降维（PCA、SVD）

目录

> 学习完机器学习实战的降维，简单的做个笔记。文中部分描述属于个人消化后的理解，仅供参考。
>
> 本篇综合了先前的文章，如有不理解，可参考：
>
> 吴恩达机器学习（十二）主成分分析
>
> 所有代码和数据可以访问 我的 github
>
> **如果这篇文章对你有一点小小的帮助，请给个关注喔~ 我会非常开心的~**

0. 前言

数据的特征数量，又称作向量的维度。降维（dimensionality reduction）是通过一些方法，减少数据的特征数量，以降低维度。

- 数据压缩，减小占用的存储空间
- 加快算法的计算速度
- 低维平面可以可视化数据

主要有几种降维的方法：

- 主成分分析（PCA）：将数据映射到低维度的新坐标轴上，以降低维度
- 因子分析（FA）：假设数据由隐变量和噪声组成，通过找到隐变量，就可以降维
- 独立成分分析（ICA）：假设数据是由多个数据源混合组成，通过找到数据源，就可以实现降维

本篇主要介绍 PCA 和利用 SVD 将数据映射到低维度上。

PCA：

- 优点：降低数据的复杂性，识别最重要的多个特征
- 缺点：不一定需要，且可能损失有用信息
- 适用数据类型：数值型数据

SVD：

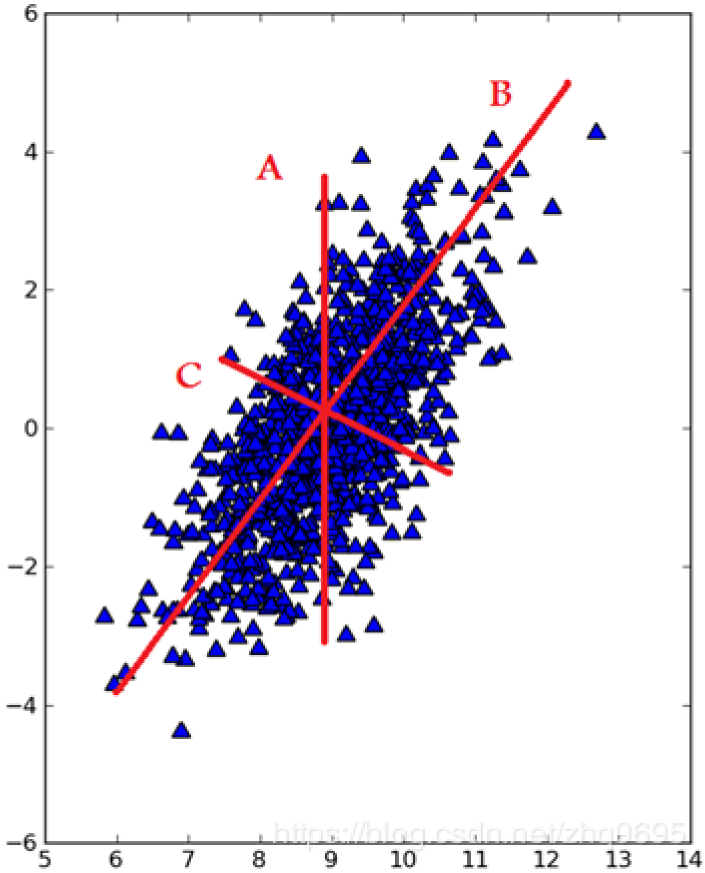
- 优点：简化数据，去除噪声，提高算法的结果
- 缺点：数据的转换可能难以理解
- 适用数据类型：数值型数据

数据是指接受的原始材料，其中可能包含噪声和不相关信息，而信息是指数据中的相关部分。

降维技术通常能使得数据变得更容易使用，去除数据中的噪声，获取数据集中的信息量。

1. 主成分分析 PCA（Principal Component Analysis）

PCA 基于最大方差理论，寻找低维度的坐标系，**使得各个数据点到平面的投影距离最小**，如下图所示（图源：机器学习实战）：



若数据投影到坐标轴 A 上，则各个数据点的投影距离之和大，若数据投影到坐标轴 B 上，则各个数据点的投影距离之和小，所以应选择坐标轴 B。最大方差理论表明，数据投影在坐标轴 B 上时，数据的方差最大，所以这条坐标轴最能表示原始数据。

若低维坐标系的维度为 k，则选定每一条坐标轴都需要与先前的所有坐标轴正交，且在剩下的空间中具有最大方差。

PCA 的算法流程：

1. 将数据进行均值归一化
2. 计算数据的协方差矩阵（协方差矩阵维度为 $n \times n$）
3. 计算协方差矩阵的特征值和特征向量（特征值个数为 n，特征向量维度为 $n \times n$）
4. 将特征值从大到小排序，取前 k 个特征值的特征向量
5. 通过特征向量，将数据映射到新的空间中，维度为 k（原始数据维度为 $m \times n$

，特征向量维度为
$n \times k$
）

将低维数据映射到高维空间的估计点上，可将降维后的数据乘以特征向量的转置即可。

2. 奇异值分解 SVD（Singular Value Decomposition）

SVD 同样可以去除数据中的噪声，用较小的数据集表示原始数据集，实现降维。

SVD 又可以称作隐性语义索引（Latent Semantic Indexing，LSI）或者隐性语义分析（Latent Semantic Analysis，LSA）。

通过 SVD 会构建出多个奇异值，这些奇异值代表数据的主成分，可以想象成是一个新的空间。

SVD 会进行**矩阵分解**，将原始矩阵分解为
$U(m \times m)\ \Sigma(m \times n)\ V^T(n \times n)$
：

$$Data_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n}$$

其中，矩阵
Σ
只包含对角线元素，其他元素为
0
，对角线元素从大到小排列，称为奇异值（Singular Value）。

奇异值与特征值有一定的联系，奇异值代表矩阵
$Data \times Data^T$
特征值的平方根。

在选定前
k
个奇异值后，可以通过矩阵
U
将数据映射到新的空间，实现降维。

SVD 的算法流程：

1. 将数据进行均值归一化
2. 计算数据的协方差矩阵（协方差矩阵维度为
   $n \times n$
   ）

3. 对协方差矩阵进行奇异值分解（奇异值个数为 n ，矩阵 U 的维度为 $n \times n$ ）
4. 将奇异值从大到小排序，取前 k 个奇异值，取矩阵 U 的前 k 列
5. 通过矩阵 U 的前 k 列，将数据映射到新的空间中，维度为 k （原始数据维度为 $m \times n$ ，矩阵 U 的前 k 列维度为 $n \times k$ ）

将低维数据映射到高维空间的估计点上，可将降维后的数据乘以矩阵 U 的前 k 列的转置即可。

SVD 还可用少量主成分表示原始数据，例如选定前 k 个奇异值，原始数据可近似表示如下：

$$Data_{m \times n} \approx U_{m \times k} \Sigma_{k \times k} V^T_{k \times n}$$

SVD 通过对数据降维，实现少量主成分表示原始数据，可以实现矩阵的压缩存储，在需要还原矩阵时，通过上式子还原即可。

3. 低维空间维度的选择

3.1. PCA

在 PCA 的计算中，通过查看特征值，可以选定低维度
k

- 查看排序后的特征值，若有大量特征值较小，说明这些特征没有提供有用的信息，可以人工去除
- 计算选定特征值之和占总特征值的比例
  $\frac{\sum_{i=1}^{k} f_i^2}{\sum_{i=1}^{n} f_i^2} \geqslant a$
  ，可自定阈值
  $a(0.95)$
  用来选定低维度
  k

3.2. SVD

在 SVD 的计算中，通过查看奇异值，可以选定低维度
k

- 查看排序后的奇异值，若有大量奇异值较小，说明这些奇异值没有提供有用的信息，可以人工去除
- 计算选定奇异值之和占总奇异值的比例
  $\frac{\sum_{i=1}^{k} s_i^2}{\sum_{i=1}^{n} s_i^2} \geqslant a$
  ，可自定阈值
  $a(0.95)$
  用来选定低维度
  k

3.3. 平均投影误差的平方

已知寻找一个低维平面，需要使得各个数据点到这个平面的距离最小，这个距离可采用**平均投影误差的平方**量化，定义如下

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left\| x^{(i)} - x_{approx}^{(i)} \right\|^2$$

其中，
x_{approx}
是低维空间点映射会高维空间中的估计点。

自定阈值
$a(0.05)$
用来选定低维度

k
：

$$\frac{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left\|x^{(i)}-x_{approx}^{(i)}\right\|^2}{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left\|x^{(i)}\right\|^2}\leqslant a$$

4. 实战案例

以下将展示书中案例的代码段，所有代码和数据可以在 github 中下载：

4.1. PCA 降维

```python
# coding:utf-8
from numpy import *
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
"""
pca降维
"""
# 加载数据集
def loadDataSet(fileName, delim):
    fr = open(fileName)
    stringArr = [line.strip().split(delim) for line in fr.readlines()]
    datArr = [list(map(float, line)) for line in stringArr]
    return mat(datArr)
# 加载包含NaN的数据集
# 用平均值代替缺失值
def replaceNanWithMean(fileName, delim):
    datMat = loadDataSet(fileName, delim)
    numFeat = shape(datMat)[1]
    for i in range(numFeat):
        meanVal = mean(datMat[nonzero(~isnan(datMat[:, i].A))[0], i])
        datMat[nonzero(isnan(datMat[:, i].A))[0], i] = meanVal
    return datMat
# PCA算法
def pca(dataMat, topNfeat=9999999):
    # 均值归一化
    meanVals = dataMat.mean(axis=0)
    maxVals = dataMat.max(axis=0)
    minVals = dataMat.min(axis=0)
    meanRemoved = (dataMat - meanVals) / (maxVals - minVals)
    # 协方差矩阵
    covMat = cov(meanRemoved, rowvar=0)
    # 特征值，特征向量
    eigVals, eigVects = linalg.eig(mat(covMat))
    # 按照特征值从小到大排序，返回排序后索引
    eigValInd = argsort(eigVals)
    # 逆序取topNfeat个最大的特征的索引
    eigValInd = eigValInd[:-(topNfeat + 1):-1]
    # 获取特征向量
    redEigVects = eigVects[:, eigValInd]
    # 矩阵相乘，降低维度
    lowDDataMat = meanRemoved * redEigVects
    # 将原始数据重新映射会高维，用于调试
    reconMat = multiply((lowDDataMat * redEigVects.T), (maxVals - minVals)) + meanVals
    return lowDDataMat, reconMat
if __name__ == '__main__':
    dataMat = loadDataSet('testSet.txt', '\t')
    lowDMat, reconMat = pca(dataMat, 1)
    fig = plt.figure()
    ax = fig.add_subplot(111)
    ax.scatter(dataMat[:, 0].flatten().A[0], dataMat[:, 1].flatten().A[0],
               marker='^', s=90)
```

```
ax.scatter(reconMat[:, 0].flatten().A[0], reconMat[:, 1].flatten().A[0],
           marker='o', s=50, c='red')
plt.show()
dataMat = replaceNanWithMean('secom.data', ' ')
meanRemoved = dataMat - dataMat.mean(axis=0)
covMat = cov(meanRemoved, rowvar=0)
eigVals, eigVects = linalg.eig(mat(covMat))
eigValInd = argsort(eigVals)
eigValInd = eigValInd[::-1]
sortedEigVals = eigVals[eigValInd]
total = sum(sortedEigVals)
varPercentage = sortedEigVals / total * 100
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111)
ax.plot(range(1, 21), varPercentage[:20], marker='^')
plt.xlabel('Principal Component Number')
plt.ylabel('Percentage of Variance')
plt.show()
```

4.2. SVD 降维

```python
# coding:utf-8
from numpy import *
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
"""
svd降维
"""
# 加载数据集
def loadDataSet(fileName, delim):
    fr = open(fileName)
    stringArr = [line.strip().split(delim) for line in fr.readlines()]
    datArr = [list(map(float, line)) for line in stringArr]
    return mat(datArr)
# SVD降维
def svd(dataMat, topNfeat=9999999):
    # 均值归一化
    meanVals = dataMat.mean(axis=0)
    maxVals = dataMat.max(axis=0)
    minVals = dataMat.min(axis=0)
    meanRemoved = (dataMat - meanVals) / (maxVals - minVals)
    # 协方差矩阵
    covMat = cov(meanRemoved, rowvar=0)
    # 奇异值分解
    U, sigma, VT = linalg.svd(covMat)
    # 降维
    lowDDataMat = meanRemoved * U[:, :topNfeat]
    # 映射回高维空间中，不过不是原始值，而是低维空间点对应的高维空间位置
    reconMat = multiply((lowDDataMat * U[:, :topNfeat].T), (maxVals - minVals)) + meanVals
    return lowDDataMat, reconMat
if __name__ == '__main__':
    dataMat = loadDataSet('testSet.txt', '\t')
    lowDMat, reconMat = svd(dataMat, 1)
    fig = plt.figure()
    ax = fig.add_subplot(111)
    ax.scatter(dataMat[:, 0].flatten().A[0], dataMat[:, 1].flatten().A[0],
               marker='^', s=90)
    ax.scatter(reconMat[:, 0].flatten().A[0], reconMat[:, 1].flatten().A[0],
               marker='o', s=50, c='red')
    plt.show()
```

4.3. SVD 压缩存储矩阵

```python
# coding:utf-8
from numpy import *
from numpy import linalg as la
"""
svd降维实现矩阵压缩
"""
# 输出矩阵
def printMat(inMat, thresh=0.8):
    for i in range(32):
        s = ''
        for k in range(32):
            if float(inMat[i, k]) > thresh:
                s += '1'
            else:
                s += '0'
        print(s)
# 降维压缩矩阵
def imgCompress(numSV=2, thresh=0.8):
    myl = []
    for line in open('0_5.txt').readlines():
        newRow = []
        for i in range(32):
            newRow.append(int(line[i]))
        myl.append(newRow)
    myMat = mat(myl)
    # 打印原始矩阵
    print("****original matrix******")
    printMat(myMat, thresh)
    # svd压缩矩阵
    # U: m*m
    # sigma: m*n
    # VT: n*n
    U, Sigma, VT = la.svd(myMat)
    # 构建sigma矩阵
    SigRecon = mat(zeros((numSV, numSV)))
    for k in range(numSV):
        SigRecon[k, k] = Sigma[k]
    # 利用压缩后的矩阵还原原矩阵
    reconMat = U[:, :numSV] * SigRecon * VT[:numSV, :]
    # 打印还原后的矩阵
    print("****reconstructed matrix using %d singular values******" % numSV)
    printMat(reconMat, thresh)
if __name__ == '__main__':
    imgCompress(2)
```

如果这篇文章对你有一点小小的帮助，请给个关注喔~ 我会非常开心的~