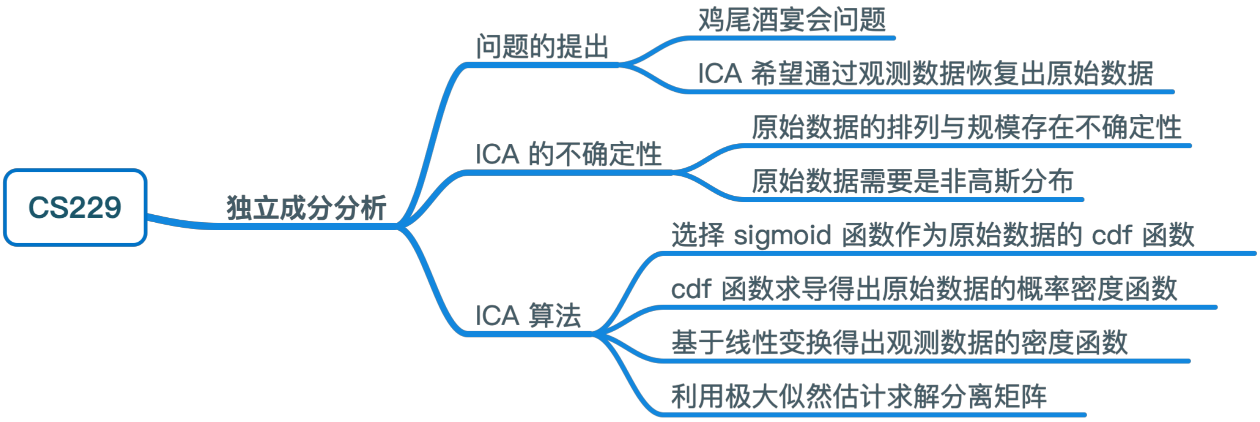
第十二章 独立成分分析



问题的提出

- ICA 与 PCA 类似，也会找到一个新基底来表示数据，但两者的目标完全不同
- ICA 的一个典型案例是“鸡尾酒宴会问题“：
  - 在一个宴会上有 n 个人同时说话，并且房间里的麦克风只接收到了这 n 个声音的叠加
  - 假定该房间有 n 个麦克风，则每个麦克风记录了说话者声音的不同叠加（由于距离不同）
  - 我们希望基于这些麦克风记录的声音，来还原原始的 n 名说话者的声音信号
- 该问题可以用如下数学公式进行表达：
  - 给定 n 个独立信号源 $s \in \mathbb{R}^n$，我们观察到的数据为：

$$x = As$$

    - 其中 A 是一个未知的方阵，称为**混合矩阵**
    - 重复的观察可以得到一个数据集 $\{x^{(i)}; i = 1, \ldots, m\}$
    - 我们的目标是通过观察数据恢复出原始数据 $s^{(i)}$ （$x^{(i)} = As^{(i)}$）
  - 在鸡尾酒宴会问题中：
    - $s^{(i)}$ 是一个 n 维向量，$s_j^{(i)}$ 是说话者 j 在 时间 i 发出的声音
    - $x^{(i)}$ 是一个 n 维向量，$x_j^{(i)}$ 是麦克风 j 在 时间 i 记录的声音
  - 定义 $W = A^{-1}$ 为**分离矩阵**，则我们的目标是找到 W，从而给定麦克风的记录 $x^{(i)}$，我们通过下式恢复出原始数据：

$$s^{(i)} = Wx^{(i)}$$

    - 为了符号方便，我们令 w_i^T 表示 W 的第 i 行，则

$$W = \begin{bmatrix} — w_1^T — \\ \vdots \\ — w_n^T — \end{bmatrix}$$

    - 因此，$w_i \in \mathbb{R}^n$，原始数据的第 j 个分量可以表示为 $s_j^{(i)} = w_j^T x^{(i)}$

ICA 的不确定性

- 实际上，如果仅给定观察数据而缺乏相关的先验知识，则恢复的原始数据会存在不确定性
    - 第一点不确定性是原始数据的**排列**（permutation）
        - 仅给定 $x^{(i)}$，我们无法区分求得的分离矩阵是 W 还是 PW
            - P 是置换矩阵，每行每列均只包含 1 个 1，用于变换向量中元素的排列顺序
        - 大部分情况下，原始数据的排列顺序对结果并没有影响
    - 第二点不确定性是原始数据的**规模**（scaling）
        - 如果将 A 的某一列乘以系数 α，则对应的而原始数据分量会变为原来的 $1/\alpha$
            - 仅给定 $x^{(i)}$ 的情况下，我们同样无法发现这一点
        - 与之前类似，这对最终结果的影响并不大（鸡尾酒问题中只是音量发生了变化）
- 除了上面两点不确定性之外，原始数据 s 还需要是**非高斯分布**的
    - 假定 $n=2$，s 满足多元高斯分布 $s \in \mathcal{N}(0, I)$（多元高斯分布的各分量也是独立的）
        - 则其密度函数的图像是一个以原点为中心旋转对称的圆形
        - 假定我们观测到了某个 $x = As$，则 x 也满足高斯分布 $x \in \mathcal{N}(0, AA^T)$

$$\mathrm{E}(xx^T) = \mathrm{E}[Ass^TA^T] = AA^TI = AA^T$$

        - 令 R 是一个任意正交矩阵（旋转矩阵），则令 $A' = AR$，基于 A' 观测得到的 $x' = A's$ 将满足同样的正态分布 $x' \in \mathcal{N}(0, AA^T)$
            - 这会导致我们无法求解出准确的混合矩阵
    - 只要数据是非高斯分布且数据量足够，就有可能恢复出其 n 个独立的原始数据

密度函数与线性变换

- 在推导 ICA 算法之前，先简单介绍一下概率密度函数的线性变换
    - 概率密度函数的积分为 1（表示概率之和）
- 一般来说，如果 s 是一个密度为 p_s 的向量值分布，$x = As$ 且 A 是一个可逆方阵，那么 x 的密度函数为：

$$p_x(x) = p_s(Wx)|W|$$

    - 其中 $W = A^{-1}$
    - 利用逆矩阵与行列式的关系以及概率密度函数的性质可以证明

ICA 算法

- 下面将正式介绍 ICA 算法
    - 这里使用极大似然估计进行推导，原始论文中使用了更加复杂的方法（informax principal）
- 假定每个数据源 s_j 的概率密度函数为 p_s，则数据源 s 的联合分布为：

$$p(s) = \prod_{j=1}^{n} p_s(s_j)$$

    - 上式还保证了各个数据源是独立的
- 利用上一节的结论，我们有：

$$p(x) = \prod_{j=1}^{n} p_s(w_j^T x) \cdot |W|$$

- 我们知道，给定一个实数随机变量 z ，其累积分布函数（cdf）定义为：

$$F(z_0) = P(z \leq z_0) = \int_{-\infty}^{z_0} p_z(z) dz$$

  - 且密度函数与累计分布函数的关系为：$p_z(z) = F'(z)$
- 因此，为了确定 s_j 的密度函数，我们只需要确定其累计分布函数
  - 累计分布函数是一个从 0 到 1 的单增函数
  - 我们不能选择累计分布函数为高斯分布的 cdf 函数，这里将选择 sigmoid 函数（并没有什么特别的理由）

$$g(s) = \frac{1}{(1+e^{-s})}$$

    - 此处默认了原始数据的均值为 0
- 在我们的模型中，待优化的参数为分离矩阵 W，给定一个训练集 $\{x^{(i)}; i = 1, \ldots, m\}$，其对数似然函数为：

$$\ell(W) = \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} \log g'\left(w_j^T x\right) + \log |W| \right)$$

  - 利用 $\nabla_W |W| = |W| (W^{-1})^T$ 进行求导，可得到如下随机梯度上升的更新规则：

$$W := W + \alpha \left(\begin{bmatrix} 1 - 2g(w_1^T x^{(i)}) \\ 1 - 2g(w_2^T x^{(i)}) \\ \vdots \\ 1 - 2g(w_n^T x^{(i)}) \end{bmatrix} x^{(i)^T} + (W^T)^{-1} \right)$$

    - α 是学习速率
- 最后，当算法收敛后，通过 $s^{(i)} = W x^{(i)}$ 即可恢复出原始数据
- 注意：在计算似然函数时我们假设了各个训练样本（不是每个训练样本的分量）之间相互独立，然而对于语音信号等数据来说，该假设并不能成立
  - 然而在数据量足够大时，算法仍然能取得不错的效果
  - 这种情况下（不独立），在运行随机梯度上升前事先打乱原始数据，能够提升收敛的速度