第8章：隐变量方法（简介）

8.1 PCA方法降维

Principal Component Analysis：PCA

数据样本集，即

$$\left\{ \boldsymbol{x}(n), n = 1, \cdots, T \right\}$$

设任何一个样本是M维向量

$$\boldsymbol{x}(n) = [x_1(n), x_2(n), \cdots, x_M(n)]^T$$

可以用一个K<M向量

$$\hat{\boldsymbol{y}}(n) = \left[y_1(n), y_2(n), \cdots, y_K(n) \right]^T$$

进行逼近表示，并对训练集外向量有好的泛化性

PCA-特征分解

为处理简单，假设 $E\left[\boldsymbol{x}(n)\right]=\mathbf{0}$

在零均值假设下，自相关矩阵代替协方差矩阵，即

$$\mathbf{R_x}=\Sigma_\mathbf{x}$$

对于训练集，自相关矩阵计算为

$$\mathbf{R_x}=\frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(i)=\frac{1}{T}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$$ （<u>或扩展到</u> $\frac{1}{T}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}$ ）

做特征分解，得所有特征值集：$\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_M\}$ $\lambda_i\ge 0$

相应特征向量集： $\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_M\}$

PCA-特征分解（续）

取特征向量 $\boldsymbol{q}_k$ 是归一化的，并构成特征矩阵

$$\mathbf{Q}=\left[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_M\right]$$

并且 $\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}=\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}=\mathbf{I}$

对于训练集中或同生成概率所产生的向量 $\boldsymbol{x}$
定义向量 $\boldsymbol{y}$ 为

$$\boldsymbol{y}=\mathbf{Q}^T\boldsymbol{x}$$

则有： $\mathbf{Q}\boldsymbol{y}=\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$

这里 $\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}$ 是一对正反变换对

PCA-特征分解（续）

利用 $$\mathbf{R}_{\mathbf{x}} = \mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^T$$

可得 $$E\left[\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{T}}\right] = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_M) = \Lambda$$

并且 $$E\left[\left|y_i\right|^2\right] = \lambda_i$$

和 $$E\left[\left\|\boldsymbol{x}\right\|_2^2\right] = E\left[\sum_{i=1}^{M}\left|x_i\right|^2\right] = E\left[\left\|\boldsymbol{y}\right\|_2^2\right] = \sum_{i=1}^{M}\lambda_i$$

PCA表示

如果让特征值按大小排序 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_M$

仅取 $\boldsymbol{y}$ 的前K<M个系数 $\hat{\boldsymbol{y}} = [y_1, y_2, \cdots, y_K]^T$

即 $\hat{\boldsymbol{y}} = \mathbf{Q}_\mathbf{K}^\mathbf{T} \boldsymbol{x}$ 或 $y_i = \boldsymbol{q}_i^T \boldsymbol{x}, \quad i = 1, 2, \cdots, K$

这里 $\mathbf{Q}_\mathbf{K} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_K]$ 是 $M \times K$ 维矩阵且 $\mathbf{Q}_\mathbf{K}^\mathbf{T}\mathbf{Q}_\mathbf{K} = \mathbf{I}$（$K \times K$）

通过 $\hat{\boldsymbol{y}}$ ，可得 $\boldsymbol{x}$ 的近似表示 $\hat{\boldsymbol{x}}$（注 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 仍是M维向量）

$$\hat{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_K]\hat{\boldsymbol{y}} = \mathbf{Q}_\mathbf{K}\hat{\boldsymbol{y}} = \sum_{i=1}^{K} y_i \boldsymbol{q}_i$$

通过K维向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 近似表示 $\boldsymbol{x}$ ，称为 $\boldsymbol{x}$ 的PCA表示

PCA表示（续）

PCA表示的能量

$$E\left[\left\|\hat{\boldsymbol{x}}\right\|_2^2\right]=E\left[\sum_{i=1}^{M}\left|\hat{x}_i\right|^2\right]=E\left[\left\|\hat{\boldsymbol{y}}\right\|_2^2\right]=\sum_{i=1}^{K}\lambda_i$$

定义误差向量

$$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}$$

误差向量评估

$$E\left[\left\|\boldsymbol{e}\right\|_2^2\right]=\sum_{i=K+1}^{M}\lambda_i$$

PCA的解释

通过训练样本集合 $\{\boldsymbol{x}(n), \ n=1, 2\cdots, \mathrm{T}\}$

得到K个主分量 $\boldsymbol{q}_i \quad i=1,2,\cdots,K$

对于 $\boldsymbol{x}$ （来自训练集或一个泛化样本），近似表示

$$\hat{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_K]\hat{\boldsymbol{y}} = \sum_{i=1}^{K} y_i \boldsymbol{q}_i$$

用K维向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 表示 $\boldsymbol{x}$，其中 y_i 是 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{q}_i$ 的投影

主分量分析的要点是用低维向量表示高维向量，是一种对高维数据的有效降维方法

8.2 盲源分离和ICA

Independent Component Analysis，ICA

存在独立源分量

$$\boldsymbol{s}(n)=[s_1(n),s_2(n),\cdots,s_N(n)]^T$$

经过一个混合系统，产生可测量到的向量

$$\boldsymbol{x}(n)=[x_1(n),x_2(n),\cdots,x_M(n)]^T$$

混合系统表示为

$$\boldsymbol{x}(n)=\boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{s}(n),\boldsymbol{s}(n-1),\cdots,\boldsymbol{s}(n-L),n\right)$$

最简单的混合系统 $\boldsymbol{x}(n)=\mathbf{A}\boldsymbol{s}(n)$

<u>混合系统未知，由测量向量估计源向量，欠定问题</u>

独立分量分析：ICA

假设各源分量是统计独立的，即

$$p_{\mathbf{s}}(\mathbf{s}) = p_{s_1}(s_1)p_{s_2}(s_2)\cdots p_{s_N}(s_N)$$

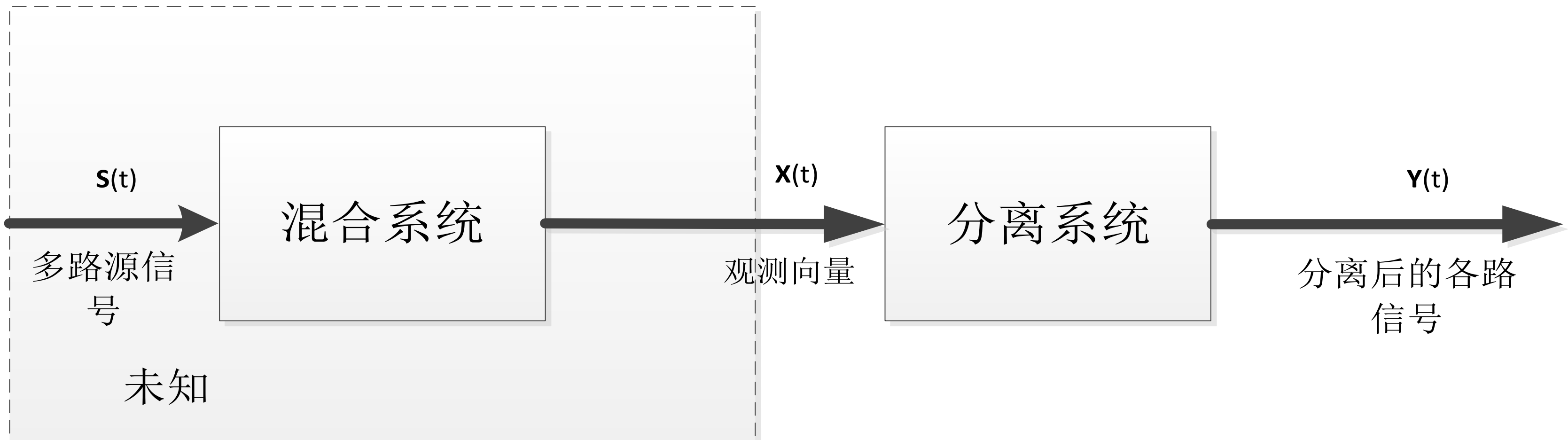
ICA定义为求解如下优化问题

$$\max_{\mathbf{W}}\left\{J_{indep}\left(\boldsymbol{y} = \mathbf{W}\boldsymbol{x}(n)\right)\right\}$$

$J_{indep}(\boldsymbol{y})$ 是描述 $\boldsymbol{y}$ 的独立性的度量函数，$\boldsymbol{y}$ 是 $\boldsymbol{s}$ 的估计

给出样本集，$\{\boldsymbol{x}(n),\ n=1,2\cdots,\mathrm{T}\}$，首先学习 $\mathbf{W}$

在线ICA系统框图



ICA的常用算法

- 不动点算法-Fast-ICA
- 自然梯度算法
- 最大似然ICA算法
- 信息最大化ICA算法
- 非线性PCA算法
- 稀疏ICA算法
- 等等

不动点算法-Fast-ICA算法简介

讨论抽取一个独立分量 $y = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$ 且 $\|\boldsymbol{w}\| = 1$

目标函数是输出非高斯性最大化，目标函数为

$$J(\boldsymbol{w}) = E\left[G(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})\right] + \lambda\left(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{w} - 1\right)$$

$G(\cdot)$ 是一个选定的非线性函数

利用牛顿迭代算法，得到

$$\boldsymbol{w}^+ = E\left[g'(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})\right] \boldsymbol{w} - E\left[\boldsymbol{x} g(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})\right]$$

$$\boldsymbol{w} = \frac{\boldsymbol{w}^+}{\left\|\boldsymbol{w}^+\right\|}$$

Fast-ICA的几个推荐非线性函数

非线性函数 $G(y)$	1阶导数 $g(y)$	2阶导数 $g'(y)$
$\frac{1}{a}\log\cosh(ay)$ $1 \le a \le 2$	$\tanh(ay)$	$a\left(1-\tanh^2(ay)\right)$
$-\exp(-y^2/2)$	$y\exp(-y^2/2)$	$(1-y^2)\exp(-y^2/2)$
$y^4/4$	y^3	$3y^2$

Fast-ICA算法描述

初始步：观测数据向量首先白化，$\boldsymbol{x}$ 是白化向量，确定，$K \le M$ ，$k = 1$

第1步，选择范数为1的随机初始权向量 $\boldsymbol{w}_k$

第2步，迭代计算

$$\boldsymbol{w}_k^+ = E\left[g'(\boldsymbol{w}_k^T \boldsymbol{x})\right] \boldsymbol{w}_k - E\left[\boldsymbol{x} g(\boldsymbol{w}_k^T \boldsymbol{x})\right]$$

$$\boldsymbol{w}_k^{++} = \boldsymbol{w}_k^+ - \sum_{j=1}^{k-1} \left(\boldsymbol{w}_k^{+T} \boldsymbol{w}_j\right) \boldsymbol{w}_j \qquad \boldsymbol{w}_k = \frac{\boldsymbol{w}_k^{++}}{\left\|\boldsymbol{w}_k^{++}\right\|}$$

第3步，若 $\boldsymbol{w}_k$ 尚未收敛，返回第2步

第4步，若 $k < K$ 　$k \leftarrow k + 1$ ，返回第1步

隐变量分析问题

- 混合模型的参数估计应用了离散隐变量方法
- PCA和ICA等方法实际是一种连续隐变量方法。
- 隐变量问题，是信号处理、机器学习和现代统计学中公共关注的一个问题。

本章附录：向量样本的白化

由样本估计相关矩阵 $\mathbf{R}_{\mathrm{x}}$，并进行特征分解，得

$$\Lambda = diag\{\lambda_1, \cdots, \lambda_M\}$$

$$\mathbf{Q} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_M]$$

定义变换矩阵

$$\mathbf{T} = \Lambda^{-1/2}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}$$

则 $\boldsymbol{z}(n) = \mathbf{T}\boldsymbol{x}(n) = \Lambda^{-1/2}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)$ 是白化的，即

$$E\left[\boldsymbol{z}(n)\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}(n)\right] = E\left[\Lambda^{-1/2}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n)\mathbf{Q}\Lambda^{-1/2}\right] = \Lambda^{-1/2}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_{\mathrm{x}}\mathbf{Q}\Lambda^{-1/2}$$

$$= \Lambda^{-1/2}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\Lambda^{-1/2} = \mathbf{I}$$

在许多机器学习应用中，预白化是有效的预处理