PCA （Principal Component Analysis）

- **通过线性变换（中心旋转），寻找最佳的线性组合，削弱特征线性相关导致的过拟合**
- **用途：数据降维，数据压缩；聚类分析，数据可视化**

> 机器学习中常需要**数据降维**，防止过拟合; 但偶尔也有**数据升维**，防止欠拟合的情况，例如

> - polynomial regression （相对于linear regression）
> - svm kernel 分离低维空间中不可分离的点

假设有n个sample $\vec{x_i}$，$(i = 1, 2, \dots, n)$ (n次测量)，每个sample有m个分量，$\vec{x_i} = [\ x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}\ ]$ （每次测量有m个值），将这 n 个矢量堆在一起构成一个 $n \times m$ 维矩阵，

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{x_1}} \\ \vec{x_2} \\ \vdots \\ \vec{x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x_{11}} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

要解决的问题是：**找到一个线性变换 $\mathbf{XW} = \mathbf{Y}$ 使其“最好的”表征 $\mathbf{X}$ 中的"有效信息"**

其中W 是一个$m \times l$维矩阵，

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{w_{11}} & w_{12} & \dots & w_{1l} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \dots & w_{ml} \end{bmatrix} \equiv [\ \vec{\mathbf{w_1}} \quad \vec{w_2} \quad \dots \quad \vec{w_l}\ ]$$

即

$$\mathbf{XW} = \begin{bmatrix} \mathbf{x_{11}} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{w_{11}} & w_{12} & \dots & w_{1l} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \dots & w_{ml} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{x_1}} \\ \vec{x_2} \\ \vdots \\ \vec{x_n} \end{bmatrix} [\ \vec{\mathbf{w_1}} \quad \vec{w_2} \quad \dots \quad \vec{w_l}\ ] \equiv \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{y_1}} \\ \vec{y_2} \\ \vdots \\ \vec{y_n} \end{bmatrix} \equiv \mathbf{Y}$$

,

显然，根据定义有：

$$\vec{y_i} = [\vec{x_i} \cdot \vec{w_1}, \vec{x_i} \cdot \vec{w_2}, \dots, \vec{x_i} \cdot \vec{w_l}]$$

根据这一表达式，我们可以将，$\{\vec{w_1}, \vec{w_2}, \dots, \vec{w_l}\}$ 看作是一组 base vectors，$\vec{y_i}$ 的各分量是 $\vec{x_i}$ 在这组“基” 上的各投影值。 或者说: ***"$\vec{y_i}$ 是 $\vec{x_i}$ 相对于 这组"基"的表示"***

我们将$\mathbf{Y}$ 改写成列向量的形式，即

$$\mathbf{Y} \equiv \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{y_1}} \\ \vec{y_2} \\ \vdots \\ \vec{y_n} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{y_{11}} & y_{12} & \cdots & y_{1l} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{nl} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{Y_1} & Y_2 & \dots & Y_l \end{bmatrix}$$

, 即将$\mathbf{Y}$的第i列看作是随机向量 $Y_i \ (i = 1, 2, \dots l)$的n次采样结果。

对于"良好的"采样数据，我们认为应当满足：

1. **各采样变量的关联性很小，即采样的各个变量没有 redundancy, 例如 A, B 是被采样的两个随机变量，我们认为："协方差 $cov(A, B) \equiv \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \to 0$ "**
2. **信噪比(signal-to-noise ratio) $NSR \equiv \sigma^2_{\text{signal}} / \sigma^2_{\text{noise}} \gg 1$, 或者说："方差越大的变量越重要, 方差越小的变量越不重要，或者说越可能是噪音"**

注意：由于方差和协方差数学定义的有效性都与"高斯分布"有关，因此若随机变量的分布显著偏离高斯分布，这两个假设未必合理

出于这两点考虑，我们希望线性变换以后的矩阵 $\mathbf{Y}$ （看作是$Y_1, Y_2, \dots, Y_l$这组随机变量的采样结果），应当满足:

1. 对于任意 $i \neq j$, $cov(Y_i, Y_j) = 0$
2. $Y_1, Y_2, \dots, Y_l$需要按其各自方差的大小降序排列，（方差越小越可能是噪声），为dimensition reduction 提供依据

不妨假设，Y_i 都已"中心化"，即 $\langle Y_i \rangle = 0, \ (i = 1, 2, \dots, n)$，则定义：

$$\mathbf{S}_Y \equiv \frac{1}{n-1}\mathbf{Y^T Y} = \frac{1}{n-1} \begin{bmatrix} Y_1^T \\ Y_2^T \\ \vdots \\ Y_l^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 & Y_2 & \dots & Y_l \end{bmatrix} = \frac{1}{n-1} \begin{bmatrix} Y_1 \cdot Y_1 & Y_1 \cdot Y_2 & \dots & Y_1 \cdot Y_l \\ Y_2 \cdot Y_1 & Y_2 \cdot Y_2 & \dots & Y_2 \cdot Y_l \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_l \cdot Y_1 & Y_l \cdot Y_2 & \dots & Y_l \cdot Y_l \end{bmatrix}$$

$$\equiv \begin{bmatrix} cov(Y_1, Y_1) & cov(Y_1, Y_2) & \dots & cov(Y_1, Y_l) \\ cov(Y_2, Y_1) & cov(Y_2, Y_2) & \dots & cov(Y_2, Y_l) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ cov(Y_l, Y_1) & cov(Y_l, Y_2) & \dots & cov(Y_l, Y_l) \end{bmatrix}$$

因此，我们希望 $\mathbf{S}_Y$ 是"对角化"的，且对角线上的值是从大到小排列的。

另一方面，我们根据定义有：

$$\mathbf{S}_Y = \frac{1}{n-1}\mathbf{Y}^T\mathbf{Y} = \mathbf{W^T}\left(\frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)\mathbf{W} \equiv \mathbf{W^T}\mathbf{S}_X\mathbf{W}$$

其中

$$\mathbf{S}_X \equiv \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}$$

因此，我们的需求,变成了将 $\mathbf{S}_X$ 通过公式$\mathbf{S}_Y$ = $\mathbf{W^T}\mathbf{S}_X\mathbf{W}$"对角化"为$\mathbf{S}_Y$的问题, 一旦选定了满足要求的 $\mathbf{W}$，我们就可以将$\mathbf{Y} = \mathbf{XW}$ 看作是更恰当的测量表征

对角化矩阵

假设有l个n 维的正交归一基 $\vec{v_i} = [v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{in}]$, 其中 $i = 1, 2 \dots, l$, 即 $\{\vec{v_i}\}$ 满足满足正交归一性条件（注意 l 可能小于 n, 因此这组基对于n 维空间不一定完备）：

$$\sum_{\alpha=1}^{n} v_{i\alpha} v_{j\alpha} = \delta_{ij}, \quad (i,j = 1,2,\ldots,l)$$

这组矢量是某$n \times n$ 维方阵A 的本征矢，即

$$\sum_{\beta=1}^{n} A_{\alpha\beta} v_{i\beta} = \lambda_i v_{i\alpha}, \quad (i = 1,2\ldots,l)$$

我们将所有$\vec{v}_i$ 堆成一个$l \times n$维矩阵：

$$\mathbf{V} \equiv \begin{bmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \\ \vdots \\ \vec{v}_l \end{bmatrix}$$

则容易证明：

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_l \end{bmatrix} = \mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{V}^T \equiv \mathbf{D}$$

用分量的形式表达，即

$$D_{ij} = \sum_{\alpha\beta} (\mathbf{V})_{i\alpha} A_{\alpha\beta} (\mathbf{V}^T)_{\beta j} = \sum_{\alpha\beta} v_{i\alpha} A_{\alpha\beta} v_{j\beta} = \lambda_j \sum_{\alpha} v_{i\alpha} v_{j\alpha} = \lambda_j \delta_{ij} \quad (i,j = 1,2,\ldots,l)$$

PCA presentation can be simulated by linear encoder and decoder with MSE cost function

if a $n \times n$ matrix $\mathbf{M}$ satisfies: $\forall$ vector $\vec{x}$, we have $x^T \mathbf{M} x \geq 0$, then $\mathbf{M}$ is called a **nonnegative definitive** matrix, in particular, for arbitray matrix A,

AA^T is always **nonnegative definitive** (because $x^T A A^T x \equiv (A^T x)^T (A^T x) \equiv ||A^T x||^2 \geq 0$)

假设我们已知一个 $m \times n$ 维矩阵 X 的 r 阶SVD近似, $r \leq \text{rank}(X)$:

$$X_{m\times n} \approx U_{m\times r} \Sigma_{r\times r} (V_{n\times r})^T \quad \text{该近似的偏离大小取决于忽略掉的其他本征值 } \lambda \text{ 之和。}$$

其中$\Sigma_{r\times r}$ 是 $r \times r$ 维的对角矩阵（对角元素为从大到小排列的前r个本征值构成），

$$\Sigma_{r\times r} = \text{diag}\left(\left[\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \cdots, \sqrt{\lambda_r}\right]\right), \qquad \lambda_1 \geq \lambda_2 \cdots \geq \lambda_r \geq 0$$

U, V 满足如下正交归一关系

$$(U_{m\times r})^T U_{m\times r} = (V_{n\times r})^T V_{n\times r} = I_{r\times r}$$

根据以上关系，不难证明：

$$X_{m\times n} V_{n\times r} \approx U_{m\times r} \Sigma_{r\times r} \qquad \left(X^T\right)_{n\times m} U_{m\times r} \approx V_{n\times r} \Sigma_{r\times r}$$

$$\left(X^T X\right)_{n\times n} V_{n\times r} \approx V_{n\times r} \left(\Sigma^2\right)_{r\times r} (\text{即 } \lambda_i \text{ 是 } X^T X \text{ 的第i个本征值，本征矢量对应 } V \text{的第 } i \text{ 列})$$

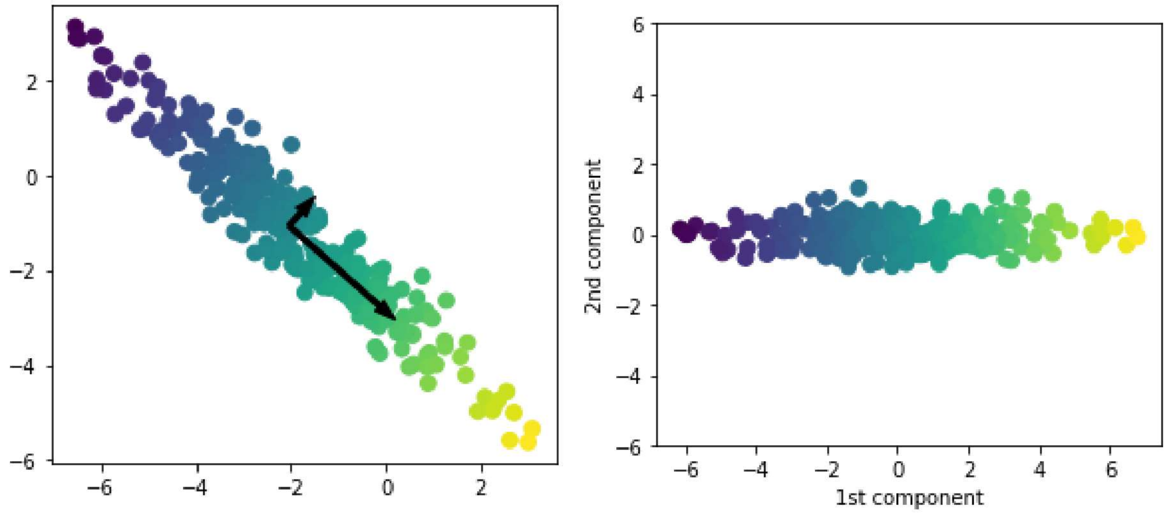
> $\left(XX^T\right)_{m\times m}U_{m\times r} \approx U_{m\times r}\left(\Sigma^2\right)_{r\times r}$(即 λ_i 是 XX^T 的第i个本征值，本征矢量对应 U的第 i 列)

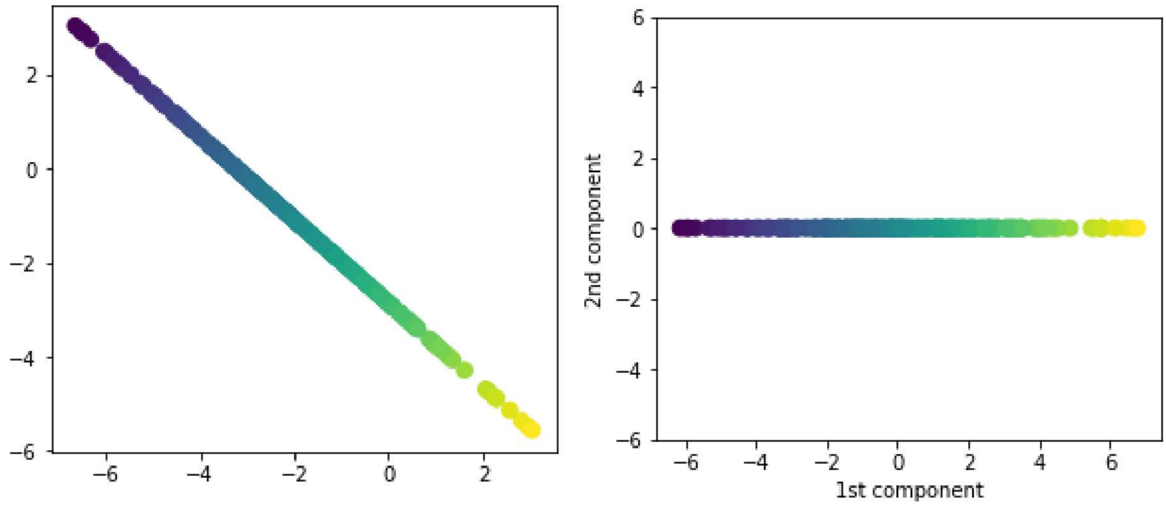
$Y_{m\times r} \equiv X_{m\times n}V_{n\times r}$ 可以看做是 $X_{m\times n}$ 中所有行向量(长度n)的一个低维表示（长度r）

$Z_{r\times n} \equiv \left(U^T\right)_{r\times m}X_{m\times n}$ 可以看做是 $X_{m\times n}$ 中所有列向量(长度m)的一个低维表示（长度r）

In [71]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.decomposition import PCA
from utils import load_pca

X = load_pca()

pca = PCA(n_components=2)
pca.fit(X)

X_pca = pca.transform(X)
S = X_pca.std(axis=0)


fig, axes=plt.subplots(2, 2, figsize=(10,10))
axes = axes.ravel()



axes[0].scatter(X[:,0], X[:,1], c=X_pca[:, 0], s=60, cmap='viridis')
axes[0].arrow(pca.mean_[0], pca.mean_[1], S[0] * pca.components_[0, 0],
                  S[0] * pca.components_[0, 1], width=.1, head_width=.3,
                  color='k')
axes[0].arrow(pca.mean_[0], pca.mean_[1], S[1] * pca.components_[1, 0],
                  S[1] * pca.components_[1, 1], width=.1, head_width=.3,
                  color='k')
axes[0].set_aspect('equal')

axes[1].scatter(X_pca[:,0], X_pca[:,1], c=X_pca[:, 0], s=60, cmap='viridis')
axes[1].set_ylim(-6, 6)
axes[1].set_xlabel("1st component")
axes[1].set_ylabel("2nd component")
axes[1].set_aspect('equal')

axes[3].scatter(X_pca[:,0], np.zeros(len(X)), c=X_pca[:, 0], s=60, cmap='viridis')
axes[3].set_ylim(-6, 6)
axes[3].set_xlabel("1st component")
axes[3].set_ylabel("2nd component")
axes[3].set_aspect('equal')

X_inverse = pca.inverse_transform(np.c_[X_pca[:,0], np.zeros(len(X))])

axes[2].scatter(X_inverse[:,0], X_inverse[:,1], c=X_pca[:, 0], s=60, cmap='viridis')
axes[2].set_aspect('equal')

plt.show()
```


2nd component
1st component


2nd component
1st component