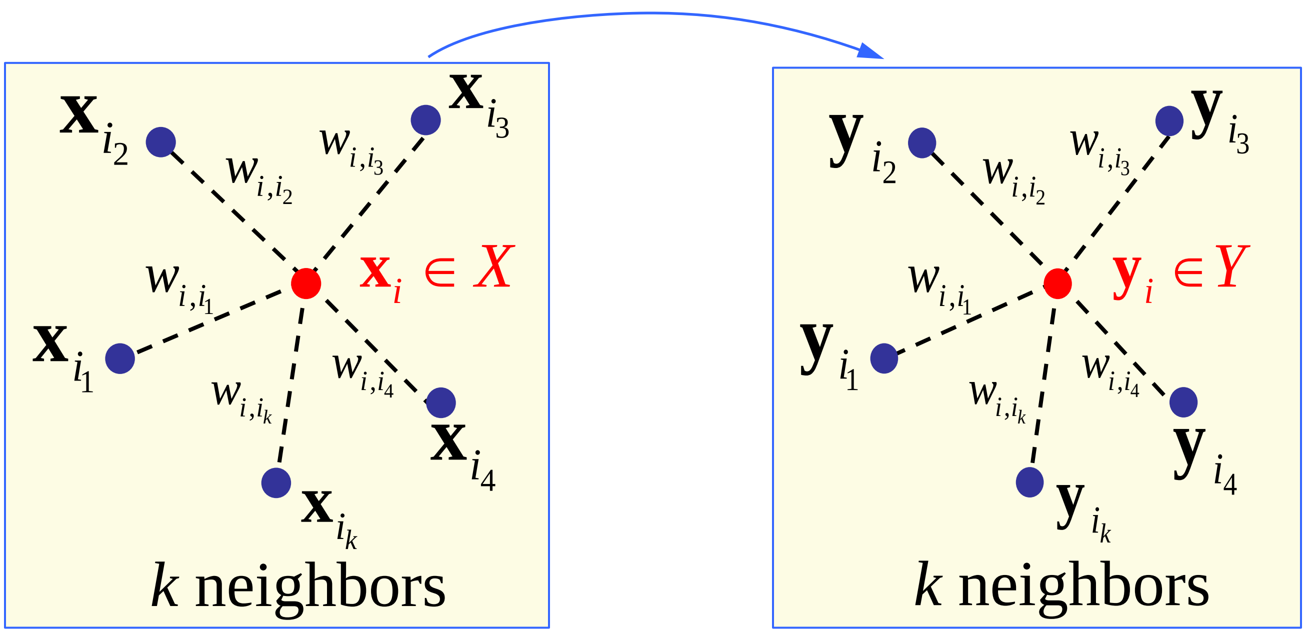
- **算法思想**
  - **构建原空间中各样本点对之间的亲和度关系，**并在线性投影中保持这种亲和度。
  - 在降维的同时保留原空间中样本的局部邻域结构，即尽量避免样本集在投影空间中发散，保持原来的近邻结构。
  - 在低维空间中最小化近邻样本间的距离加权平方和。

7.8 局部保持投影

- **算法描述**
  - 对样本集$\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n\}\subset R^m$，引入一个线性变换：

$$\mathbf{y}=\mathbf{V}^T\mathbf{x}, \quad \text{where } \mathbf{x}\in R^m, \mathbf{V}\in R^{m\times d}, \mathbf{y}\in R^d, d<m$$

  - 在该线性变换下，希望保持样本的原来的近邻关系：



7.8 局部保持投影

- **算法描述**
  - 回顾LE：$\min_{\mathbf{Y}} \; tr(\mathbf{Y}(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{Y}^T), \quad s.t. \quad \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T = \mathbf{I}$
  - 引入线性变换，对n个数据点我们有：

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, ..., \mathbf{y}_n] = \mathbf{V}^T\mathbf{X} = \mathbf{V}^T[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_n] \in R^{d\times n}$$

  - 于是，得到LPP的学习模型：

$$\min_{\mathbf{V}} \; tr\left(\mathbf{V}^T\mathbf{X}(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{X}^T\mathbf{V}\right)$$
$$s.t. \quad \mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{I}$$

第二部分：特征选择

7.9 特征选择--引言

回顾特征变换：

从一组已有特征进行变换，得到新特征的过程：

- 降低特征空间的维度，缓解“维数灾难”，减少计算量
- 减少特征之间可能存在的相关性，降低分类器学习的难度
- 处理高维数据的两大主流技术之一

线性特征变换（子空间分析）：采用线性变换将原特征变换至一个新的空间（通常维度更低），PCA、LDA

非线性特征变换：采用非线性变换将原特征变换至一个新的空间（通常性能更好），KPCA、KLDA

7.9 特征选择--引言

- **特征选择任务：**
  - 给定一个学习任务，对于给定的数据属性（特征）集，从中选出与任务相关（对学习任务有利）的特征子集。
- **特征选择目的：**
  - 处理高维数据的两大主流技术之一；
  - 减少数据维度，缓解“维数灾难”，减少计算量；
  - 通过去除与任务不相关特征、冗余特征、或者关联性较小的特征，降低学习任务的难度；
  - 通过选择与任务相关的特征，提高分类器性能。

特征变换和特征选择是处理高维数据的两大主流技术

7.9 特征选择--引言

- **特征选择的总体技术路线：子集搜索+子集评价**
  - 子集搜索(subset search)： 从特征集合$\{x_1, x_2,\ldots, x_d\}$中搜索最优的特征子集。
  - 子集评价(subset evaluation)： 对给定的特征子集，依据某种评价准则，对其优劣进行评价。
    - 通常基于类别可分性来进行特征子集评价。
    - 常用采用的判定准则包括：信息增益、信息熵等。

7.9 特征选择--引言

- **特征子集评价判据：**评价一组特征性能好坏的客观标准
  - 直接判据：分类器的分类错误率
  - 间接判据：与分类器的分类性能存在一定关系的判据
    - 不同类别数据的可分程度
    - 不同类别的概率分布的差异性
    - 特征对于分类的不确定性程度
  - 评价准则—分数
    - 基于距离的准则（Distance-based criterion）
    - 基于分布的准则（Distribution-based criterion）
    - 基于熵的准则（Entropy-based criterion）

- **什么是“理想的”评价准则？**
  - 对分类任务，评价准则 J_{ij} 反映在一组特征下，第i和第j类的可分程度：

$$J_{ij}(\mathbf{x}) = J_{ij}(x_1, x_2, \cdots, x_d) = \sum_{k=1}^{d} J_{ij}(x_k)$$

  - **理想的评价准则应满足：**
    - 与分类错误率具有正相关性，以反映特征的分类性能
    - 对于独立特征，评价标准应具有可加性
    - 是一个度量（metric）
    - 是特征数目的单调函数，即新加入特征不会减少可分度：

$$\begin{cases} J_{ij} > 0, & \text{for } i \neq j \\ J_{ij} = 0, & \text{for } i = j \\ J_{ij} = J_{ji} & \\ J_{ij}(x_1, x_2, \cdots, x_d) \leq J_{ij}(x_1, x_2, \cdots, x_d, x_{d+1}) & \end{cases}$$

- **基于距离的评价准则**
  - 记 $\mathbf{x}_k^{(i)} \in R^d$ 和 $\mathbf{x}_l^{(j)} \in R^d$ 分别为类别 ω_i 和 ω_j 的两个样本

    第i类的第k个样本　　第j类的第l个样本
  - 记两者之间的距离为：$d\left(\mathbf{x}_k^{(i)}, \mathbf{x}_l^{(j)}\right)$
  - 定义所有类别上的总距离为：

类先验

第 j 类样本数

$$J_d(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} P_i \sum_{j=1}^{c} P_j \frac{1}{n_i n_j} \sum_{k=1}^{n_i}\sum_{l=1}^{n_j} d\left(\mathbf{x}_k^{(i)}, \mathbf{x}_l^{(j)}\right)$$

  - 若采用欧氏距离平方：$d\left(\mathbf{x}_k^{(i)}, \mathbf{x}_l^{(j)}\right) = \left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{x}_l^{(j)}\right)^T \left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{x}_l^{(j)}\right)$

$$\Downarrow$$

$$J_d(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{c} P_i \left[\frac{1}{n_i}\sum_{k=1}^{n_i}\left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i\right)^T \left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i\right) + \left(\mathbf{m} - \mathbf{m}_i\right)^T \left(\mathbf{m} - \mathbf{m}_i\right)\right]$$

类别i的中心　　所有数据点的中心

• 基于距离的评价准则

- 利用散度矩阵，可将上式整理成更简单的形式
- 定义类间散度如下：

$$\mathbf{S}_b = \sum_{i=1}^{c} P_i (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^T (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})$$

- 定义类内散度如下：

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{c} P_i \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} \left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i\right)^T \left(\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i\right)$$

- 则有：$J_d(\mathbf{x}) = tr\left(\mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w\right)$

特别地，上述计算可以定义在任何特征子集上！

- **基于距离的评价准则**
  - 类似的，根据线性判别准则，可定义如下的评价准则，其核心思想是使类内散度尽可能小，类间散度尽可能大：

$$
\begin{cases}
J_1(\mathbf{x}) = tr\left(\mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w\right), \\
J_2(\mathbf{x}) = tr\left(\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b\right), \\
J_3(\mathbf{x}) = \dfrac{tr\left(\mathbf{S}_b\right)}{tr\left(\mathbf{S}_w\right)}, \\
J_4(\mathbf{x}) = \dfrac{\left|\mathbf{S}_b\right|}{\left|\mathbf{S}_w\right|}, \\
J_5(\mathbf{x}) = \dfrac{\left|\mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w\right|}{\left|\mathbf{S}_w\right|}
\end{cases}
$$

常用的5个判据

7.9 特征选择--引言

- **基于分布的评价准则：基于类条件概率密度函数**
  - 假设定义了有关类条件概率密度函数 $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ 和 $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ 之间的一个“距离”函数：
    - 该“距离”函数应该是非负的；
    - 该距离应反映这两个条件分布之间的重合程度；
      - 当这两个条件分布不重叠时，该距离函数取得最大值
      - 当这两个条件分布一样时，该距离函数应该取零值
    - 比如，该距离函数可用两个分布之间的KL散度来表示。

7.9 特征选择--引言

- 基于分布的评价准则
  - 定义对数似然比： $L_{ij}(\mathbf{x}) = \ln \dfrac{p(\mathbf{x}|\omega_i)}{p(\mathbf{x}|\omega_j)}$
  - KL散度：也被称为相对熵(relative entropy)，定义为对数似然比的数学期望：

$$KL_{ij}(\mathbf{x}) \triangleq E\left[L_{ij}(\mathbf{x})\right] = \int p(\mathbf{x}|\omega_i) \ln \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i)}{p(\mathbf{x}|\omega_j)} d\mathbf{x}$$

  - 注意：KL散度不是一个度量： $KL_{ij}(\mathbf{x}) \neq KL_{ji}(\mathbf{x})$
  - 可将其变成一个度量：

$$J_D(\mathbf{x}) = KL_{ij}(\mathbf{x}) + KL_{ji}(\mathbf{x}) = \int \left[p(\mathbf{x}|\omega_i) - p(\mathbf{x}|\omega_j)\right] \ln \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i)}{p(\mathbf{x}|\omega_j)} d\mathbf{x}$$

7.9 特征选择--引言

- **基于熵的评价准则：基于后验概率密度函数**
  - 后验概率密度函数 $p(\omega_i|\mathbf{x})$ 反映特征 $\mathbf{x}$ 刻画类别 i 的有效性
  - 两个极端例子：
    - 如果后验概率对于所有的类别都一样，即 $p(\omega_i|\mathbf{x})=1/c$，则说明该特征对类别没有任何鉴别性；
    - 如果后验概率对于类别i为1，而对其他类别均为0，即 $p(\omega_i|\mathbf{x})=1$，则说明特征x非常有效(informative)；
  - 对于某个给定特征，样本属于各类的后验概率越平均，越不利于分类；如果越集中于某一类，则越有利于分类。
  - 因此，可利用**后验概率的信息熵**来度量特征对类别的可分性。

7.9 特征选择--引言

- **基于熵的评价准则**
  - 信息熵
    - 可用来衡量一个随机事件发生的不确定性，不确定越大，信息熵越大：
    - 香农熵： $H(x) = -\sum_{i=1}^{c} P(w_i|x)\log_2 P(w_i|x)$
    - 平方熵： $H(x) = 2\left[1 - \sum_{i=1}^{c}\left(P(w_i|x)\right)^2\right]$

7.9 特征选择--引言

- **子集搜索**
  - 从给定的含有特征数目d的特征集合中选择最优的特征子集
    - 候选特征数目可能很多
    - 特征的维数可能很高（特征变换、特征降维等）
    - 子集搜索是典型的组合问题 (组合爆炸)。若选择m个特征，则特征的组合数目为:

$$\frac{d!}{(d-m)!m!}$$

7.9 特征选择--引言

- **子集搜索**
  - 根据子集搜索策略不同：
    - 穷举法：搜索所有的特征组合。
    - 前向搜索策略：在特征选择的迭代过程中，**每次只加入一个新特征**，并对得到的特征子集进行评价，**直到不会优于增加之前的子集为止。**
    - 后向搜索策略：从完整特征集合开始，**每次迭代去掉一个无关特征**，**直到去掉特征后导致剩余特征子集的性能显著下降。**
    - 双向搜索策略：将前向特征选择和后向特征选择相结合。
    - 随机搜索策略：使用随机策略进行子集搜索，然后对得到的特征子集进行评价。

7.10 最优特征选择方法

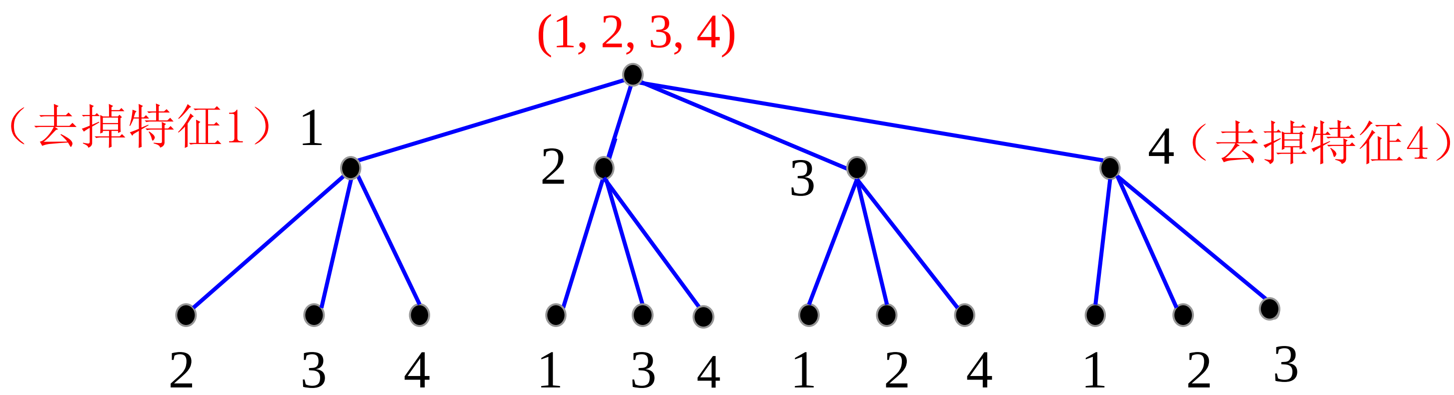
- **最优方法之一：穷举法**
  - 从给定的 d 个特征中，挑选出最优特征子集，若采用穷举法，需要遍历2^d 个子集。当 d 很大时，该方法计算量巨大$O(2^d)$。能否有更聪明的搜索方法？
- **最优方法之二：分支定界法（Branch and Bound）**
  - 基本思想：将所有可能的特征选择组合**以树的形式**进行表示，采用**分枝定界方法**对树进行搜索，使得搜索过程**尽早达到最优解**，而不必搜索整个树。
  - 基本前提：特征评价准则所使用的判据对特征**具有单调性**，即特征增多时，判据值不会减少：

$$X_1 \subset X_1 \subset \cdots \subset X_m \Rightarrow J(X_1) \le J(X_2) \le \cdots \le J(X_m)$$

基于KL散度和基于信息熵的评价准则满足上述要求

7.10 最优特征选择方法

- **分支定界法：特征子集的树表示**
  - 根节点包含全部特征；
  - 每一个节点，在父节点基础上去掉一个特征，并将去掉的特征序号写在节点的旁边；
  - 对 d 维特征，若选择 m 个特征，每一级去掉一个特征，则需要d-m层达到所需特征数量，即树的深度为d-m 。
    - 比如，可能形成如下一棵树：



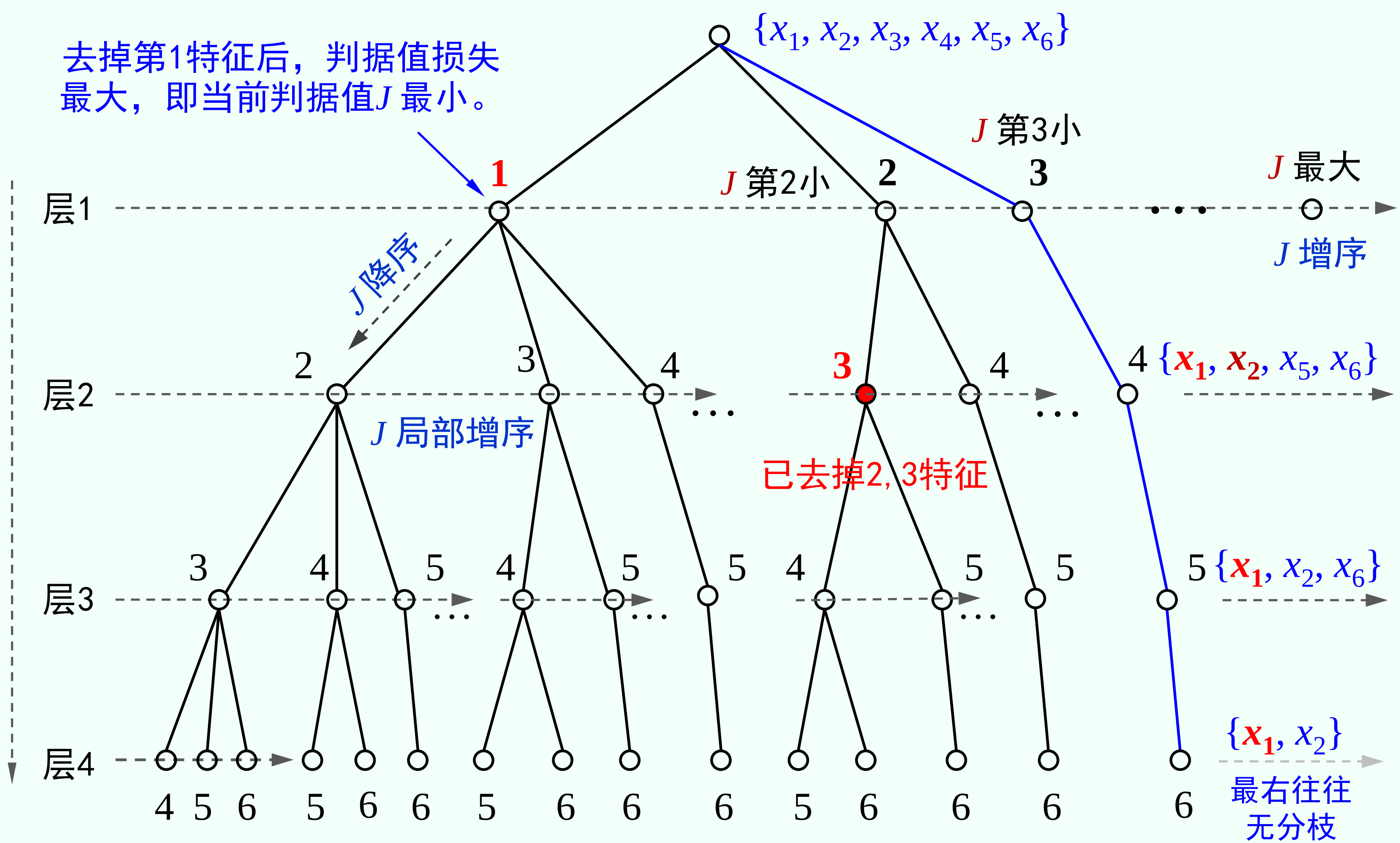
7.10 最优特征选择方法

- **树的生长过程（树的构造）**
  - 1. 将所有特征组成根节点，根节点记为第0层；
  - 2. 对于第1层，分别计算“去掉上一层节点单个特征后”剩余特征的评价判据值，按判据值从小到大进行排序，按从左到右的顺序生成第1层的节点；
  - 3. 对于第2层，针对上一层最右侧的节点开始，重复第2步；
  - 4. 依次类推，直到第 d-m 层，到达叶子结点，记录对应的判据值 J，同时记录对应的特征选择集合
- **回溯**：从第一个叶子结点开始，对树进行回溯

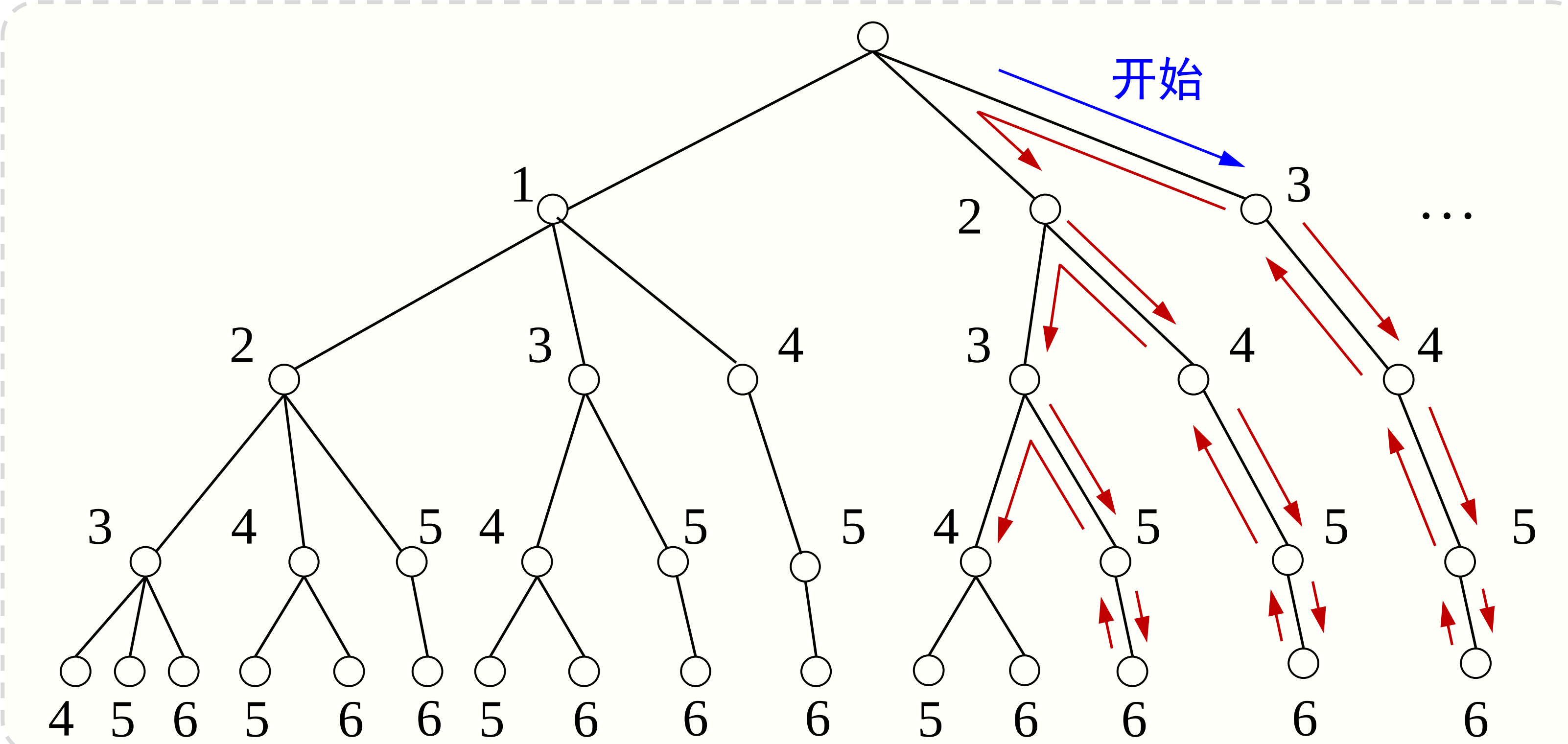
7.10 最优特征选择方法

- **树的生长过程—细节解释**
  - 树的生长：同一层左侧节点对应的特征集合的判据值J小于右侧节点的判据值。
  - 如果去掉某个特征后，准则函数的损失（即J的减少量）最大，则该特征最不可能被去掉，将其放在该层的最左侧。依此类推。
  - 根据评价判据的单调性：下层节点对应的特征集合判据值小于上层节点。
  - 在同一节点D_i下：至多生成 $|D_i|-m+1$个子节点。
  - 在建立下一层时：从最右侧节点开始生长，已在左侧的节点上的特征在本节点之下不再舍弃。
  - 当到达叶节点时：计算当前到达的准则函数值，记作界限B。

树的构造



$\{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6\}$
去掉第1特征后，判据值损失最大，即当前判据值J 最小。
J 第2小
J 第3小
J 最大
J 增序
J 降序
层1
层2
层3
层4
J 降序
J 局部增序
已去掉2, 3特征
$\{x_1, x_2, x_5, x_6\}$
$\{x_1, x_2, x_6\}$
$\{x_1, x_2\}$
最右往往无分枝

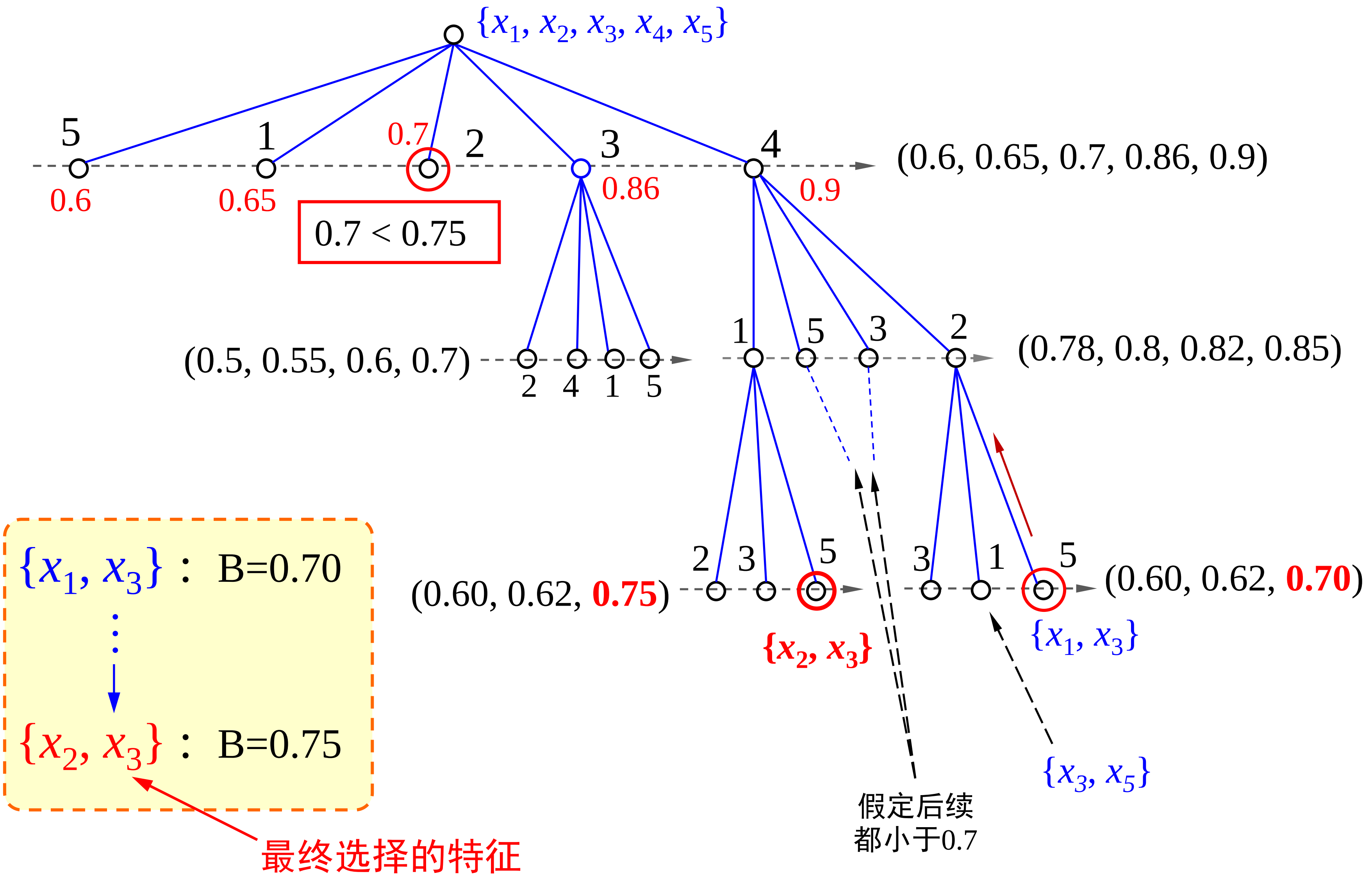


- 树的回溯：从树的最右侧开始，当到达叶子节点时向上回溯。每回溯一步将相应节点上舍弃的特征回收回来。
- 遇到最近的分枝节点时停止回溯，从该节点向下搜索左侧最近的一个分枝（从该分枝的右侧子枝开始）
- 在搜索到某一个节点时，准则函数值若小于界限B，则说明最优解不可能在本节点之下，停止沿本树枝的搜索，从此节点重新向上回溯。
- 若搜索到一个新的叶子节点，且准则函数值更大，则更新B的值，向上回溯。
- 最后一次更新B时，取得的特征组合则为特征选择的最后结果。

- 树的回溯的总体思路：对树搜索时进行分枝限界，从右到左、从上到下
- 算法步骤：
  - 1. 从某个节点开始向面对树进行回溯，直到遇见分枝节点，搜索分枝节点最右侧未处理的一个分枝
  - 2. 对于该分枝下每一层节点，计算对应特征集合的判据值V
  - 3. 如果$V < B$，根据判据的单调性，该节点以下的判据值都小于V，无需往下搜索，往上回溯，转到第1步；否则继续往下搜索，转第2步；若遇见叶节点，转第4步
  - 4. 计算叶节点对应特征集合的判据值B'，如果$B' > B$，更新B和相应的特征选择集合。转第1步；否则，算法终止（如果回溯过程中遇到根节点，且根据界限B不能再向下搜索其它树枝；或J值不能大于当前值为止）

University of Chinese Academy of Sciences

示例：共有5个特征，从中选择2个



7.11 特征选择的次优方法

- 基本假设
  - 单独作用时性能最优的特征，它们组合起来性能也是最优的
- 主要方法
  - 过滤式特征选择方法
    - 单独特征选择法
    - 顺序前进特征选择法
    - 顺序后退特征选择法
    - 增l减r特征选择法
    - 启发式选择方法：Relief方法
  - 包裹式特征选择法
  - 嵌入式特征选择方法

装袋法

次优算法：贪心策略

7.11.1 过滤式选择方法

- **基本思想：**
  - 首先定义一个评价函数，并用它来度量某个给定特征与类别标签之间的相关度；最后选取具有最大相关度的m个特征作为选择结果；
- **核心任务：如何定义特征的评价函数**
- **算法特点：**
  - 过滤式方法先对数据集进行特征选择，然后再训练学习器。特征选择过程与后续学习器无关；
  - 启发式特征选择方法，无法获得最优子集；
  - 与包裹式选择方法相比，计算量降低了很多。

7.11.1.1 单独特征选择法

单独特征选择法

输入：数据集、特征集合、待选择特征个数 m

输出：选择的特征集合Φ

1. 计算每个特征的性能评价判据；
2. 根据特征的性能评价判据，对所有特征进行**排序**
3. 取前 m 个特征加入特征选择集合Φ

7.11.1.2 顺序前进特征选择法

顺序前进特征选择法

输入：数据集、特征集合、待选择特征个数 m

输出：已选择特征集合 Φ

1. 计算每个特征的性能评价判据，选择最优的特征加入特征选择集合 Φ
2. 对于每个剩余特征，分别计算它**与已选择特征组合在一起的性能评价判据**
3. 根据评价判据，**选择最优的特征**加入特征选择集合 Φ
4. 重复2-3步，直到已选择特征数量达到预定数量

- ✓ 优点：相比单独特征选择法更鲁棒一些，考虑了一定的特征组合因素；计算速度依然很快。
- ✓ 缺点：特征一旦入选，就无法被剔除。

7.11.1.3 顺序后退特征选择法

顺序后退特征选择法

输入：数据集、特征集合、待选择特征个数 m

输出：已选择特征集合 Φ

1. 将所有特征加入特征选择集合 Φ
2. 对于已选择特征集合 Φ 中的每一个特征，计算去掉该特征后**剩余特征的性能评价判据**
3. 根据评价判据，**选择使得判据最优所对应的特征**，将其从特征选择集合 Φ 中去除
4. 重复2-3步，直到已选择特征数量达到预定数量

缺点：

✓ 自顶向下的方法，相对顺序前进法（自底向上），**计算量更大**，因为大部分计算都在高维空间（特征个数从最大逐渐较少）；

✓ 特征一旦剔除，就无法再加入。

7.11.1.4 前向-后向特征选择法

增 l 减 r 特征选择法（$l > r$）：

- 基本思想：
  - 为了使已选择或者剔除的特征有机会重新被考虑，将顺序前进特征选择法和顺序后退特征选择法相结合。
- 基本步骤：
  - 采用l次顺序前进特征选择，选择 l 个特征；
  - 对已选择特征集合，采用r次顺序后退特征选择；
  - 重复上述特征选择和剔除过程，直到选择到所需数目的特征。

注意：顺序前进步骤和顺序后退步骤**可以对调**，此时，$r > l$，**对应减 r 增 l 法**。

University of Chinese Academy of Sciences

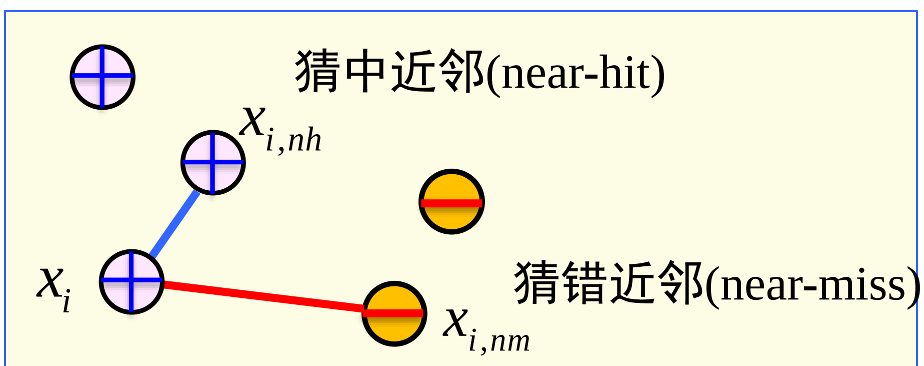
7.11.1.5 Relief 方法

- 一种著名的过滤式特征选择方法，设计了一个“相关统计量”来度量特征的重要性。考虑二类分类问题：
  - 对于样本x_i，定义其同类样本中的最近邻$x_{i,nh}$为它的“猜中近邻”(nearest-hit)；定义其不同类样本中的最近邻$x_{i,nm}$为它的“猜错近邻”(nearest-miss)。
  - Relief采用如下的特征性能判据：

$$\delta^j = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{dis}\left(x_i^j, x_{i,nm}^j\right)^2 - \mathrm{dis}\left(x_i^j, x_{i,nh}^j\right)^2$$

表示第$\boldsymbol{i}$个样本点的第$\boldsymbol{j}$个属性

度量样本属性差异：$dis(x_a^j, x_b^j) = \left|x_a^j - x_b^j\right|$



✓ 若样本点与其猜中(同类）近邻在属性$\boldsymbol{j}$上的距离小于其猜错(类间)近邻的距离，则说明属性j对区分同类和异类样本有益，于是增大属性j所对应的统计量分量。反之亦然。

7.11.1.5 Relief 方法

- **考虑多类问题：**
  - 对于样本x_i，记它在同类样本中的“猜中近邻”(nearest-hit)为$x_{i,nh}$；记它在每个不同类样本中的“猜错近邻” (nearest-miss)为$x_{i,j,nm}$。多类Relief（Relief-F）采用如下的特征性能判据：

$$\delta^j = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \left[\sum_{j \neq c(x_i)} P_j \times \mathrm{dis}\left(x_i^j, x_{i,j,nm}^j\right)^2 \right] - \mathrm{dis}\left(x_i^j, x_{i,nh}^j\right)^2 \right\}$$

第 j 类样本在数据集中所占的比例.

- 优点：
  - 为加快计算速度，Relief只需在数据集的采样上而不是整个数据集上进行，
  - 因此，Relief的时间开销随采样次数以及原始特征数线性增长，运行效率很高。

7.11.1.5 Relief 方法

Relief

输入：数据集、特征集合、待选择特征个数k，

and adjustable relevance threshold τ

输出：已选择特征集合Φ

1. Initialize w=0;
2. for i =1 to d (原始特征维度),
   ① Randomly select an instance I
   ② Find nearest-hit H and nearest-miss J
   ③ For j=1 to n
      a. $w(j) = w(j) - \text{diff}(j, I, H)^2/m + \text{diff}(j, I, J)^2/d$
3. Output w greater than τ

7.11.2 包裹式特征选择方法

- **过滤式**特征选择方法：
  - 先对数据集进行特征选择，然后再训练分类器；**特征选择过程与分类单独进行**，特征选择评价判据**间接**反应分类性能。
- **包裹式特征选择方法：**（以分类性能为准则的特征选择方法）
  - 特征选择过程与分类性能相结合，特征评价判据为分类器性能。对给定分类方法，选择最有利于提升分类性能的特征子集。
  - 通常采用交叉验证来评价选取的特征子集的好坏
    - K折交叉验证(*k*-fold cross validation)， 留一法(Leave-one-out)
  - 包裹式特征选择方法对分类器的**基本要求**：
    - 分类器能够**处理高维特征向量**；
    - 在**特征维度很高、样本个数较少**时，分类器依然可以取得较好的效果。

7.11.2 包裹式特征选择方法

- **主要方法**：
  - **直观方法**：给定特征子集，训练分类器模型，计算分类器错误率为特征性能判据，进行特征选择。
    - 每次分类器训练和错误率计算**需要的计算量大**，不适合大量尝试不同的特征组合。
  - **替代方法(递归策略)**：首先利用所有的特征进行分类器训练，然后考查各个特征在分类器中的贡献，逐步剔除贡献小的特征。
    - 递归支持向量机（R-SVM：Recursive SVM）
    - 支持向量机递归特征剔除（SVM-RFE）
    - Adaboost

7.11.2 包裹式特征选择方法

- **直观方法 (General framework)**：
  - 1. Initialize $F = \emptyset$.
  - 2. Repeat:
    - (a) For $i = 1, \ldots, d$ if $i \notin F$, let $F_i = F \cup \{i\}$, and use some version of cross validation to evaluate features F_i:
      - train your learning algorithm using only the features in F_i, and estimate its generalization error.
    - (b) set F to be the best features (subset) found on step (a).
  - 3. Select and output the best feature subset that was evaluated during the entire search procedure.

可见：
- 启发式方法，无法保证得到最优子集
- 需频繁调用学习算法进行候选特征子集的评价
- 通常特征选择效果很好，但计算量很大

7.11.2 包裹式特征选择方法

替代方法的技术路线（以支持向量机为例）：

1. 用当前**所有特征训练**线性支持向量机。
2. 评估**每个特征在支持向量机中的相对贡献**，按照相对贡献大小进行排序。
3. 根据**事先确定的递归选择特征的数目**，选择出排序靠前的特征，用这组特征**构成新特征**。
4. 重复1-3步，直到达到规定的特征选择数目。

7.11.2 包裹式特征选择方法

特征选择的递归策略：

- 每次选择固定比例的特征
- 人为给定一个逐级减少的特征数目序列

比如，SVM的决策函数：

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}) + b$$

✓ R-SVM根据每个特征的**决策函数值在数据上的分离程度**定义特征的相对贡献。

✓ SVM-RFE根据每个特征**对SVM预测误差的贡献**定义特征的相对贡献。

7.11.2 包裹式特征选择方法

方法1：利用特征的类分离度

对于所有特征，定义两类数据的分离程度为：

$$S = \frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{x}^+ \in \omega_1} f(\mathbf{x}^+) - \frac{1}{n_2}\sum_{\mathbf{x}^- \in \omega_2} f(\mathbf{x}^-)$$

$$S = \sum_{j=1}^{d} \boxed{w_j\left(m_j^+ - m_j^-\right)} + \underline{\left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2}\right) \times d}$$

每个特征的贡献

常数项

$$m_j^+ = \frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{x}^+ \in \omega_1} \mathbf{x}_j^+, \quad m_j^- = \frac{1}{n_2}\sum_{\mathbf{x}^- \in \omega_2} \mathbf{x}_j^-$$

对于特征子集，可类似定义。

7.11.2 包裹式特征选择方法

方法2：利用线性SVM的均方误差

线性SVM进行分类的均方误差：

$$J = \sum_{i=1}^{N} \left\| \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b - y_i \right\|_2^2$$

每个特征对J的贡献程度主要与w_i^2相关。子特征进行分类的均方误差可以类似定义。

7.11.2 包裹式特征选择方法

方法3：利用核SVM的目标函数

核SVM对偶问题的目标函数值：

$$Q=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i\cdot\mathbf{x}_j)$$

去掉第k维特征，目标函数值：

$$Q(k)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i^{(-k)}\cdot\mathbf{x}_j^{(-k)})$$

$\mathbf{x}_i^{(-k)}$ 表示第i个数据去掉第k维特征后的新数据。

$$DQ(k)=Q-Q(k)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\left(K(\mathbf{x}_i\cdot\mathbf{x}_j)-K(\mathbf{x}_i^{(-k)}\cdot\mathbf{x}_j^{(-k)})\right)$$

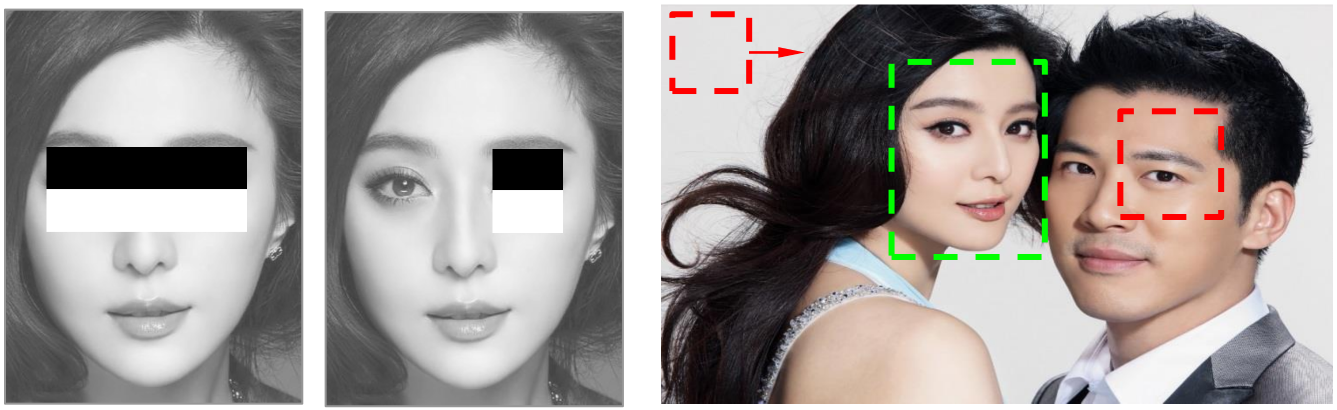
- **方法4：Adaboost for feature selection：**
  - Input: given $\{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$, $y_i \in\{1,-1\}$.
  - Output: The features ranked by their weights
    - Initialize: $\mathbf{W}_1(i) = 1/n$
    - for $t = 1, 2, \ldots, T$
      - Normalize the weights $\mathbf{W}_t$
      - $\forall$ **feature *j*** (or those in the remainder features), train weak classifier $h_j(\mathbf{x})$, and obtain its error e_j
      - Choose the classifier h_t with the lowest e_t
      - Set $\beta_t = e_t / (1-e_t)$, and $\alpha_t = -\log \beta_t$
      - Update the data distribution:

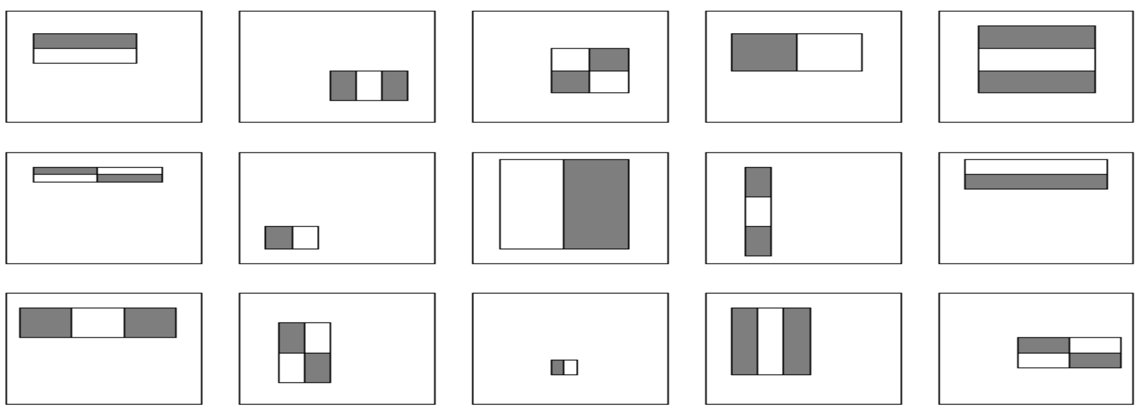
$$\mathbf{W}_{t+1}(i) = \begin{cases} \mathbf{W}_t(i)\beta_t, & \text{if } h_t(\mathbf{x}_i) = y_i \\ \mathbf{W}_t(i), & \text{otherwise} \end{cases}$$

    - end
    - Return: a strong classifier: $H(\mathbf{x}) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{T} \alpha_t h_t(\mathbf{x})\right)$

7.11.2 包裹式特征选择方法

- 基于Haar特征的人脸检测





Haar特征可很好地描述人脸眼部区域的灰度分布情况

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

考虑线性分类方法：

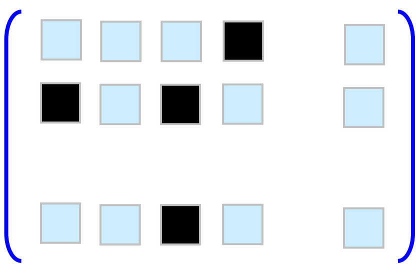
$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

- $w_i = 0$，第 i 个特征对分类没有影响
- $w_i \neq 0$，第 i 个特征属于有用特征

基本思路：在学习 **w** 的时候，对 **w** 进行限制，使其不仅能满足训练样本的误差要求，同时使得 **w** **中非零元素尽可能少**（只使用少数特征）。

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **模型扩展：稀疏学习**
  - 向量稀疏性度量：
    - L_0: $\mathbf{w}$ = []^T, $\|\mathbf{w}\|_0 = 3$
    - L_1: $\|\mathbf{w}\|_1 = \sum_i |w_i|$
    - 采用 L_1 来近似 L_0 — 凸近似
  - 矩阵稀疏性度量：

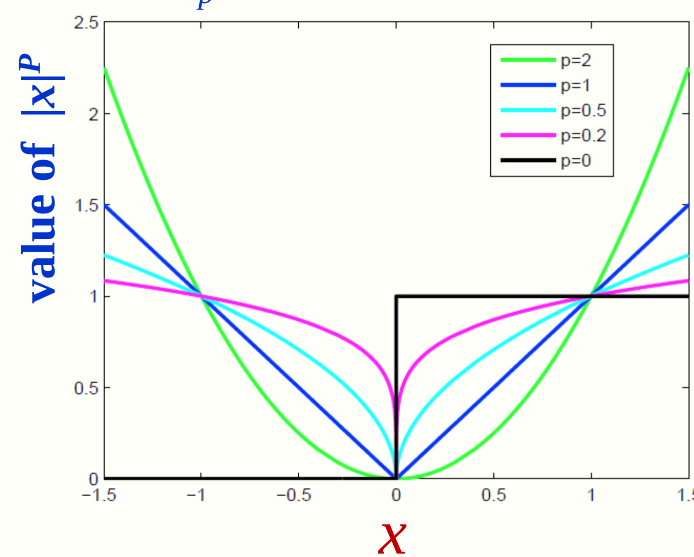
W= 

$$\|\mathbf{W}\|_1 = \sum_{i,j} |W_{ij}|$$

向量的p范数：

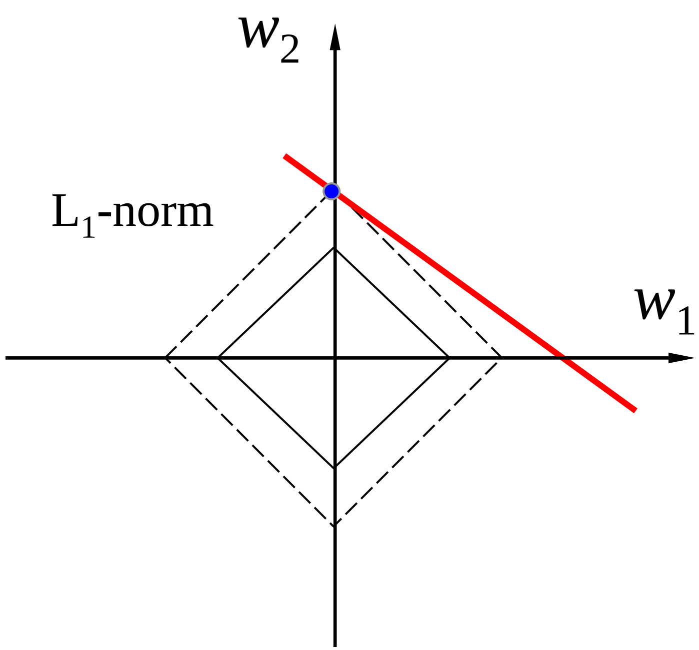
$$\|\mathbf{w}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{m} |w_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

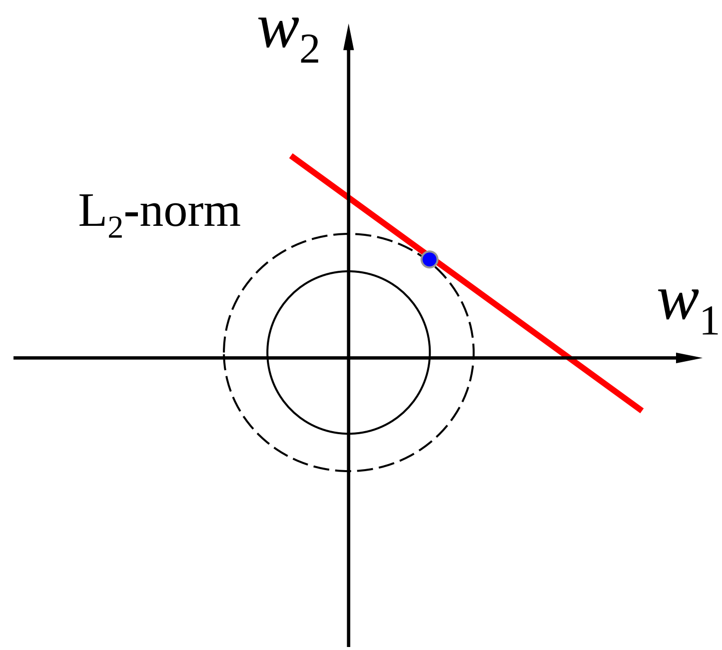
L_p范数示意图（1维）



7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- 最小化L_1范数可得到稀疏解。
- 什么是稀疏性？
  - 解向量的大部分位置值为零，只有少数部分位置的值不为零





$$\min \ \|\mathbf{w}\|_1, \quad s.t. \quad \mathbf{w}^T\mathbf{x}=b$$

$$\min \ \|\mathbf{w}\|_2, \quad s.t. \quad \mathbf{w}^T\mathbf{x}=b$$

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **LASSO的基本形式：**

$$\min_{\mathbf{w},b} \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b - y_i\right)^2, \quad s.t. \left\|\mathbf{w}\right\|_1 \le t$$

  - 样本点**x**为*d*维向量
  - *n*: 样本点的总数目
  - ***t***为指定的自由参数，用于控制正则化的程度

$$\min_w \quad \underbrace{\sum_i \left(w^T x_i - y_i\right)^2}_{\text{分类器损失}} + \boxed{\lambda \| w \|_1} \leftarrow \text{稀疏约束}$$

LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operation)

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **将上式可进一步写成对应的向量形式**

$$\min_{\mathbf{w},b} \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\|\mathbf{X}\mathbf{w}+\mathbf{b}-\mathbf{y}\right\|_2^2, \quad s.t. \left\|\mathbf{w}\right\|_1 \le t$$

分量全为b

其中，$X_{ij} = [\mathbf{x}_i]_j$

- 注意到给定**w** 后，b 的优化有闭式解:

$$b = \bar{y} - \mathbf{w}^T\bar{\mathbf{x}}$$

- 将其带入原目标函数，进一步简化目标函数的形式。

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **于是有：**

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\|\mathbf{X}\mathbf{w}-\mathbf{y}\right\|_2^2, \quad s.t. \ \left\|\mathbf{w}\right\|_1 \le t$$

规范化：分别减去零均值

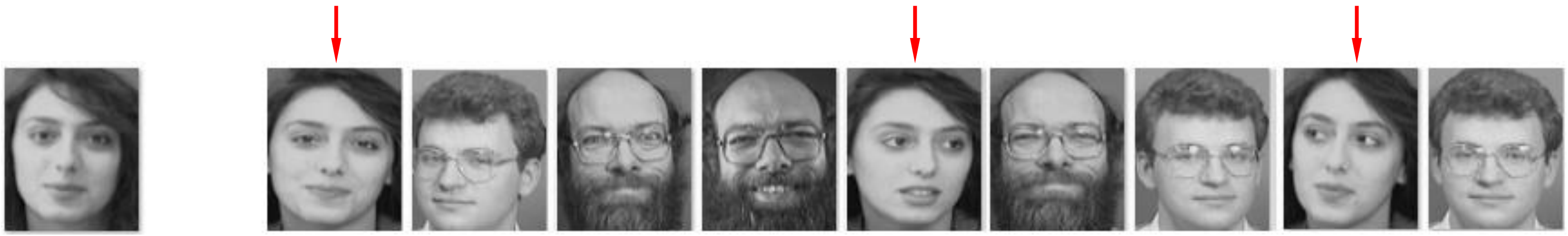
- 能够证明，上述最优化问题，可通过以下问题近似求解:

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\|\mathbf{X}\mathbf{w}-\mathbf{y}\right\|_2^2 + \lambda\left\|\mathbf{w}\right\|_1$$

LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operation)

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **模型扩展: 从稀疏表示的角度来理解**



$$\mathbf{y} = 0.7\mathbf{x}_1 + 0.0\mathbf{x}_2 + 0.0\mathbf{x}_3 + 0.0\mathbf{x}_4 + 0.2\mathbf{x}_5 + 0.0\mathbf{x}_6 + 0.0\mathbf{x}_7 + 0.1\mathbf{x}_8 + 0.0\mathbf{x}_9$$

$$(p_0) \quad \min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{w}\|_0, \quad \text{subject to } \mathbf{Xw} = \mathbf{y}$$

$$(p_0) \quad \min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{Xw} - \mathbf{y}\|_2^2, \quad \text{subject to } \|\mathbf{w}\|_0 < t$$

L_1-范数松驰

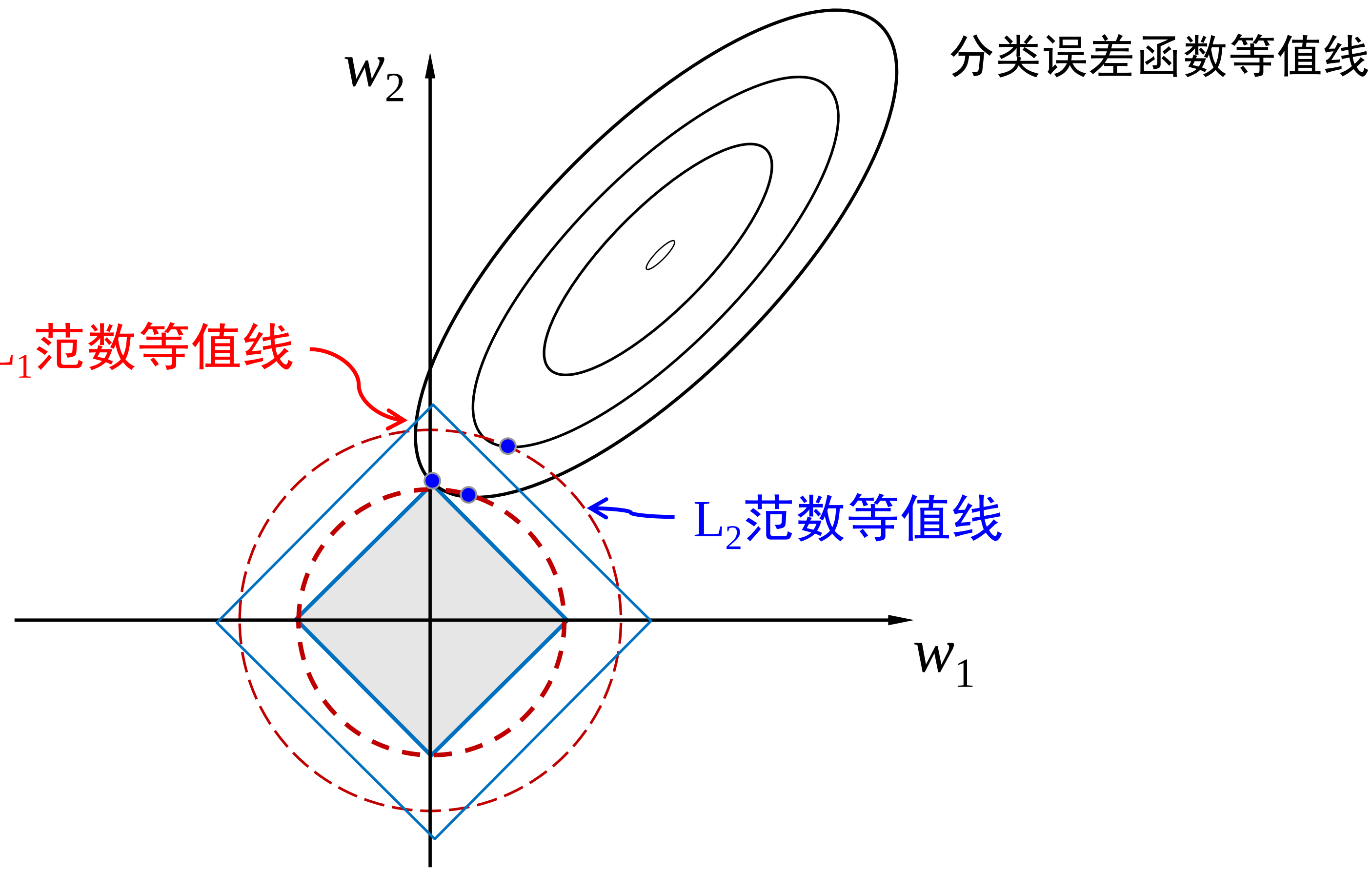
$$(p_1) \quad \min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{Xw} - \mathbf{y}\|_2^2, \quad \text{subject to } \|\mathbf{w}\|_1 < t$$

$$(p_1) \quad \min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{Xw} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_1$$

LASSO算法!

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

L_1范数 VS L_2范数：



7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

- **求解LASSO的几种常用方法：**
  - 次梯度下降法(subgradient descent methods)
    - 梯度下降法的推广
  - 最小角度回归(least-angle regression, LARS)
    - 与LASSO模型密切相关
  - 近端梯度下降法(proximal gradient descent methods)
    - 目前非常流行，效果也是最好的
  - 半二次切分(half-quadratic splitting)

7.12 嵌入式特征选择--基于L_1范数的特征选择

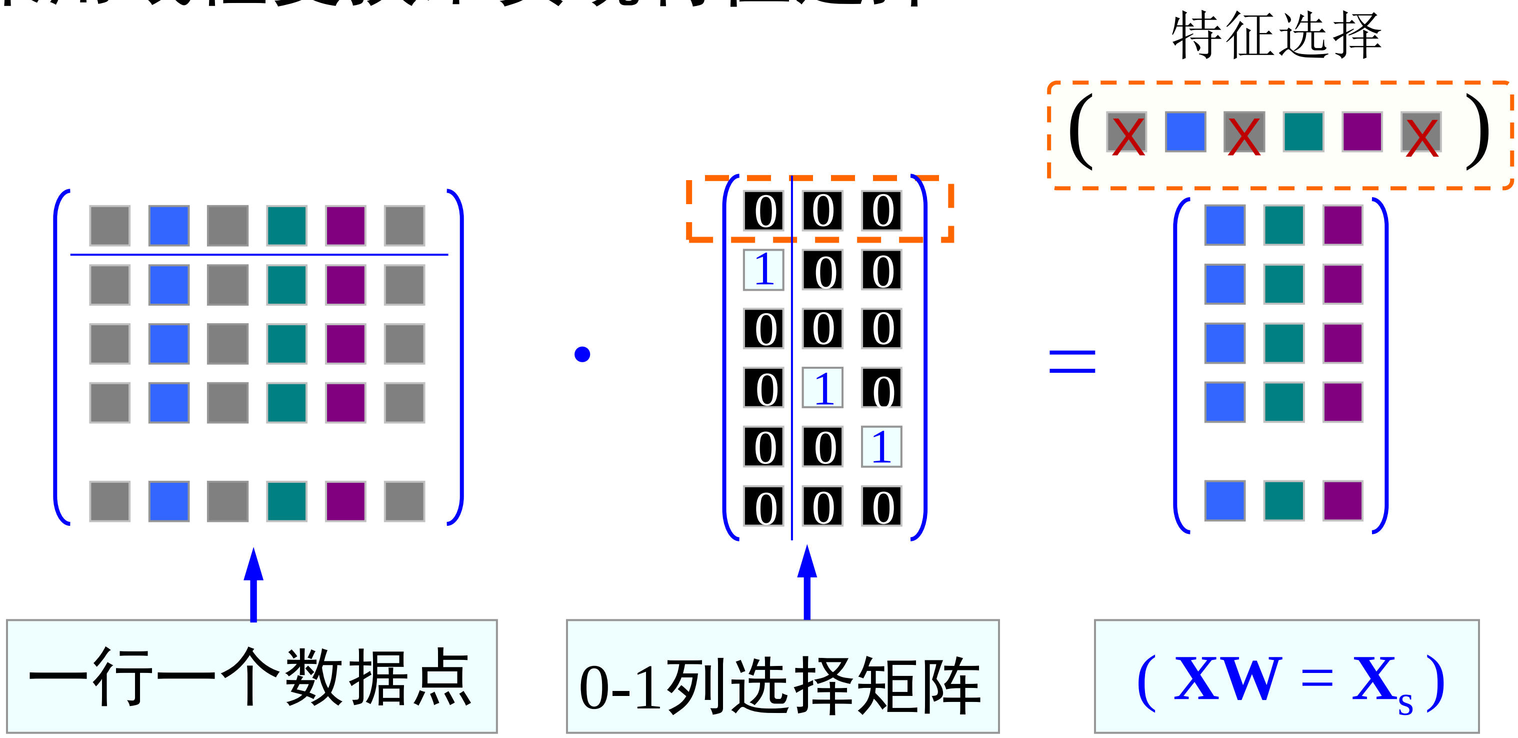
- 算法总体特征
  - 不能直接设置最终选择特征的个数 m；
  - 通过设置正则化系数λ来隐式控制 m；
  - λ 值越大，模型越关注稀疏性，得到的非零系数个数越少；反之，非零稀疏个数越多；
  - 可以设置一个选择特征个数的上限，通过设置不同 λ 值，得到满足要求的特征。
  - 是一种嵌入式特征选择方法：将分类器学习与特征选择融为一体，分类器训练过程自动完成了特征选择。

7.13 基于稀疏学习的特征选择

- **稀疏学习**
  - 针对具体的学习问题，可在线性模型中引入恰当的**稀疏约束条件或稀疏性度量。**
    - 稀疏是一种先验（比如：服从拉普拉斯分布）。
    - 稀疏是对某种已知知识的描述。
    - 从结构化风险最小化的角度，**引入稀疏约束条件是增加所学函数在假设空间的简单性**，所学系数向量越稀疏，则函数越简单。
    - 从正则化的角度看，就是为了防止过拟合，提高线性最小二乘法所学模型的泛化能力。
    - ……

7.13 基于稀疏学习的特征选择

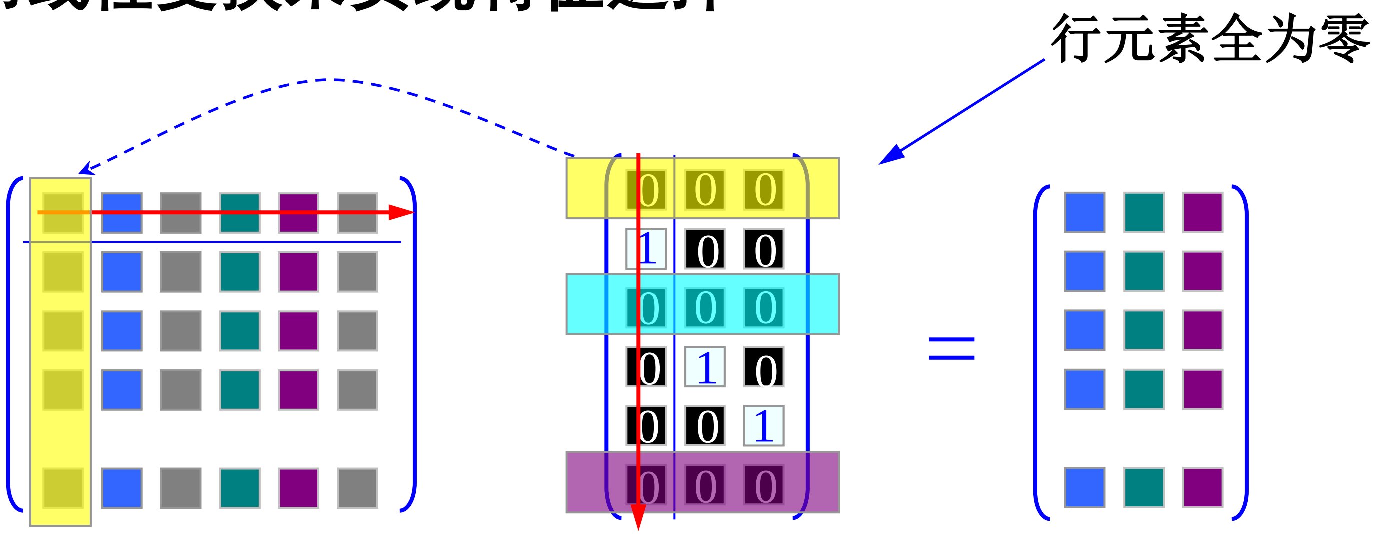
- 采用线性变换来实现特征选择



若列选择矩阵第一行全为零，则第一个特征分量不起作用！

7.13 基于稀疏学习的特征选择

- **采用线性变换来实现特征选择**



$\mathbf{X} \in R^{n\times d}$ $\mathbf{W} \in R^{d\times m}$ $\mathbf{X}_s \in R^{n\times m}$

一行一个数据点

0-1列选择矩阵

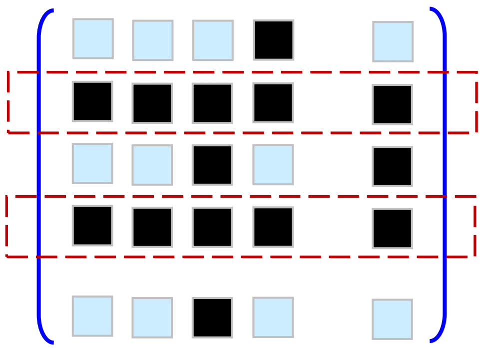
$(\mathbf{XW} = \mathbf{X}_s)$

若列选择矩阵第一行全为零，则第一个特征分量不起作用！

7.13 基于稀疏学习的特征选择

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix} W_{11} & \cdots & W_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{d1} & \cdots & W_{1m} \end{pmatrix}$$

- **矩阵行稀疏性度量：结构化稀疏**

W= 

选择矩阵

$$w_1=\sqrt{\sum_j |W_{1j}|^2}$$

$$w_2=\sqrt{\sum_j |W_{2j}|^2}$$

$$\vdots$$

$$w_d=\sqrt{\sum_j |W_{dj}|^2}$$

$$\mathbf{w}=[w_1, w_2, \cdots, w_d]^T \in R^d$$

要求W的某行为零，只需要该行元素的平方和为零。因此，可以将行平方和开根号收集为一个向量，再考虑其零范数

$\|\mathbf{w}\|_0$ **is NP hard！ So we soft it as its L_1 norm** $\|\mathbf{w}\|_1$, $\Rightarrow \|\mathbf{W}\|_{2,1}$

7.13 基于稀疏学习的特征选择

- **矩阵的$L_{2,1}$范数：**

$$\|\mathbf{W}\|_{2,1} = \|\mathbf{w}\|_1 = \sum_{i=1}^{d} \sqrt{\sum_j |W_{ij}|^2}$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & \cdots & W_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{d1} & \cdots & W_{1m} \end{pmatrix}$$

  – The $L_{2,1}$ norm of matrix is a true norm

$$d(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|_{2,1}$$

满足：自反性、非负性、对称性和三角不等式关系

- 矩阵的$L_{p,r}$范数(伪范数)：

$$\|W\|_{p,r} = \left(\sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{m} |w_{ij}|^p \right)^{\frac{r}{p}} \right)^{\frac{1}{r}}$$

7.13 基于稀疏学习的特征选择

- 回顾：正则化线性回归
  - 线性变换：$\mathbf{y} = \mathbf{W}^T \mathbf{x} + \mathbf{b}$, where $\mathbf{y} \in R^m$, $\mathbf{W} \in R^{d \times m}$, $\mathbf{b} \in R^m$
  - 对n个样本$\{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2), \ldots, (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)\}$，期望：

$$\mathbf{XW} - \mathbf{e}_n \mathbf{b}^T \approx \mathbf{Y}, \quad \text{where } \mathbf{X} \in R^{n \times m}, \ \mathbf{Y} \in R^{n \times c}, \ \mathbf{e}_n \in [1, \ldots, 1] \in R^n$$

  - 模型：在最小化“正则化线性回归框架”下，有：

$$\min_{\mathbf{W}, \mathbf{b}} \ \left\| \mathbf{XW} + \mathbf{e}_n \mathbf{b}^T - \mathbf{Y} \right\|_F^2 + \lambda \| \mathbf{W} \|_F^2$$

$$\text{where } \ \mathbf{X} = \left[\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\right]^T = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix} \in R^{n \times m}$$

（每一行为一个样本点）

7.13 基于稀疏学习的特征选择

线性回归模型

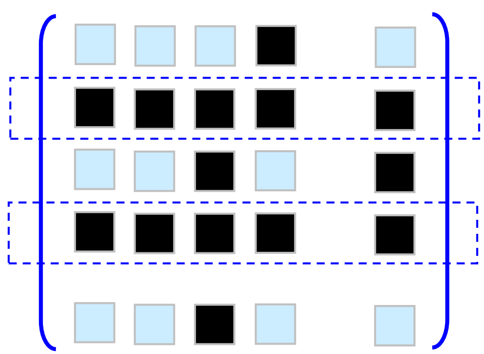
- **学习模型:**

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{b}} \left\|\mathbf{XW}+\mathbf{e}_n\mathbf{b}^T-\mathbf{Y}\right\|_F^2+\lambda\|\mathbf{W}\|_F^2$$

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{b}} \left\|\mathbf{XW}+\mathbf{e}_n\mathbf{b}^T-\mathbf{Y}\right\|_F^2+\lambda\|\mathbf{W}\|_{2,1}$$

- 最后如何实现特征选择的目标？— 排序

W=



选择矩阵

$$w_1=\sqrt{\sum_j |W_{1j}|^2}$$

$$w_2=\sqrt{\sum_j |W_{2j}|^2}$$

$$w_d=\sqrt{\sum_j |W_{dj}|^2}$$

$$\mathbf{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_d]^T\in R^d$$

Shiming Xiang, et al., Discriminative Least Squares Regression for Multiclass Classification and Feature Selection. IEEE Transactions on Neural Network and Learning System,2012

7.14 小结

特征选择的一般技术路线：

1. 确定特征子集
2. 评价特征子集性能

评价特征子集性能常用的可分性判据：

- ✓ 基于类内类间距离的可分性判据
- ✓ 基于熵的可分性判据
- ✓ 基于SVM模型的可分性判据

7.14 小结

确定特征选择子集的方法：

- 基于树的方法（**最优算法**）：基于分枝限界技术对特征子集的树表示进行遍历，只需要查找一小部分特征组合，即可找到全局最优的特征组合
- 遍历法（**次优算法**）：顺序前向法、顺序后退法、增l减r法
- 稀疏约束

根据特征选择与分类器的结合程度：

- 过滤式特征选择方法："选择"与"学习"独立
- 包裹式特征选择方法："选择"依赖"学习"
- 嵌入式特征选择方法："选择"与"学习"同时进行

致谢

- **Courtesy for some slides**
  - Xuyao Zhang
  - Bin Fan
  - Gaofeng Meng
  - …

Thank All of You!

(Questions?)

向世明

smxiang@nlpr.ia.ac.cn

people.ucas.ac.cn/~xiangshiming

时空数据分析与学习课题组(STDAL)

中科院自动化研究所· 模式识别国家重点实验室