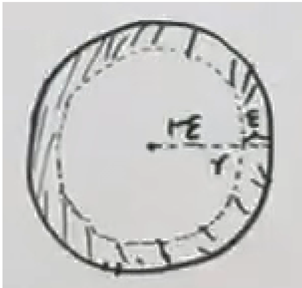
# 1.降维的基本介绍

机器学习领域中所谓的降维就是指采用某种映射方法，将原高维空间中的数据点映射到低维度的空间中。降维的本质是学习一个映射函数 f : x->y，其中x是原始数据点的表达，目前最多使用向量表达形式。 y是数据点映射后的低维向量表达，通常y的维度小于x的维度（当然提高维度也是可以的）。f可能是显式的或隐式的、线性的或非线性的。

关于维度灾难的一个理解角度：

假设存在下面这样一个球，D维，其半径为r=1，里面圆环的长度为$\varepsilon$




则我们可以计算得知

$$\begin{aligned}
&V_{\text{外}} = K \cdot 1^D = K \\
&V_{\text{环}} = V_{\text{外}} - V_{\text{内}} \\
&= k - k \cdot (1-\varepsilon)^D \\
&\frac{V_{\text{环}}}{V_{\text{外}}} = \frac{k - k(1-\varepsilon)^D}{k} = 1 - (1-\varepsilon)^D
\end{aligned}$$

$K$为一个常数，由于0<$\varepsilon$<1，因此$\lim_{D\to\infty}(1-\varepsilon)^D = 0$，则$\lim_{D\to\infty}\frac{V_{\text{环}}}{V_{\text{外}}} = 1$。这就是所谓的维度灾难，在高维数据中，主要样本都分布在立方体的边缘，所以数据集更加稀疏。

那从另外一个角度来看：为什么dimension reduction可能是有用的，如上图所示，假设你的data分布是这样的(在3D里面像螺旋的样子)，但是用3D空间来描述这些data其实是很浪费的，其实你从资源就可以说：你把这个类似地毯卷起来的东西把它摊开就变成这样(右边的图)。所以你只需要在2D的空间就可以描述这个3D的information，你根本不需要把这个问题放到这个3D来解，这是把问题复杂化，其实你可以在2D就可以做这个task

## 1.1常见降维算法比较

**降维的算法分为：**

1. 直接降维，特征选择
2. 线性降维，PCA，MDS等
3. 分线性，流形包括 Isomap，LLE 等

| 算法名称 | 线性/非线性 | 有监督/无监督 | (超)参数 | 是否去中心化 | 目标 | 假设 | 涉及矩阵 | 解的形式 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| PCA | 线性 | 无监督 | W,d | 是 | 降维后的低维样本之间每一维方差尽可能大 | 低维空间相互正交 | C,W | 取C前d个最大特征值对应特征向量排列成线性变换W的列 |
| MDS | 非线性 | 无监督 | d | 是 | 降维的同时保证数据之间的相对关系不变 | 已知高维空间的N个样本之间的距离矩阵 | E,A | 取E前d个最大特征值对应特征向量排列成低维矩阵Z的列 |
| LDA | 线性 | 有监督 | W,d | 否 | 降维后同一类样本之间协方差尽可能小，不同类中心距离尽可能大 | 数据能够被分成d+1类 | $S_w, S_b, W$ | 取 $S_w^{-1}S_b$ 特征分解的前d个最大特征值对应特征向量排列成W |
| Isomap | 非线性 | 无监督 | d,k | 是 | 降维的同时保证高维数据的流形不变 | 高维空间的局部区域上某两点距离可以由欧式距离算出 | E,A | 与MDS一致 |
| LLE | 非线性 | 无监督 | d,k | 是 | 降维的同时保证高维数据的流形不变 | 高维空间的局部区域上某一点是相邻K个点的线性组合，低维空间各维正交 | F,M | 取M前d个非0最小特征值对应特征向量构成 |
| t-SNE | 非线性 | 无监督 | K=2/3 | - | 降维到二维或者三维可视化 | 在高维空间中，一个点的取值服从以另外一个点为中心的高斯分布。在低维空间中，两个点之间的欧式距离服从自由度为1的t分布 | P,Q | 梯度下降的方式来更新低维空间的Z |
| Auto encoder | 非线性 | 无监督 | $W_l, l, D_l$ | - | 这个网络能够重构输入数据 | 网络能够学习到数据内部的一些性质或者结构 | $W_l$ | 网络最后一层的输出 |

### 1.2sklearn中的降维算法

| 类 | 说明 |
|---|---|
| **主成分分析** | |
| decomposition.PCA | 主成分分析（PCA） |
| decomposition.IncrementalPCA | 增量主成分分析（IPCA） |
| decomposition.KernelPCA | 核主成分分析（KPCA） |
| decomposition.MiniBatchSparsePCA | 小批量稀疏主成分分析 |
| decomposition.SparsePCA | 稀疏主成分分析（SparsePCA） |
| decomposition.TruncatedSVD | 截断的SVD（aka LSA） |
| | |
| **因子分析** | |
| decomposition.FactorAnalysis | 因子分析（FA） |
| | |
| **独立成分分析** | |
| decomposition.FastICA | 独立成分分析的快速算法 |
| | |
| **字典学习** | |
| decomposition.DictionaryLearning | 字典学习 |
| decomposition.MiniBatchDictionaryLearning | 小批量字典学习 |
| decomposition.dict_learning | 字典学习用于矩阵分解 |
| decomposition.dict_learning_online | 在线字典学习用于矩阵分解 |
| | |
| **高级矩阵分解** | |
| decomposition.LatentDirichletAllocation | 具有在线变分贝叶斯算法的隐含狄利克雷分布 |
| decomposition.NMF | 非负矩阵分解（NMF） |
| | |
| **其他矩阵分解** | |
| decomposition.SparseCoder | 稀疏编码 |

**本章节主要介绍一下PCA**

## 2. 主成分分析PCA

视频讲解参考：

- 李宏毅老师视频：https://www.bilibili.com/video/BV1Ht411g7Ef?p=24
- 白板机器学习：https://www.bilibili.com/video/BV1aE411o7qd?p=22

### 2.1损失函数

我们假设数据集为

$$X_{N\times p}=(x_1,x_2,\cdots,x_N)^T,x_i=(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{ip})^T$$

这个记号表示有 $N$ 个样本，每个样本都是 $p$ 维向量。其中每个观测都是由 $p(x|\theta)$ 生成的。

为了方便，我们首先将协方差矩阵（数据集）写成中心化的形式：

$$
\begin{aligned}
S &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(x_i-\bar{x}\right)\left(x_i-\bar{x}\right)^T \\
&= \frac{1}{N}\left(x_1-\bar{x}, x_2-\bar{x}, \cdots, x_N-\bar{x}\right)\left(x_1-\bar{x}, x_2-\bar{x}, \cdots, x_N-\bar{x}\right)^T \\
&= \frac{1}{N}\left(X^T-\frac{1}{N}X^T\mathbb{I}_{N1}\mathbb{I}_{N1}^T\right)\left(X^T-\frac{1}{N}X^T\mathbb{I}_{N1}\mathbb{I}_{N1}^T\right)^T \\
&= \frac{1}{N}X^T\left(E_N-\frac{1}{N}\mathbb{I}_{N1}\mathbb{I}_{1N}\right)\left(E_N-\frac{1}{N}\mathbb{I}_{N1}\mathbb{I}_{1N}\right)^T X \\
&= \frac{1}{N}X^T H_N H_N^T X \\
&= \frac{1}{N}X^T H_N H_N X = \frac{1}{N}X^T H X
\end{aligned}
$$

这个式子利用了中心矩阵 $H$的对称性，这也是一个投影矩阵。

主成分分析中，我们的基本想法是将所有数据投影到一个字空间中，从而达到降维的目标，为了寻找这个子空间，我们基本想法是：

1. 所有数据在子空间中更为分散
2. 损失的信息最小，即：在补空间的分量少

原来的数据很有可能各个维度之间是相关的，于是我们希望找到一组 $p$ 个新的线性无关的单位基 $u_i$，降维就是取其中的 $q$ 个基。于是对于一个样本 $x_i$，经过这个坐标变换后：

$$
\hat{x_i}=\sum_{i=1}^{p}(u_i^Tx_i)u_i=\sum_{i=1}^{q}(u_i^Tx_i)u_i+\sum_{i=q+1}^{p}(u_i^Tx_i)u_i
$$

对于数据集来说，我们首先将其中心化然后再去上面的式子的第一项，并使用其系数的平方平均作为损失函数并最大化：

$$
\begin{aligned}
J &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{q}\left(\left(x_i-\bar{x}\right)^T u_j\right)^2 \\
&= \sum_{j=1}^{q}u_j^T S u_j, \ \text{s.t.}\ u_j^T u_j=1
\end{aligned}
$$

由于每个基都是线性无关的，于是每一个 $u_j$ 的求解可以分别进行，使用拉格朗日乘子法：

$$
\underset{u_j}{argmax}\, L(u_j,\lambda)=\underset{u_j}{argmax}\, u_j^TSu_j+\lambda(1-u_j^Tu_j)
$$

于是：

$$
Su_j=\lambda u_j
$$

可见，我们需要的基就是协方差矩阵的本征矢。损失函数最大取在本征值前 $q$ 个最大值。

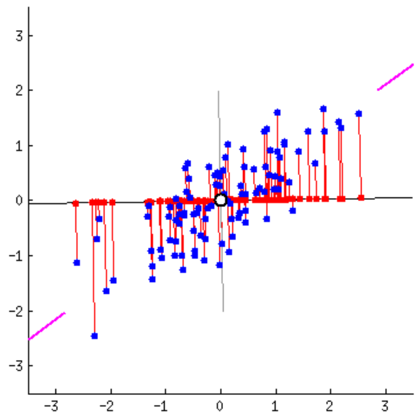
下面看其损失的信息最少这个条件，同样适用系数的平方平均作为损失函数，并最小化：

$$
\begin{aligned}
J &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=q+1}^{p}\left(\left(x_i-\bar{x}\right)^T u_j\right)^2 \\
&= \sum_{j=q+1}^{p}u_j^T S u_j, \ \text{s.t.}\ u_j^T u_j=1
\end{aligned}
$$

同样的：

$$\underset{u_j}{argmin}\, L(u_j, \lambda) = \underset{u_j}{argmin}\, u_j^T S u_j + \lambda(1 - u_j^T u_j)$$

损失函数最小取在本征值剩下的个最小的几个值。数据集的协方差矩阵可以写成 $S = U\Lambda U^T$，直接对这个表达式当然可以得到本征矢。




## 2.2SVD 与 PCoA

下面使用实际训练时常常使用的 SVD 直接求得这个 $q$ 个本征矢。

对中心化后的数据集进行奇异值分解：

$$HX = U\Sigma V^T, U^T U = E_N, V^T V = E_p, \Sigma : N \times p$$

于是：

$$S = \frac{1}{N} X^T H X = \frac{1}{N} X^T H^T H X = \frac{1}{N} V \Sigma^T \Sigma V^T$$

因此，我们直接对中心化后的数据集进行 SVD，就可以得到特征值和特征向量 $V$，在新坐标系中的坐标就是：

$$HX \cdot V$$

由上面的推导，我们也可以得到另一种方法 PCoA 主坐标分析，定义并进行特征值分解：

$$T = HXX^T H = U\Sigma\Sigma^T U^T$$

由于：

$$TU\Sigma = U\Sigma(\Sigma^T \Sigma)$$

于是可以直接得到坐标。这两种方法都可以得到主成分，但是由于方差矩阵是 $p \times p$ 的，而 $T$ 是 $N \times N$ 的，所以对样本量较少的时候可以采用 PCoA的方法。

**总结来说就是**

输入: 样本集 $D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$;
低维空间维数 $d'$.

过程:

1. 对所有样本进行中心化: $\boldsymbol{x}_i \leftarrow \boldsymbol{x}_i - \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{x}_i$;
2. 计算样本的协方差矩阵 $\mathbf{XXX}^{\mathrm{T}}$;
3. 对协方差矩阵 XXX
4. 取最大的 $d'$ 个特征值所对应的特征向量 $\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_{d'}$.
5. 输出: 投影矩阵 $\mathbf{W} = (\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_{d'})$.

## 2.3p-PCA

下面从概率的角度对 PCA 进行分析，概率方法也叫 p-PCA。我们使用线性模型，类似之前 LDA，我们选定一个方向，对原数据 $x \in \mathbb{R}^p$ ，降维后的数据为 $z \in \mathbb{R}^q, q < p$。降维通过一个矩阵变换（投影）进行：

$$
\begin{aligned}
z &\sim \mathcal{N}\left(\mathbb{O}_{q1}, \mathbb{I}_{qq}\right) \\
x &= Wz + \mu + \varepsilon \\
\varepsilon &\sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2 \mathbb{I}_{pp}\right)
\end{aligned}
$$

对于这个模型，我么可以使用期望-最大（EM）的算法进行学习，在进行推断的时候需要求得 $p(z|x)$，推断的求解过程和线性高斯模型类似。

$$
\begin{aligned}
p(z \mid x) &= \frac{p(x \mid z)p(z)}{p(x)} \\
\mathbb{E}[x] &= \mathbb{E}[Wz + \mu + \varepsilon] = \mu \\
\operatorname{Var}[x] &= WW^T + \sigma^2 \mathbb{I}_{pp} \\
\Longrightarrow p(z \mid x) &= \mathcal{N}\left(W^T\left(WW^T + \sigma^2 \mathbb{I}\right)^{-1}(x-\mu), \mathbb{I} - W^T\left(WW^T + \sigma^2 \mathbb{I}\right)^{-1} W\right)
\end{aligned}
$$

# 3.代码实践

- sklearn:PCA.ipynb
- numpy:PCA.py

# 4.常见面试题

**参考文献**


- 西瓜书
- 统计学习方法
- 维基百科
- 李宏毅老师机器学习
- https://chenrudan.github.io/blog/2016/04/01/dimensionalityreduction.html#1
- 白板机器学习
- https://wang520yan.github.io/2020/05/12/%E4%B8%BB%E6%88%90%E5%88%86%E5%88%86%E6%9E%90PCA/
- https://www.zybuluo.com/JeemyJohn/note/990690
- https://www.yuque.com/books/share/f4031f65-70c1-4909-ba01-c47c31398466/kg2npf