scikit learn中PCA的使用方法

原创 石头 机器学习算法那些事 2019-03-12

前言

前两篇文章介绍了PCA（主成分分析方法）和SVD（奇异值分解）的算法原理，本文基于scikit learn包介绍了PCA算法在降维和数据重构的应用，并分析了PCA类与sparsePCA类的区别。由于PCA算法的特征值分解是奇异值分解SVD的一个特例，因此sklearn工具的PCA库是基于SVD实现的。

> 本文内容代码链接：
> https://github.com/zhangleiszu/machineLearning/tree/master/PCA

目录

1. PCA类介绍

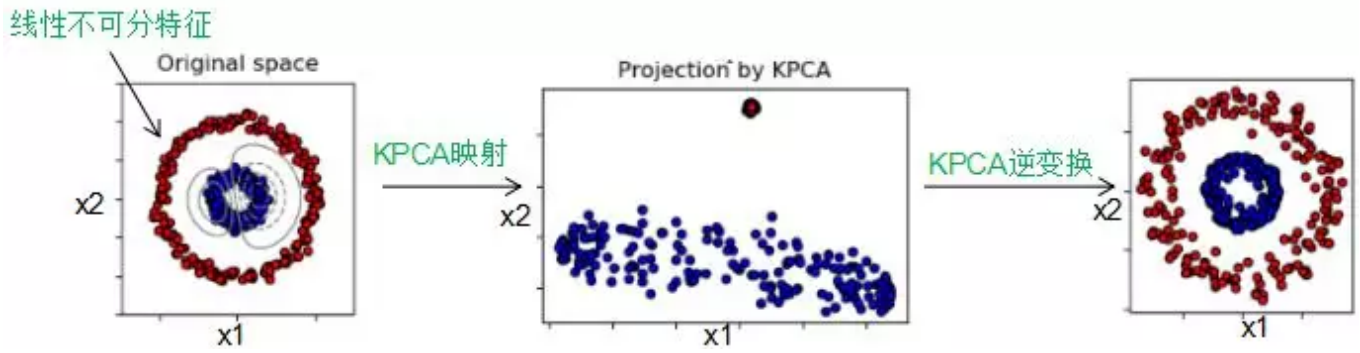
所有PCA类都在sklearn.decompostion包中，主要有以下几类：

1) sklearn.decompostion.PCA：实际项目中用的最多的PCA类；

2) sklearn.decompostion.IncrementPCA：PCA最大的缺点是只支持批处理，也就是说所有数据都必须在主内存空间计算，IncrementalPCA使用多个batch，然后依次调用partial_fit函数，降维结果与PCA类基本一致 。

3) sklearn.decomposition.SparsePCA和sklearn.decomposition.MiniBatchSparsePCA：SparsePCA类和MiniBatchSparsePCA类算法原理一样，都是把降维问题用转换为回归问题，并在优化参数时增加了正则化项（L1惩罚项），不同点是MiniBatchSparsePCA使用部分样本特征并迭代设置的次数进行PCA降维 。

4) sklearn.decomposition.KernelPCA：对于线性不可分的特征，我们需要对特征进行核函数映射为高维空间，然后进行PCA降维 。流程图如下：



2. sklearn.decomposition.PCA类的参数说明

1) n_components：取值为：整形，浮点型，None或字符串 。

- n_components为空时，取样本数和特征数的最小值：

$$n\_components == min(n\_samples , n\_features)$$

- 0 < n_components < 1时，选择主成分的方差和占总方差和的最小比例阈值，PCA类自动计算降维 后的维数。
- n_components是大于等于1的整数，设置降维后的维数 。
- n_components是字符串'mle'，PCA类自动计算降维后的维数 。

2) copy：布尔型变量 。表示在运行时是否改变训练数据，若为True，不改变训练数据的值，运算结果写在复制的训练数据上；若为False，则覆盖训练数据 ，默认值为True。

3) whiten：布尔型变量 。若为True，表示对降维后的变量进行归一化；若为False，则不进行归一化 ，默认值为False。

4) svd_solver：字符串变量，取值为：'auto'，'full'，'arpack'，'randomized'

- randomized：如果训练数据大于500×500，降维后的维数小于数据的最小维数0.8倍，采用加快SVD的随机算法 。
- full：传统意义上的SVD算法，调用scipy.linalg.svd类。
- arpack：调用scipy.sparse.linalg.svds类，降维后的维数符合：

$$0 < n\_components < min(X.shape)$$

- auto：自动选择最适合的SVD算法。

类成员属性：

components_：主成分分量的向量空间 。

explained_variance_：向量空间对应的方差值 。

explained_variance_ratio_：向量空间的方差值占总方差值的百分比 。

singular_values：向量空间对应的奇异值 。

3.sklearn.decomposition.MiniBatchSparsePCA的参数说明

本节就介绍两个常用的重要变量，用法与PCA类基本相同。

n_components：降维后的维数

alpha：正则化参数，值越高，主成分分量越稀疏（分量包含0的个数越多）。

4. PCA类在降维的应用

Iris数据集包含了三种花（Setosa，Versicolour和Virginica），特征个数为4。

下载Iris数据集：

```
iris = datasets.load_iris()
X = iris.data
y = iris.target
```

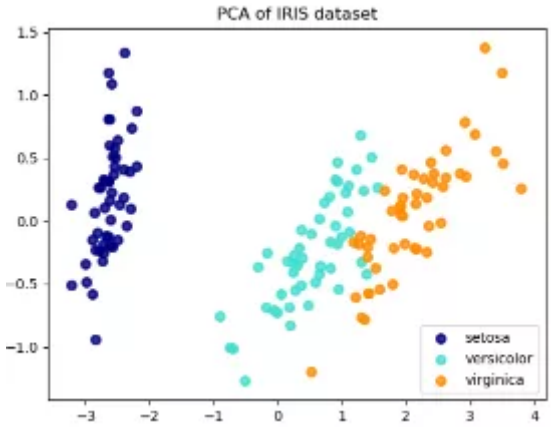
设置降维后的维数为2：

```
pca = PCA(n_components=2)
```

降维后的数据集：

```
X_r = pca.fit(X).transform(X)
```

降维后的特征分布图：

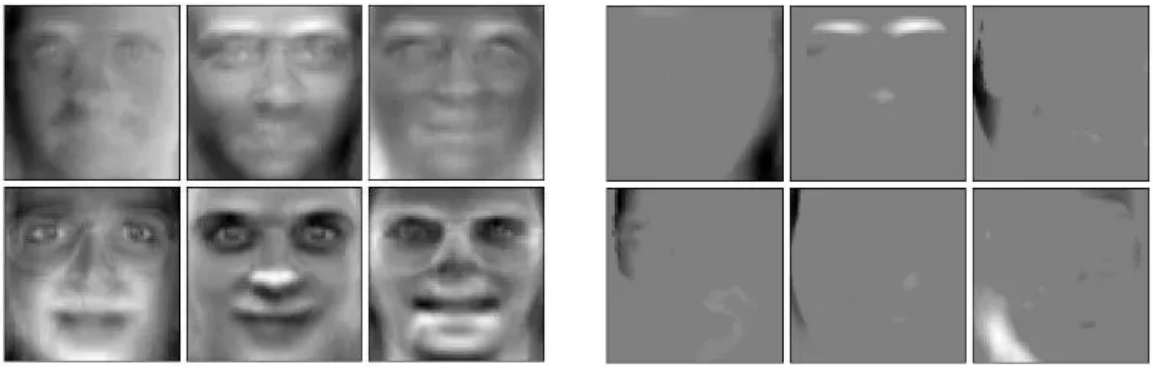


5. PCA类与MiniBatchSparsePCA类的区别

PCA类主成分分量是非零系数构成的，导致了PCA降维的解释性很差，若主成分分量包含了很多零系数，那么主成分分量可以将很多非主要成分的影响降维0，不仅增强了降维的解释性，也降低了噪声的影响，缺点是可能丢失了训练数据的重要信息。MiniBatchSparsePCA与PCA类的区别是使用了L1正则化项，导致了产生的主成分分量包含了多个0，L1正则化系数越大，0的个数越多，公式如下：

$$(U^*, V^*) = \arg\min_{U,V} \frac{1}{2}||X - UV||_2^2 + \alpha||V||_1$$
$$\text{subject to } ||U_k||_2 = 1 \text{ for all } 0 \leq k < n_{components}$$

用图来说明区别：



左图是PCA类的主成分分量空间，右图是MiniBatchSparsePCA类的主成分分量空间，比较两图可知，右图能够定位到重要的特征部位 。

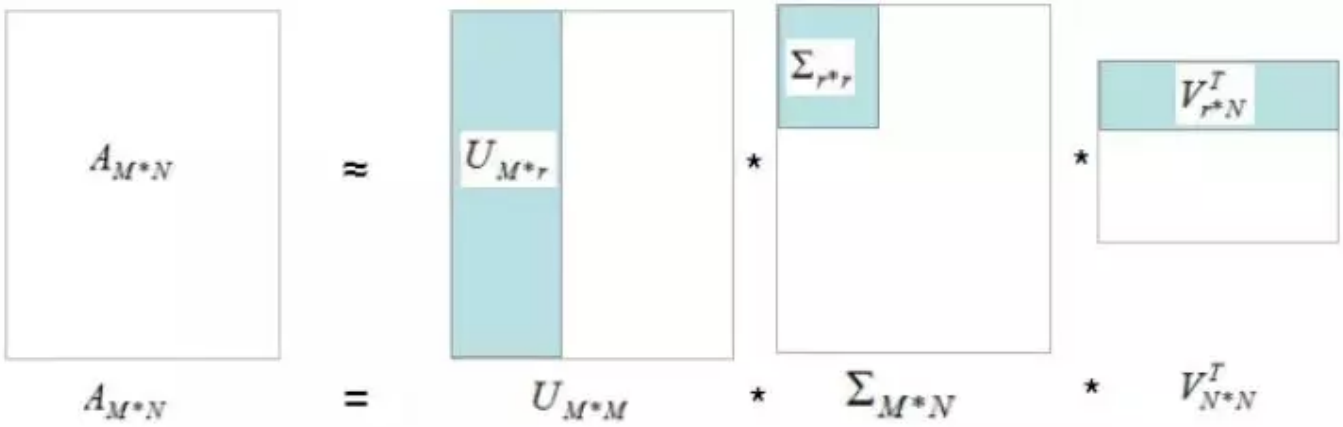
若是用数值表示，MiniBatchSparsePCA类的主成分分量值为：

```
array([[0.        , 0.        , 0.03352696, ..., 0.        , 0.        ,
        0.        ],
       [0.        , 0.        , 0.        , ..., 0.        , 0.        ,
        0.        ],
       [0.        , 0.        , 0.        , ..., 0.        , 0.        ,
        0.        ],
       [0.        , 0.        , 0.        , ..., 0.        , 0.        ,
        0.        ],
       [0.        , 0.        , 0.        , ..., 0.09664463, 0.09126039,
        0.08196274],
       [0.07576811, 0.09492737, 0.07590503, ..., 0.        , 0.        ,
        0.        ]])
```

由上图可知，主成分分量包含了很多零分量 。

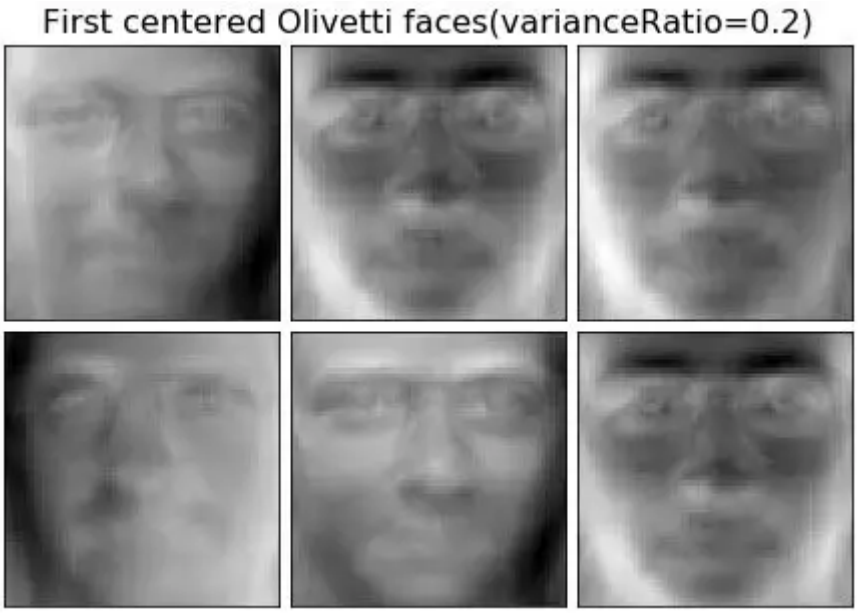
6. PCA在数据重构的应用

数据重构算法借鉴上一篇文章的图：

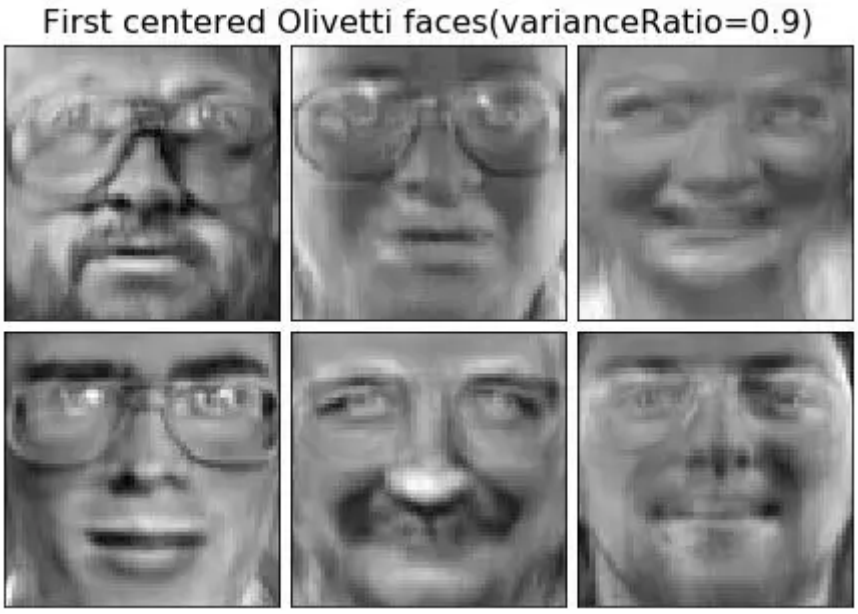


浅蓝色部分矩阵的乘积为数据的重构过程，r为选择的主成分分量个数 。r越大，重构的数据与原始数据越接近或主成分分量的方差和比例越大，重构的数据与原始数据越接近 ， 图形解释如下：

n_components是0.2的数据重构图：



n_components是0.9的数据重构图：



因此，主成分分量越多，重构的数据与原始数据越接近。

7. 总结

本文介绍了PCA类在降维和数据重构的简单用法以及分析了sparsePCA类稀疏主成分分量的原理。

参考

https://scikit-learn.org/stable/modules/decomposition.html#pca

https://www.cnblogs.com/pinard/p/6243025.html

推荐阅读

主成分分析（PCA）原理

奇异值分解（SVD）原理