机器学习 实验四报告

> PB21000039 陈骆鑫

实验内容

实现主成分分析（PCA）以及多维缩放（MDS）两种降维方法。

实验原理

PCA 算法

PCA 算法是找到一组低维正交基，只使用在其上的投影表示样本点的一种降维方法。也就是对于 $\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_m)$，找到一组正交基 $\boldsymbol{W}=(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_{d'})$（$\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I}_{d'}$），使用 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{X}$ 作为低维坐标。

PCA 算法能够从最近重构性和最大可分性两种性质独立推导出来。由于之后我们要分析并比较重构误差，这里从最近重构性推导。

最近重构性指使用投影表示使用低维坐标重构这些点，与原始样本点之间的距离要尽可能近。容易推导出重构坐标 $\hat{\boldsymbol{x}}_i=\boldsymbol{W}\boldsymbol{z}_i$，则需要最小化：

$$\sum_{i=1}^m\|\hat{\boldsymbol{x}}_i-\boldsymbol{x}_i\|^2=\sum_{i=1}^m\|\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_i\|^2=\sum_{i=1}^m(\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_i-2\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{x}_i)$$

则只需最大化 $\sum\limits_{i=1}^m\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{x}_i=\operatorname{tr}(\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W})$，限制条件 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T=\boldsymbol{I}_{d'}$。

根据拉格朗日乘子法，这个问题的解应该满足 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}=\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{W}$。只要求出 XX^T 的特征值并从大到小排序，较大的 d' 个特征值对应的特征向量就是要求的标准正交基。

MDS 算法

MDS 算法直接得到样本在低维空间中的表示 $\boldsymbol{Z}$。该算法的目标是希望任意两个样本在 d' 维空间内的欧氏距离等于原始空间中的欧氏距离，即 $\|\boldsymbol{z}_i-\boldsymbol{z}_j\|=\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\|:=d_{ij}$。

令降维后的内积矩阵为 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{Z}^T\boldsymbol{Z}$，则它满足 $d_{ij}^2=(\boldsymbol{z}_i-\boldsymbol{z}_j)^T(\boldsymbol{z}_i-\boldsymbol{z}_j)=b_{ii}+b_{jj}-2b_{ij}$。

由于平移不改变距离，不妨设降维后的样本被中心化，即 $\sum\limits_{i=1}^m\boldsymbol{z}_i=\boldsymbol{0}$。则 $\boldsymbol{B}$ 的行和和列和均为 0，即 $\sum\limits_{i=1}^m b_{ij}=\sum\limits_{j=1}^m b_{ij}=0$。则可以推导出：

$$\sum_{i=1}^m d_{ij}^2=\operatorname{tr}(\boldsymbol{B})+mb_{jj}$$
$$\sum_{j=1}^m d_{ij}^2=\operatorname{tr}(\boldsymbol{B})+mb_{ii}$$
$$\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^m d_{ij}^2=2m\operatorname{tr}(\boldsymbol{B})$$

结合 $d_{ij}^2 = b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij}$，可以得到 $b_{ij} = \frac{1}{2}(d_{i\cdot}^2 + d_{\cdot j}^2 - d_{\cdot\cdot}^2 - d_{ij}^2)$。其中 $d_{i\cdot}^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} d_{ij}^2$，$d_{\cdot j}^2 = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} d_{ij}^2$，$d_{i\cdot}^2 = \frac{1}{m^2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} d_{ij}^2$。

已知 $\boldsymbol{B}$ 之后求 $\boldsymbol{Z}$，只需做特征值分解 $B = \boldsymbol{V\Lambda V}^T$，若 Λ 的非零元素数量不超过 d'，$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{\Lambda}_{d'}^{1/2}\boldsymbol{V}^T$ 即满足条件。但一般情况下这个条件不被满足，此时我们放宽条件，只要求降维后的距离与原始空间中尽可能接近（而不要求严格相等），则取最大的 d' 个特征值及其对应特征向量即可。

代码实现

注意上面所有推导中，样本矩阵是以每一列为一个样本向量，而一般操作的矩阵是每行一个数据，因此形式上可能会相差一个转置。

PCA 算法

首先对样本中心化，之后直接调用 `numpy.linalg.eig` 计算 X^TX 的特征值分解。通过转置将特征向量变为行向量形式。

```
X_mean = np.average(X, axis = 0)
X = X - X_mean
vals, vecs = np.linalg.eig(X.T @ X)
vecs = vecs.T
```

若需要降维 d 维，选择最大的 d 个特征值和对应特征向量（`numpy` 在特征值分解时已经按照顺序排好了，故均选择前 d 个即可）。则直接有 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{XW}^T, \hat{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{ZW}$。

```
vals, vecs = vals[:d], vecs[:d]
Z = X @ vecs.T
X_construct = Z @ vecs
```

要分析重构误差，需要采用一个评测指标，这里我使用 RMSE（均方根误差）

$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - x_i)^2}$。由于我们要比较的是向量，将差更改为欧氏距离，即 $RMSE = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\|y_i - x_i\|^2}$。计算如下：

```
def calc_rmse(X: np.ndarray, Y: np.ndarray):
    return np.sqrt(np.mean(np.sum(np.square(X - Y), axis = 1)))
```

MDS 算法

首先使用原始空间中的内积矩阵计算距离矩阵（的平方）：

```
inner_prod = X @ X.T
self_prod = np.diagonal(inner_prod)
dis_square = self_prod + self_prod[:][np.newaxis] - 2 * inner_prod
```

计算行和（等于列和）和总和，根据公式得到矩阵 B。

```
dis_sqsum = np.sum(dis_square, axis=0) / m
dis_all = np.sum(dis_sqsum) / m
B = (-dis_square - dis_all + dis_sqsum + dis_sqsum[:][np.newaxis] ) / 2
```

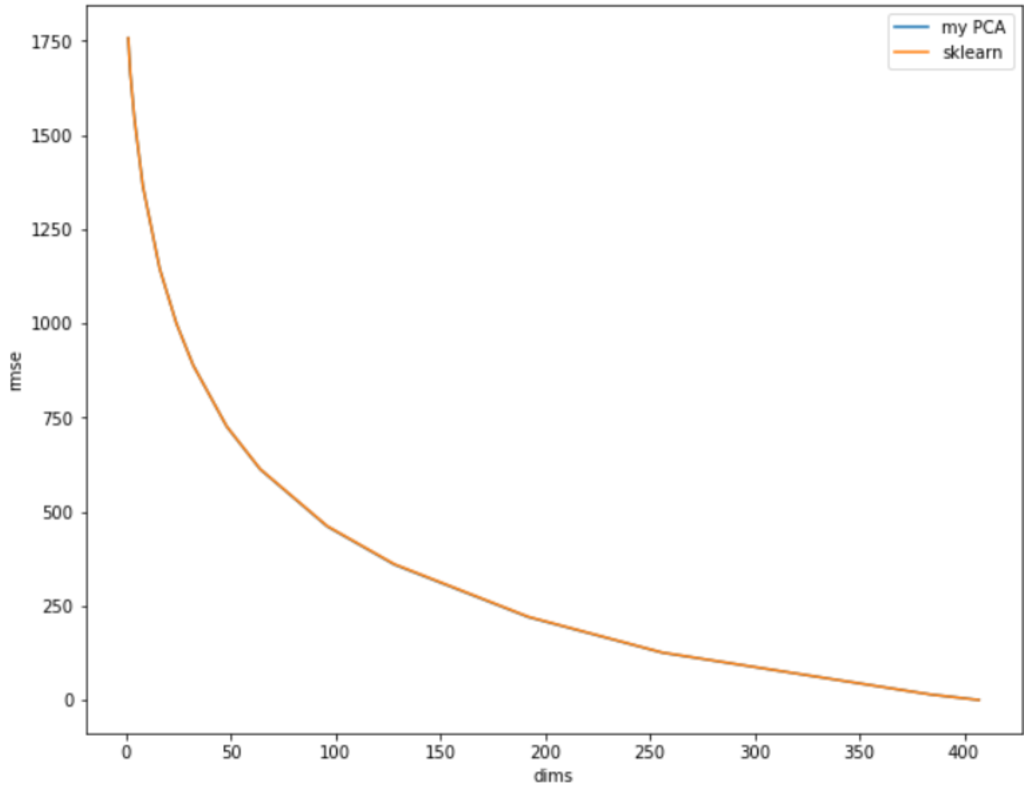
对 B 特征值分解，取较大的特征值和特征向量。则 $\boldsymbol{V\Lambda}^{1/2}$ 就是降维后的样本坐标矩阵。

```
vals, vecs = np.linalg.eig(B)
vals, vecs = vals[:d], vecs[:, :d]
X_reduced = vecs @ np.diag(vals)
```

结果分析

PCA

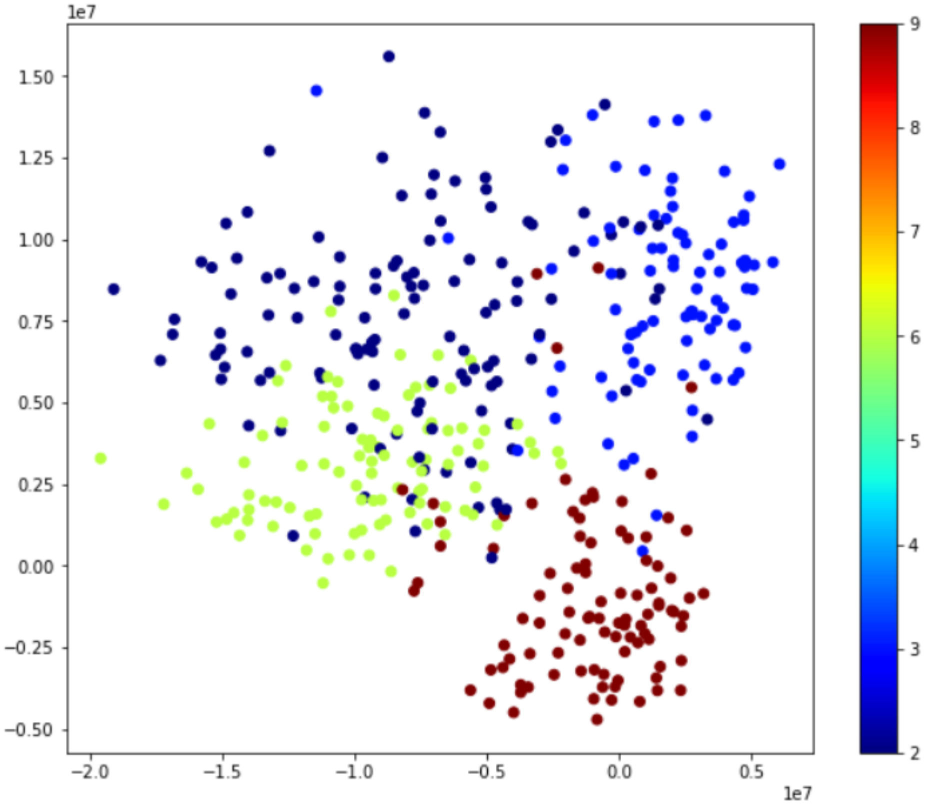
比较使用不同维度降维、重构后，手工实现的 PCA 方法和 `sklearn` 库中的方法在 RMSE 指标上的差别。作出使用的维度和 RMSE 之间的关系图如下：



可以看到两者几乎完全重合。

MDS 算法

按照降维后的坐标，数据中的类标记画散点图。



可以看到相同类中的点明显聚在一起。但由于降维时没有用到类标记的信息，类与类之间没有很明显的区分开来。