原

维度打击，机器学习中的降维算法：ISOMAP & MDS

2016年11月19日 13:15:28 Dark_Scope 阅读数：22231 标签： 算法 数据可视化 数据 机器学习 更多
个人分类： 机器学习

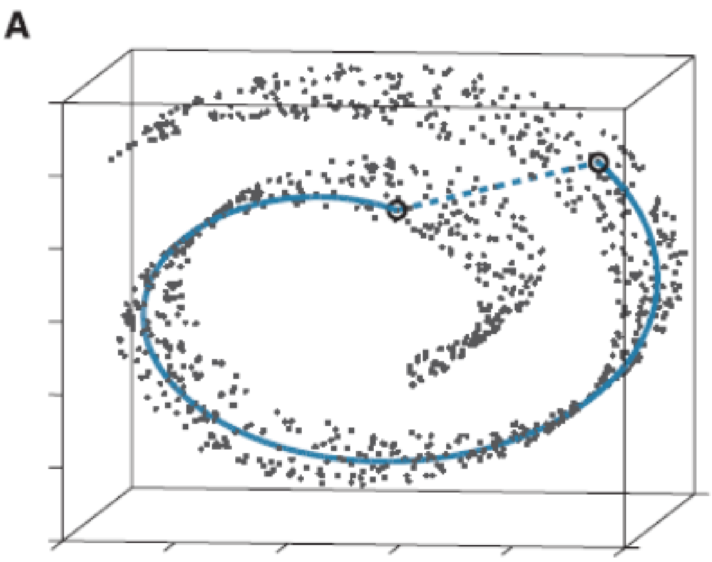
降维是机器学习中很有意思的一部分，很多时候它是无监督的，能够更好地刻画数据，对模型效果提升也有帮助，同时在数据可视化中也有着举足轻重的作用。

一说到降维，大家第一反应总是PCA，基本上每一本讲机器学习的书都会提到PCA，而除此之外其实还有很多很有意思的降维算法，其中就包括isomap，以及isomap中用到的MDS。

ISOMAP是'流形学习'中的一个经典算法，流形学习贡献了很多降维算法，其中一些与很多机器学习算法也有结合，但上学的时候还看了蛮多的机器学习的书，从来没听说过流形学习的概念，还是在最新的周志华版的《机器学习》里才看到,很有意思，记录分享一下。

流形学习

流形学习应该算是个大课题了，它的基本思想就是在高维空间中发现低维结构。比如这个图：



这些点都处于一个三维空间里，但我们人一看就知道它像一块卷起来的布，图中圈出来的两个点更合理的距离是A中蓝色实线标注的距离，而不是两个点之间的欧式距离（A中蓝色虚线）。

此时如果你要用PCA降维的话，它**根本无法发现这样卷曲的结构**（因为PCA是典型的**线性降维**，而图示的结构显然是非线性的），最后的降维结果就会一团乱麻，没法很好的反映点之间的关系。而流形学习在这样的场景就会有很好的效果。

我对流形学习本身也不太熟悉，还是直接说算法吧。

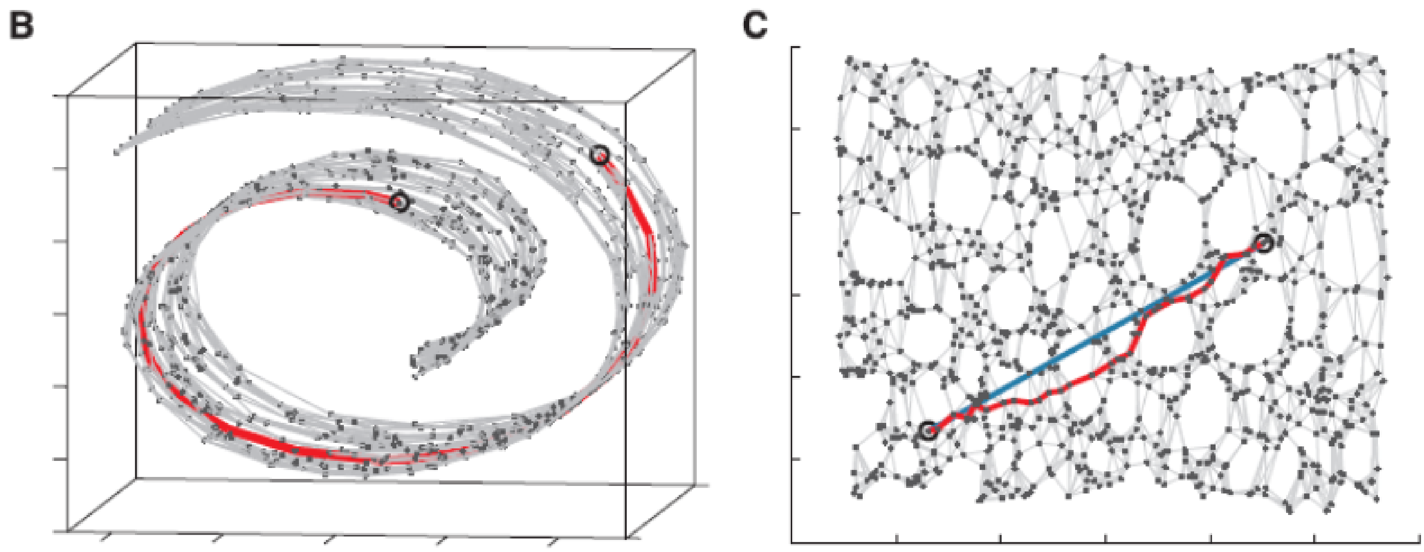
ISOMAP

在降维算法中，一种方式是提供点的坐标进行降维，如PCA；另一种方式是提供点之间的距离矩阵，ISOMAP中用到的MDS(Multidimensional Scaling)就是这样。

在计算距离的时候，最简单的方式自然是计算坐标之间的欧氏距离，但ISOMAP对此进行了改进，就像上面图示一样：

> **1.**通过kNN(k-Nearest Neighbor)找到点的k个最近邻，将它们连接起来构造一张图。
> **2.**通过计算同中各点之间的最短路径，作为点之间的距离d_{ij} dij放入距离矩阵D D
> **3.**将D D传给经典的MDS算法，得到降维后的结果。

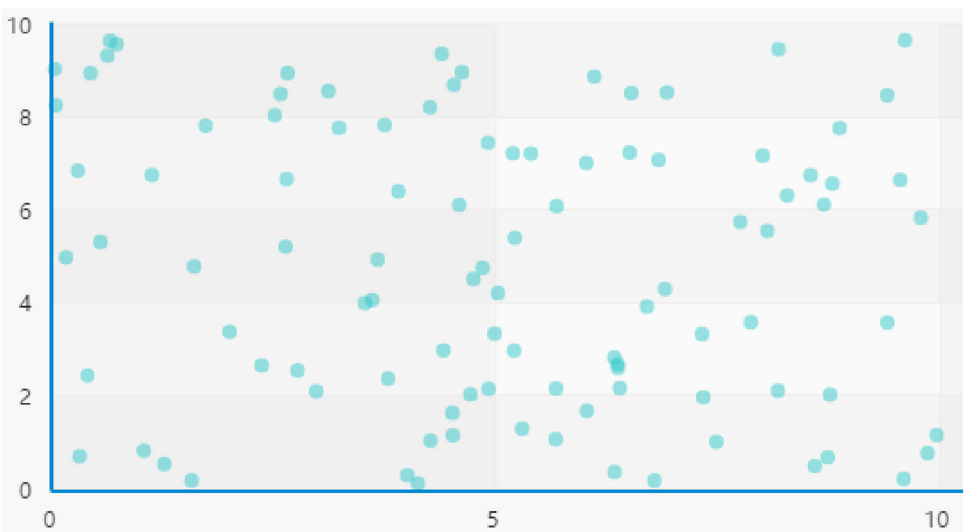
ISOMAP本身的**核心就在构造点之间的距离**，初看时不由得为其拍案叫绝，类似的思想在很多降维算法中都能看到，比如能将超高维数据进行降维可视化的t-SNE。
ISOMAP效果，可以看到选取的最短路径比较好地还原了期望的蓝色实线，用这个数据进行降维会使流形得以保持：



ISOMAP算法步骤可谓清晰明了，所以本文主要着重讲它中间用到的MDS算法，也是很有意思的。

经典MDS（Multidimensional Scaling）

如上文所述，MDS接收的输入是一个距离矩阵D D,我们把一些点画在坐标系里：



如果只告诉一个人这些点之间的距离（假设是欧氏距离），他会丢失那些信息呢？

a.我们对点做平移，点之间的距离是不变的。
b.我们对点做旋转、翻转，点之间的距离是不变的。

所以想要从D还原到原始数据X是不可能的，因为只给了距离信息之后本身就丢掉了很多东西，不过不必担心，即使这样我们也可以对数据进行降维。

我们不妨假设：X是一个$n \times q$的矩阵，n为样本数，q是原始的维度
计算一个很重要的矩阵B：

$$\begin{aligned} B &= XX^T \quad (n \times n) \\ &= (XM)(XM)^T \quad (M\text{是一组正交基}) \\ &= XMM^TX \\ &= XX^T \end{aligned}$$

B=XXT (n×n)=(XM)(XM)T (M是一组正交基)=XMMTX=XXT

可以看到我们通过M对X做正交变换并不会影响B的值，而**正交变换刚好就是对数据做旋转、翻转操作的。**
所以如果我们想通过B反算出X，肯定是没法得到真正的X,**而是它的任意一种正交变换后的结果。**

B中每个元素的值为：

$$b_{ij} = \sum_{k=1}^{q} x_{ik}x_{jk}$$

bij=∑k=1qxikxjk

计算距离矩阵D，其中每个元素值为:

$$\begin{aligned} d_{ij}^2 &= (x_i - x_j)^2 \\ &= \sum_{k=1}^{q} (x_{ik} - x_{jk})^2 \\ &= \sum_{k=1}^{q} x_{ik}^2 + x_{jk}^2 - 2x_{ik}x_{jk} \\ &= b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij} \end{aligned}$$

dij2=(xi−xj)2=∑k=1q(xik−xjk)2=∑k=1qxik2+xjk2−2xikxjk=bii+bjj−2bij

\tag{dij_square}\label{dij_square}
这时候我们有的只有D，如果能通过D计算出B，再由B计算出X，不就达到效果了吗。

所以思路是：从D->B->X
此时我们要对X加一些限制，前面说过我们平移所有点是不会对距离矩阵造成影响的，所以我们就把**数据的中心点平移到原点**，对X做如下限制（去中心化）：

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ik} = 0, \text{for all } k = 1..q$$

∑i=1nxik=0,for all k=1..q

所以有

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} b_{ij} &= \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{q} x_{ik}x_{jk} \\ &= \sum_{k=1}^{q} x_{ik}\left(\sum_{j=1}^{n} x_{jk}\right) \\ &= 0\end{aligned}$$

∑j=1nbij=∑j=1n∑k=1qxikxjk=∑k=1qxik(∑j=1nxjk)=0

类似的

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n} b_{ij} &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{q} x_{ik}x_{jk} \\ &= \sum_{k=1}^{q} x_{jk}\left(\sum_{i=1}^{n} x_{ik}\right) \\ &= 0\end{aligned}$$

∑i=1nbij=∑i=1n∑k=1qxikxjk=∑k=1qxjk(∑i=1nxik)=0

可以看到即B B的任意行(row)之和以及任意列(column)之和都为0了。

设T为B B的trace，则有：

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n} d_{ij}^2 &= \sum_{i=1}^{n} b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij} \\ &= T + nb_{jj} + 0\end{aligned}$$

∑i=1ndij2=∑i=1nbii+bjj−2bij=T+nbjj+0

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2 &= \sum_{j=1}^{n} b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij} \\ &= nb_{ii} + T + 0\end{aligned}$$

∑j=1ndij2=∑j=1nbii+bjj−2bij=nbii+T+0

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2 = 2nT$$

∑i=1n∑j=1ndij2=2nT

得到B：根据公式 (???) (???)我们有：

$$b_{ij} = -\frac{1}{2}(d_{ij}^2 - b_{ii} - b_{jj})$$

bij=−12(dij2−bii−bjj)

而（根据前面算$\sum_{i=1}^{n} d_{ij}^2$ ∑i=1ndij2,$\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2$ ∑j=1ndij2和$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2$ ∑i=1n∑j=1ndij2的公式可以得到）

$$
\begin{aligned}
b_{ii} &= \frac{T}{n} + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2 \\
b_{jj} &= \frac{T}{n} + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d_{ij}^2 \\
\frac{2T}{n} &= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2
\end{aligned}
$$

bii=Tn+1n∑j=1ndij2bjj=Tn+1n∑i=1ndij22Tn=1n2∑i=1n∑j=1ndij2

所以

$$
\begin{aligned}
b_{ij} &= -\frac{1}{2}(d_{ij}^2 - b_{ii} - b_{jj}) \\
&= -\frac{1}{2}\left(d_{ij}^2 - \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2 - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d_{ij}^2 + \frac{2T}{n}\right) \\
&= -\frac{1}{2}\left(d_{ij}^2 - \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2 - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d_{ij}^2 + \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2\right) \\
&= -\frac{1}{2}(d_{ij}^2 - d_{i\cdot}^2 - d_{\cdot j}^2 + d_{\cdot\cdot}^2)
\end{aligned}
$$

bij=−12(dij2−bii−bjj)=−12(dij2−1n∑j=1ndij2−1n∑i=1ndij2+2Tn)=−12(dij2−1n∑j=1ndij2−1n∑i=1ndij2+1n2∑i=1n∑j=1ndij2)=−12(dij2−di·2−d·j2+d··2)

可以看到$d_{i\cdot}^2$是D^2行均值；$d_{\cdot j}^2$是列均值；$d_{\cdot\cdot}^2$是矩阵的均值。

这样我们就可以通过矩阵D得到矩阵B了

因为B是对称的矩阵，所以可以通过特征分解得到：

$$
\begin{aligned}
B &= V\Lambda V^{-1} \\
&= V\Lambda V^{T}
\end{aligned}
$$

B=VΛV−1=VΛVT

在最开始我们其实做了一个假设，**即D是由一个$n \times q$的数据X生成的**，如果事实是这样的，D会是一个对称实矩阵，此时得到的B刚好会有q个非0的特征值，也就是说B的秩等于q，如果我们想还原X，就选择前q个特征值和特征向量；如果想要达到降维的目的，就选择制定的p个($p < q$)。

此时我们选择前p个特征值和特征向量，（这一步和PCA里面很类似）：

$$
\begin{gathered}
B^{*} = V^{*}\Lambda^{*}V^{*T} \\
V^{*}(n \times p), \Lambda^{*}(p \times p)
\end{gathered}
$$

B∗=V∗Λ∗V∗TV∗(n×p),Λ∗(p×p)

所以有（Λ是特征值组成的对角矩阵）：

$$
\begin{aligned}
B^{*} &= V^{*}\Lambda^{*\frac{1}{2}} * \Lambda^{*\frac{1}{2}}V^{*T} \\
&= X^{*}X^{*T}
\end{aligned}
$$

B∗=V∗Λ∗12∗Λ∗12V∗T=X∗X∗T

因此

$$X^* = V^* \Lambda^{*\frac{1}{2}}$$

X∗=V∗Λ∗12

如果选择$p = q$的话，此时得到的X^*就是原数据去中心化并做了某种正交变换后的值了。

MDS的例子

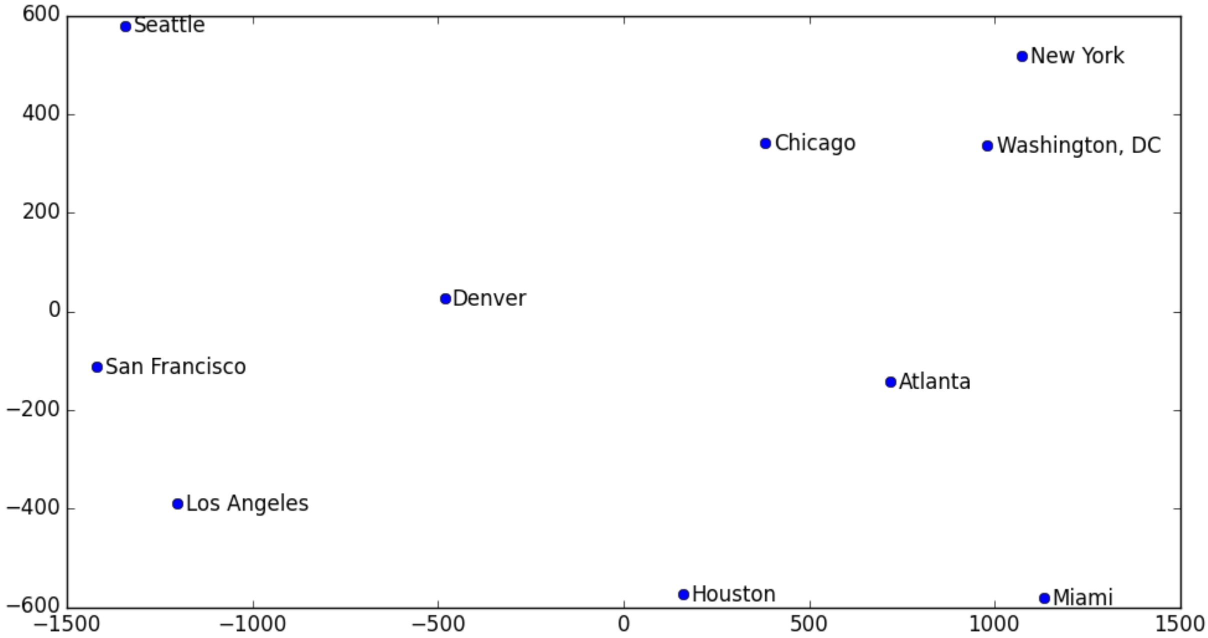
举个例子：拿美国一些大城市之间的距离作为矩阵传进去，简单写一写代码：

	Atlanta	Chicago	Denver	Houston	Los Angeles	Miami	New York	San Francisco	Seattle	Washington, DC
Atlanta	0	587	1212	701	1936	604	748	2139	2182	543
Chicago	587	0	920	940	1745	1188	713	1858	1737	597
Denver	1212	920	0	879	831	1726	1631	949	1021	1494
Houston	701	940	879	0	1374	968	1420	1645	1891	1220
Los Angeles	1936	1745	831	1374	0	2339	2451	347	959	2300
Miami	604	1188	1726	968	2339	0	1092	2594	2734	923
New York	748	713	1631	1420	2451	1092	0	2571	2408	205
San Francisco	2139	1858	949	1645	347	2594	2571	0	678	2442
Seattle	2182	1737	1021	1891	959	2734	2408	678	0	2329
Washington, DC	543	597	1494	1220	2300	923	205	2442	2329	0

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def mds(D,q):
    D = np.asarray(D)
    DSquare = D**2
    totalMean = np.mean(DSquare)
    columnMean = np.mean(DSquare, axis = 0)
    rowMean = np.mean(DSquare, axis = 1)
    B = np.zeros(DSquare.shape)
    for i in range(B.shape[0]):
        for j in range(B.shape[1]):
            B[i][j] = -0.5*(DSquare[i][j] - rowMean[i] - columnMean[j]+totalMean)
    eigVal,eigVec = np.linalg.eig(B)
    X = np.dot(eigVec[:,:q],np.sqrt(np.diag(eigVal[:q])))

    return X


D = [[0,587,1212,701,1936,604,748,2139,2182,543],
```

```
[587,0,920,940,1745,1188,713,1858,1737,597],
[1212,920,0,879,831,1726,1631,949,1021,1494],
[701,940,879,0,1374,968,1420,1645,1891,1220],
[1936,1745,831,1374,0,2339,2451,347,959,2300],
[604,1188,1726,968,2339,0,1092,2594,2734,923],
[748,713,1631,1420,2451,1092,0,2571,2408,205],
[2139,1858,949,1645,347,2594,2571,0,678,2442],
[2182,1737,1021,1891,959,2734,2408,678,0,2329],
[543,597,1494,1220,2300,923,205,2442,2329,0]]

label = ['Atlanta','Chicago','Denver','Houston','Los Angeles','Miami','New York','San Francisc
X = mds(D,2)
plt.plot(X[:,0],X[:,1],'o')
for i in range(X.shape[0]):
    plt.text(X[i,0]+25,X[i,1]-15,label[i])
plt.show()
```

最后画出来的图中，各个城市的位置和真实世界中的相对位置都差不多:



注意，这个例子中其实也有'流形'在里面，因为我们的地球其实是一个三维，而城市间距离刻画的是在球面上的距离，所以最后如果你去看求出来的特征值，并不像前面说的那样只有q个非0的值。

reference

1. 一个nthu的课程，除了pdf还有视频，本文绝大多数关于MDS的内容都是从这里整理的：
   http://101.96.10.65/www.stat.nthu.edu.tw/~swcheng/Teaching/stat5191/lecture/06_MDS.pdf
2. 一个MDS的例子，用于数据可视化，例子的数据来源于这里。
   http://www.benfrederickson.com/multidimensional-scaling/
3. 周志华《机器学习》