哈尔滨工业大学计算机科学与技术学院

实验报告

课程名称：机器学习

课程类型：必修

实验题目：PCA模型实验

学号：1160300314

姓名：朱明彦

一、实验目的

实现一个PCA模型，能够对给定数据进行降维(即找到其中的主成分)，可以利用已有的矩阵特征向量提取方法。

二、实验要求及实验环境

实验要求

测试

1. 首先人工生成一些数据（如三维数据），让它们主要分布在低维空间中，如首先让某个维度的方差远小于其它维度，然后对这些数据旋转。生成这些数据后，用你的PCA方法进行主成分提取。
2. 利用手写体数字数据mnist，用你实现PCA方法对该数据降维，找出一些主成分，然后用这些主成分对每一副图像进行重建，比较一些它们与原图像有多大差别（可以用信噪比衡量）。

实验环境

- **OS**: Ubuntu 16.04.5 LTS
- python 3.7.0

三、设计思想(本程序中用到的主要算法及数据结构)

1.算法原理

PCA(主成分分析，Principal Component Analysis)是最常用的一种降维方法。在周志华老师的机器学习书中给出了有关于两种有关PCA的推导，分别从最近重构性和最大可分性两种方面进行。

> 如果超平面可以对正交属性空间的所有样本进行恰当表达，就要具有下面两个性质
>
> - 最近重构性：样本点到这个超平面的距离都足够近
> - 最大可分性：样本点在这个超平面上的投影尽可能分开

1.1 中心化

在PCA开始时都假设数据集进行了中心化，即：对于数据集$\mathbf{D}=\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_m\}$，其中$\mathbf{x}_i\in\mathbb{R}^n$。对每个样本均进行如下操作：

$$\mathbf{x}_i\leftarrow\mathbf{x}_i-\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\mathbf{x}_j$$

其中$\mu=\frac{1}{m}\sum\limits_{j=1}^{m}\mathbf{x}_j$称为样本集的$D$的中心向量。之所以进行中心化，是因为经过中心化之后的常规的线性变换就是绕原点的旋转变化，也就是坐标变换；以及$\sum_{i=1}^{m}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T=\mathbf{X}^T\mathbf{X}$就是样本集的协方差矩阵。

经过中心化后的数据，有$\sum_{j=1}^{m}\mathbf{x}_j=\mathbf{0}$。设使用的投影坐标系的标准正交向量基为$\mathbf{W}=\{\mathbf{w}_1,\mathbf{w}_2,\ldots,\mathbf{w}_d\}$，$d<n$，每个样本降维后得到的坐标为:

$$\mathbf{z}=\{z_1,z_2,\ldots,z_d\}=\mathbf{W}^T\mathbf{x} \tag{1}$$

因此，样本集与降维后的样本集表示为：

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_1^T\\ \vdots\\ \mathbf{x}_m^T\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{1,1}&x_{1,2}&\cdots&x_{1,n}\\ x_{2,1}&x_{2,2}&\cdots&x_{2,n}\\ \vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\ x_{m,1}&x_{m,2}&\cdots&x_{m,n}\end{bmatrix},\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}\mathbf{z}_1^T\\ \vdots\\ \mathbf{z}_m^T\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}z_{1,1}&z_{1,2}&\cdots&z_{1,d}\\ z_{2,1}&z_{2,2}&\cdots&z_{2,d}\\ \vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\ z_{m,1}&z_{m,2}&\cdots&z_{m,d}\end{bmatrix}$$

1.2 从最近重构性原理解释

在得到$\mathbf{z}$后，需要对其进行重构，重构后的样本设为

$$\hat{\mathbf{x}}=\mathbf{W}\mathbf{z} \tag{2}$$

将式(1)(2)代入，那么对于整个数据集上的所有样本与重构后的样本之间的误差为:

$$\sum_{i=1}^{m}||\hat{\mathbf{x}}_i-\mathbf{x}_i||_2^2=\sum_{i=1}^{m}||\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_i||_2^2 \tag{3}$$

根据定义，可以有：

$$\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{x}_i=\mathbf{W}(\mathbf{W}^T\mathbf{x}_i)=\sum_{j=1}^{d}\mathbf{w}_j(\mathbf{w}_j^T\mathbf{x}_i) \tag{4}$$

由于$\mathbf{w}_j^T\mathbf{x}_i$是标量，有$\mathbf{w}_j^T\mathbf{x}_i=(\mathbf{w}_j^T\mathbf{x}_i)^T=\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_j$，从而式(4)变为：

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{m}||\hat{\mathbf{x}}_i-\mathbf{x}_i||_2^2&=\sum_{i=1}^{m}||\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_i||_2^2\\ &=\sum_{i=1}^{m}||\sum_{i=1}^{d}(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_j)\mathbf{w}_j-\mathbf{x}_i||_2^2\\ &=\sum_{i=1}^{m}||\mathbf{x}_i-\sum_{i=1}^{d}(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_j)\mathbf{w}_j||_2^2\end{aligned} \tag{5}$$

此外，根据$\mathbf{X}$的定义有：

$$\begin{aligned}||\mathbf{X}-\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T||_F^2&=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left[x_{i,j}-\left(\sum_{k=1}^{d}w_{k,j}\times\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_k\right)\right]^2\\ &=\sum_{i=1}^{m}\left|\left|\mathbf{x}_i-\sum_{k=1}^{d}(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_k)\mathbf{x}_k\right|\right|_2^2\\ &=\sum_{i=1}^{m}\left|\left|\mathbf{x}_i-\sum_{j=1}^{d}(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}_j)\mathbf{x}_j\right|\right|_2^2\end{aligned} \tag{6}$$

结合式(5)(6)可以化简优化目标：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{W}^* &= \arg\min_{\mathbf{W}} \sum_{i=1}^{m} ||\hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{x}_i||_2^2 = \arg\min_{\mathbf{W}} ||\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T||_F^2 \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} tr[(\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)^T(\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} tr[\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T - \mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X} + \mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T) - tr(\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}) + tr(\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T) + tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T) + tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}) - tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\min_{\mathbf{W}} [-tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\max_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{W}^T)] \\
&= \arg\max_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W})]
\end{aligned} \tag{7}
$$

从而优化目标为$\mathbf{W}^* = \arg\max_{\mathbf{W}} [tr(\mathbf{W}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{W})]$，约束为$\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}_{d\times d}$

1.3 从最大可分性原理解释

对于原始数据样本点$\mathbf{x}_i$在降维后在新空间的超平面上的投影为$\mathbf{W}^T\mathbf{x}_i$。若使样本点的投影尽可能分开，应该使样本点在投影后的方差最大化，即使下式最大化：

$$
\begin{aligned}
\arg\max_{\mathbf{W}} &= \arg\max_{\mathbf{W}} \sum_{i=1}^{m} \mathbf{W}^T\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T\mathbf{W} \\
&= \arg\max_{\mathbf{W}} tr(\mathbf{W}^T\mathbf{X}\mathbf{X}^T\mathbf{W}) \\
\textbf{s.t.}\ \ &\mathbf{W}^T W = \mathbf{I}
\end{aligned} \tag{8}
$$

可以看到式(7)与(8)等价。PCA的优化问题就是要求解$\mathbf{X}^T\mathbf{X}$的特征值。

只需将$\mathbf{X}^T\mathbf{X}$进行特征值分解，将得到的特征值进行排序：$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$，提取前$d$大的特征值对应的单位特征向量即可构成变化矩阵$\mathbf{W}$。

2.算法的实现

给定样本集$\mathbf{D} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_m\}$和低维空间的维数$d$

1. 对所有的样本进行中心化操作：
    1. 计算样本均值$\mu = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\mathbf{x}_j$
    2. 所有样本减去均值$\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_j - \mu,\ j \in \{1, 2, \ldots, m\}$
2. 计算样本的协方差矩阵$\mathbf{X}^T\mathbf{X}$
3. 对协方差矩阵$\mathbf{X}^T\mathbf{X}$进行特征值分解
4. 取最大的d个特征值对应的单位特征向量$\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_d$，构造投影矩阵$\mathbf{W} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_d)$
5. 输出投影矩阵$\mathbf{W}$与样本均值μ

四、实验结果分析

1.生成数据的测试

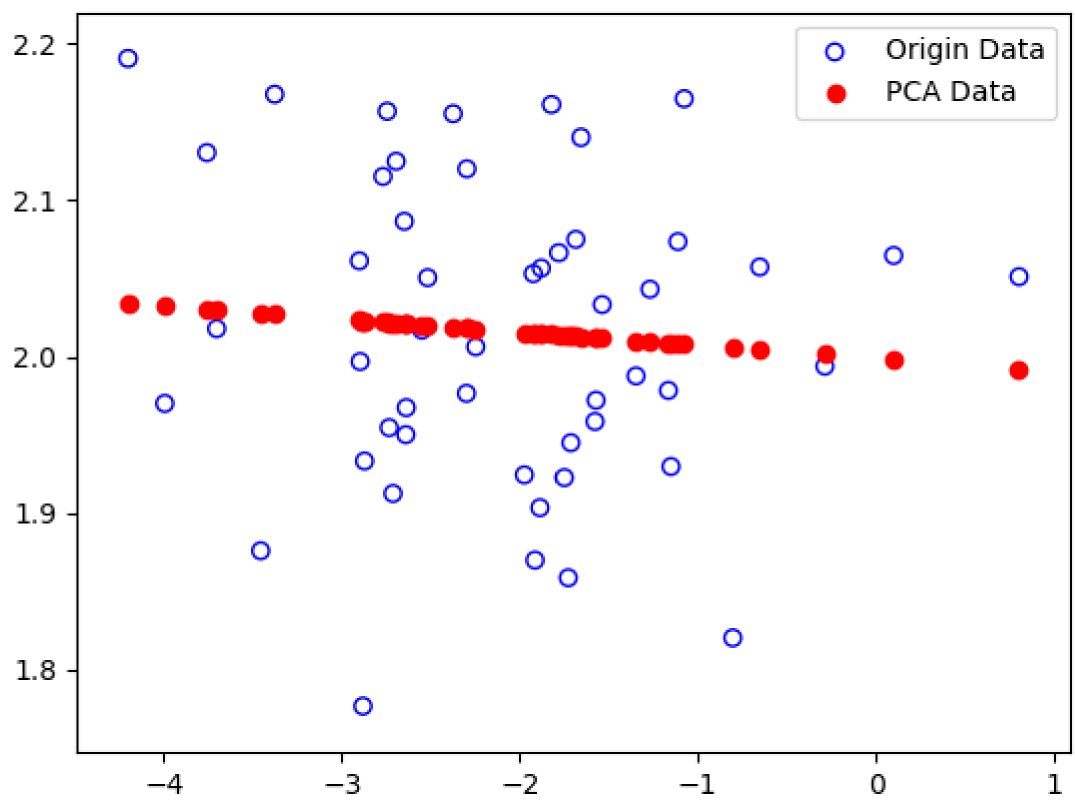
为了方便进行数据可视化，在这里只进行了**2**维数据和**3**维数据的在**PCA**前后的对比实验。

2维数据的测试

在2维数据的测试中，选择使用2维高斯分布产生样本，使用的参数为：

$$\mathbf{mean} = \begin{bmatrix} -2, 2 \end{bmatrix}, \ \mathbf{cov} = \begin{bmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

可以看到第1维的方差远小于第2维的方差$(0.01 \ll 1)$，因此有直观感觉在第2维包含了更多的信息，所以直接进行PCA，得到的结果如下：



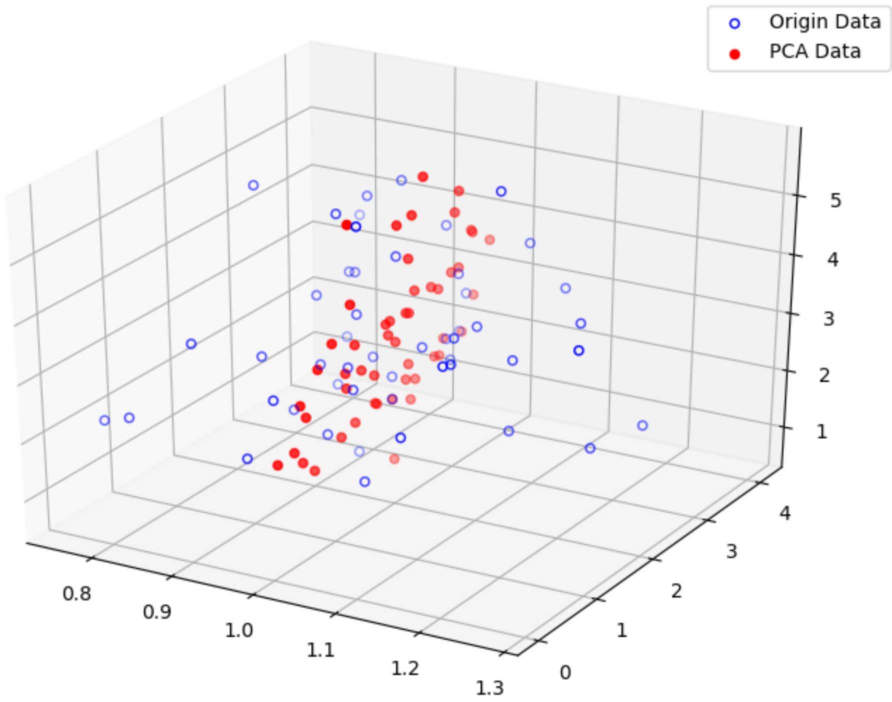
可以看到在PCA之后的数据分布在直线(1维)上，另外其在横轴上的方差更大，纵轴上的方差更小(注意横轴纵轴在单位长度上表示的大小不同)，所以在进行PCA之后得到的直线与横轴接近。

3维数据的测试

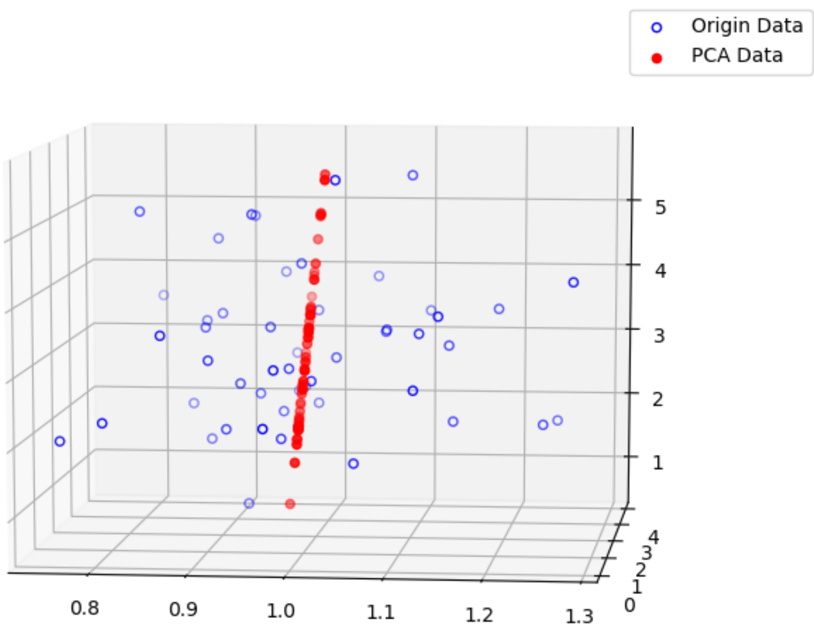
在3维数据的测试中，使用3维高斯分布随机产生样本，使用的参数为：

$$\mathbf{mean} = \begin{bmatrix} 1, 2, 3 \end{bmatrix}, \ \mathbf{cov} = \begin{bmatrix} 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

同样，可以看到第1维的方差是远小于其余两个维度的，所以在第1维相较于其他两维信息更少，进行PCA得到的结果如下：

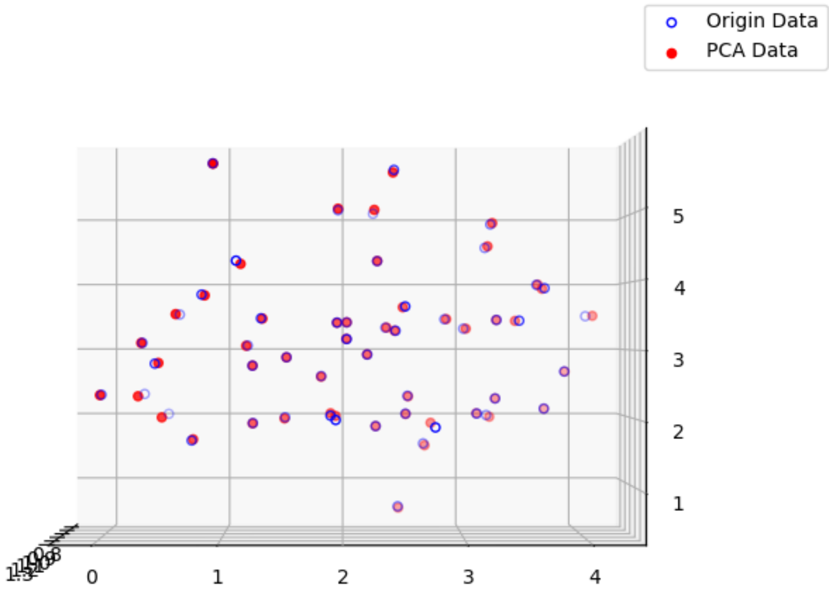


可以看到在底面的一个轴的单位长度表示的长度更小，即在原始数据上的第1维数据，对上面的图片进行旋转，我们可以看到：



降维后的数据分布在一个平面(2维)上，并且与方差最小的1维相垂直。

对比其他方向，可以看到经过PCA将样本数据进行了投影，投影在了一个平面上，如下图所示。



2.mnist手写数据集测试

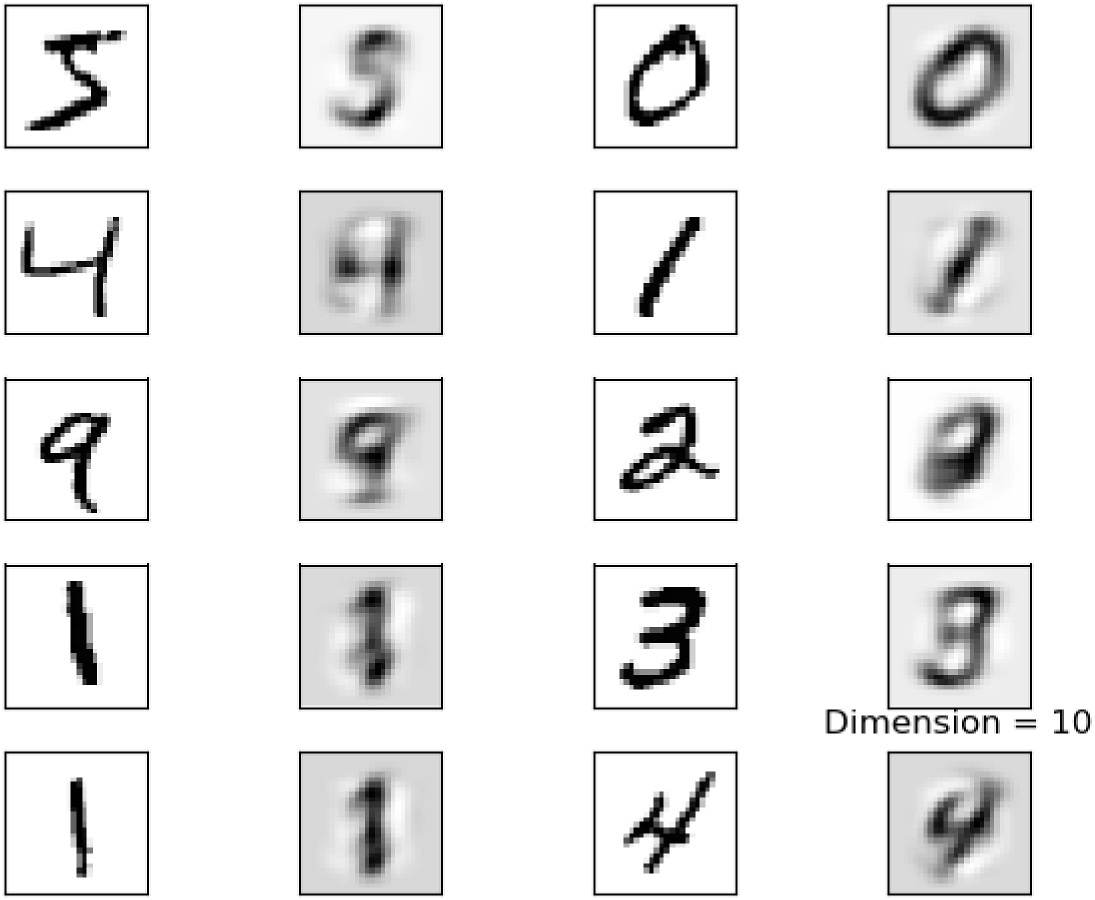
MNIST数据集来自美国国家标准与技术研究所(National Institute of Standards and Technology)，在本次实验中仅使用了其中的训练集(training set)部分，来自250个不同人手写的数组构成，其中50%为高中学生，50%来自人口普查局的工作人员。

图片是以字节的形式进行存储的，训练集包括60000个样本。每张图片由28*28个像素点组成，每个像素点用一个灰度值表示，总的来说每个样本有784个属性。

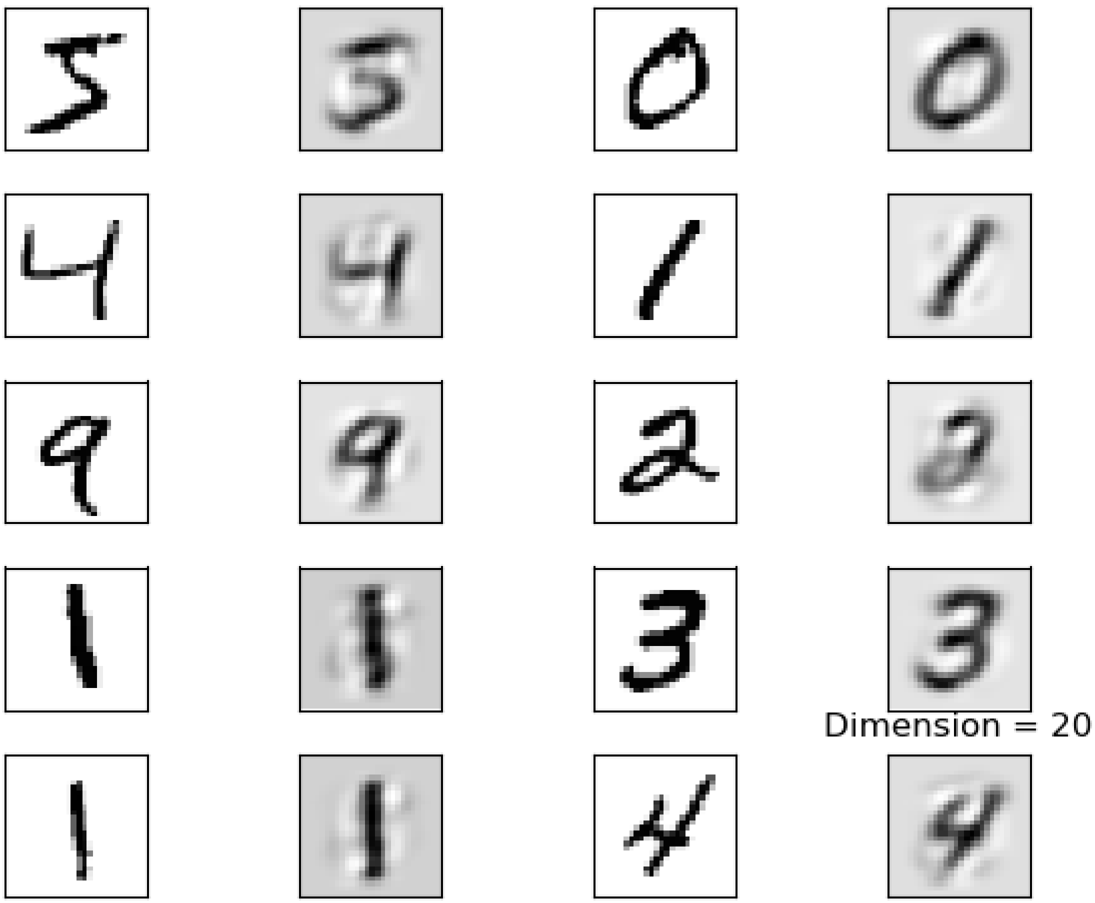
在读取时，我们使用训练集，分别得到训练集矩阵(60000*784)，每一行代表一张图片，训练集对应的label(60000*1)，每一行为0~9，表示对应行的图片代表的数字。

在训练时，我们将784维的数据分别降维到10，20，30，60，100维，并对其对应的信噪比进行对比，得到下面的结果。

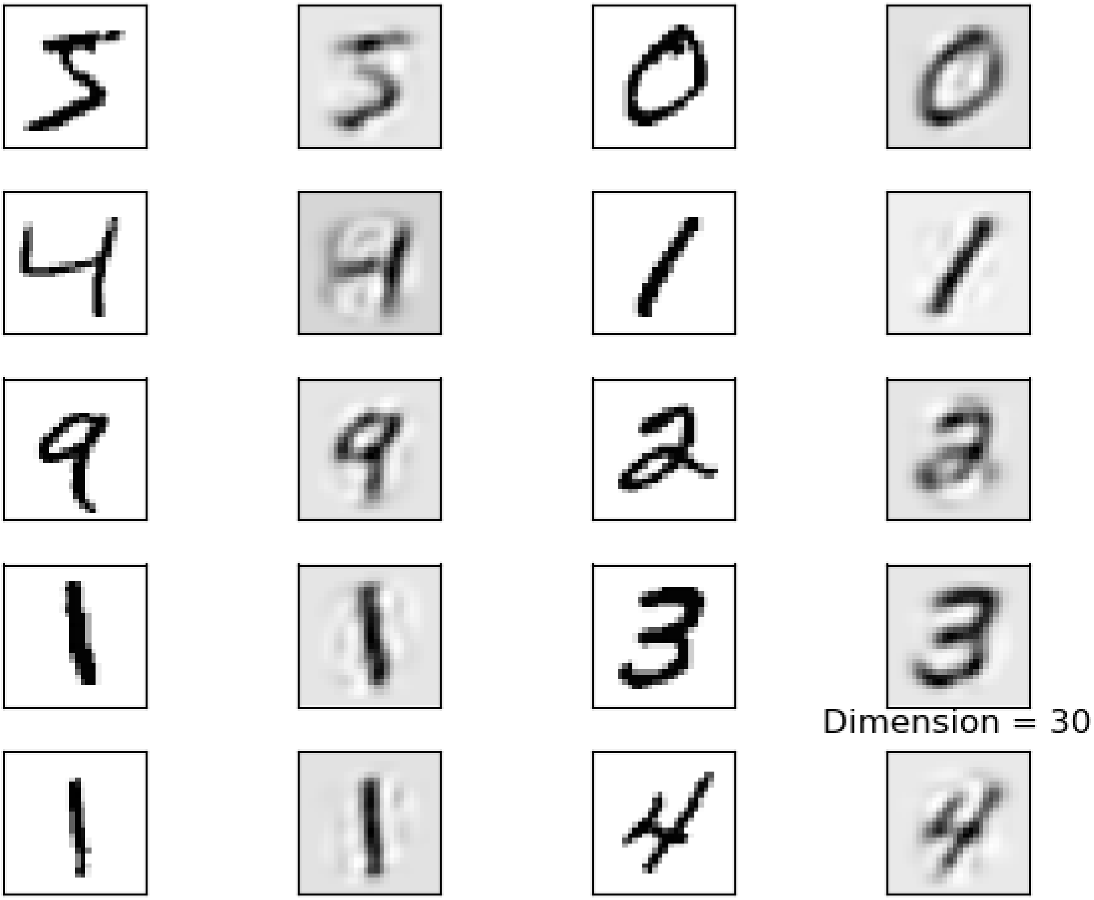
每张图片左侧为**784**维原始数据显示结果，右侧为对应的**PCA**之后的图像。

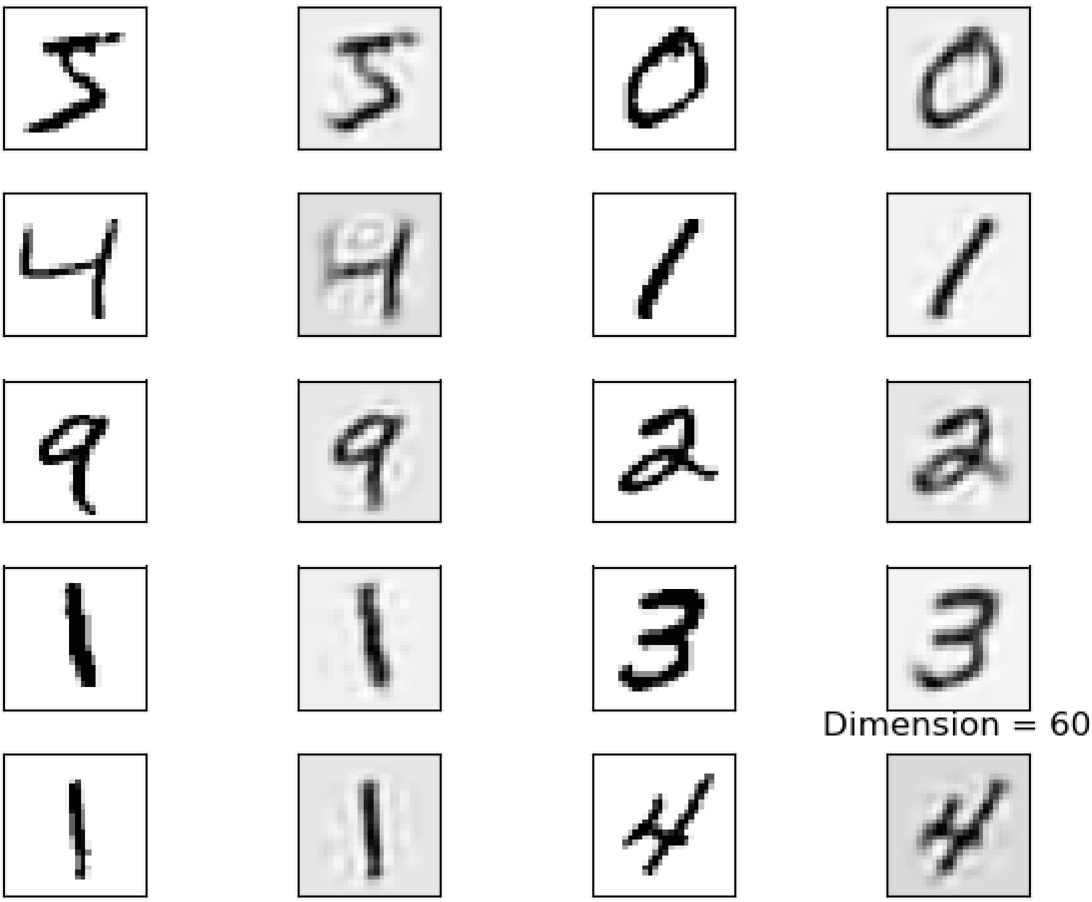


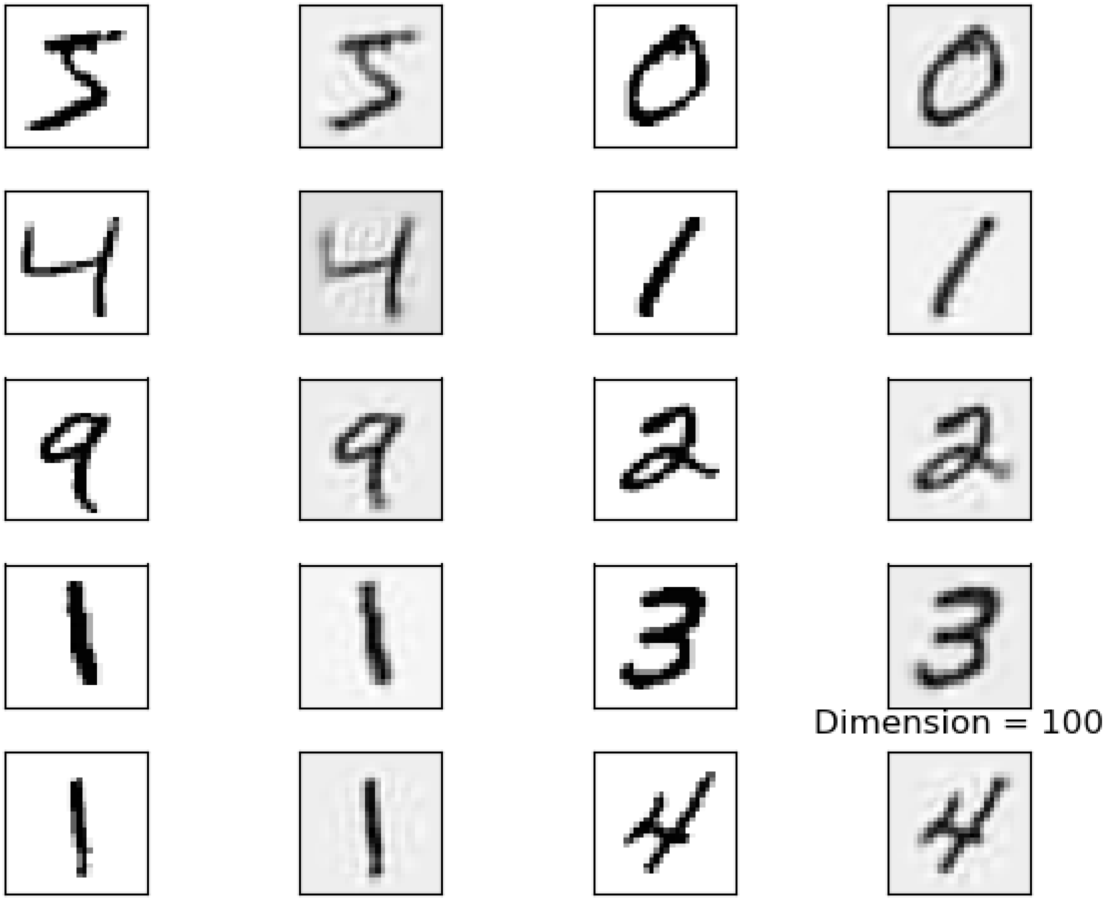
降维到10的时候，有些数字已经可以大致分，如`0`， `1`，但是对于其余数字还不能区分。



降维到20维时，可以看到又有一些数字，比如数字9， 3已经可以分辨了，但是仍然有些数字比较模糊，特别是这里的2，进一步提高低维空间的维数。







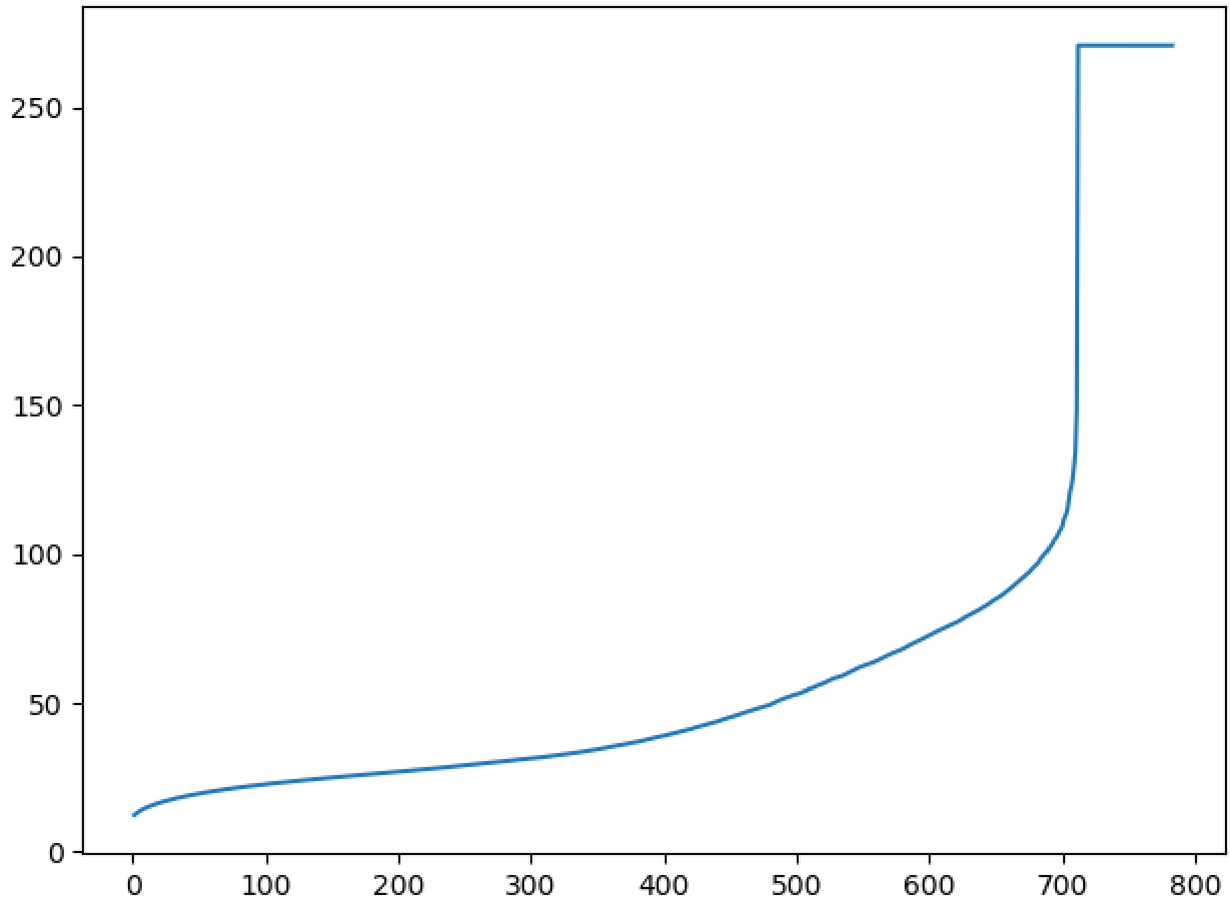
可以看到，随着低维空间的维数提高，对于源数据的信息保留的更加全面。

使用的信噪比的公式为:

$$MSE = \frac{1}{MN}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}||I(i,j)-K(i,j)||^2$$

$$PSNR = 10\cdot\log_{10}\left(\frac{MAX_I^2}{MSE}\right) = 20\cdot\log_{10}\left(\frac{MAX_I}{\sqrt{MSE}}\right)$$

下面是不同维数下信噪比的记录，可以观察到随着低维空间的维数升高，信噪比在上升。这与“清晰程度”的变化是一致的。



五、结论

- PCA算法中舍弃了$n-d$个最小的特征值对应的特征向量，一定会导致低维空间与高维空间不同，但是通过这种方式有效提高了样本的采样密度；并且由于较小特征值对应的往往与噪声相关，通过PCA在一定程度上起到了降噪的效果。
- PCA降低了训练数据的维度同事保留了主要信息，但在训练集上的主要信息未必是重要信息，被舍弃掉的信息未必无用，只是在训练数据上没有表现，因此PCA也有可能加重了过拟合。
- PCA不仅将数据压缩到低维，并且将降维之后的各维特征相互独立。
- 保留均值向量，能够通过向量减法将新样本进行中心化。

六、参考文献

- THE MNIST DATABASE of handwritten digits
- Christopher Bishop. Pattern Recognition and Machine Learning.
- 周志华 著. 机器学习, 北京: 清华大学出版社, 2016.1
- AI算法工程师手册 数据降维

七、附录:源代码(带注释)

仅有`lab4.py`文件，见压缩包