PCA 主成分分析与数据降维

简介

PCA (Principal Component Analysis) 主成分分析是一种重要的数据分析方式, 常常用于高维数据降为低维数据.

PCA 可以用两种方式进行数学推导, 分别称为**最大可分型**和**最近重构型**, 前者基于基变换之后的方差最大, 后者基于点到划分平面的距离最小. 在这里, 我们使用最大可分型的方式进行数学推导.

本文大部分数学推导基于【机器学习】降维——PCA —— 知乎@阿泽, 但修复了其中的一些小问题, 并做了更为完整易懂的解释, 附上了以 iris 数据集 (鸢尾花卉数据集) 为案例的相应的 python 代码实现.

投影

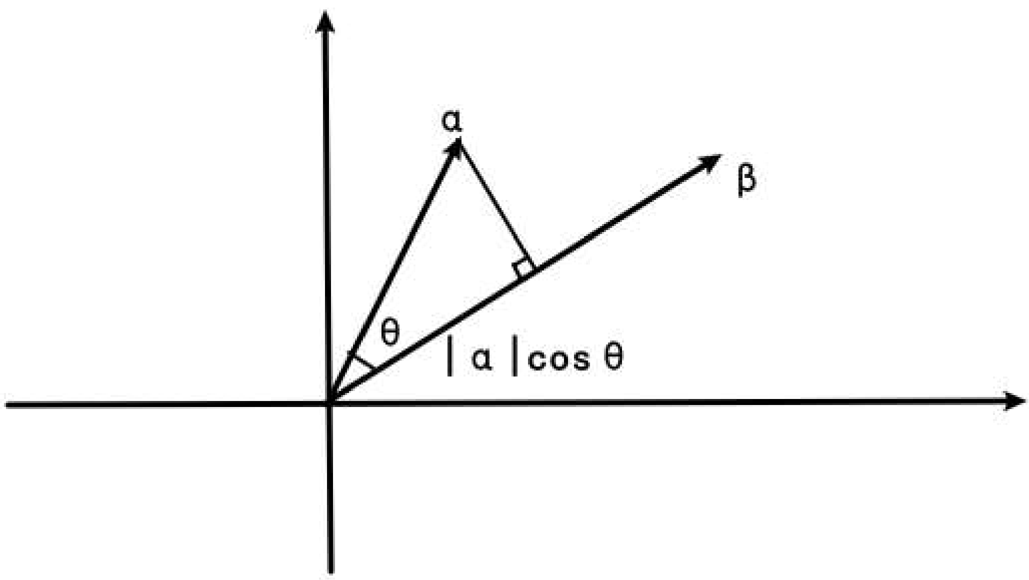
对于两个向量 $\alpha = (x_1, y_1), \beta = (x_2, y_2)$

我们知道其点乘的的几何意义为

$$\alpha \cdot \beta = x_1 x_2 + y_1 y_2 = |\alpha||\beta| \cos \theta$$

其中 θ 为 α 与 β 的夹角.

点乘的几何意义可以理解为, α 在 β 方向的的投影长度乘以 β 的长度, 如图所示:



那么我们就可以得知, α 在 β 方向上的投影长度为

$$|\alpha|\cos\theta = \frac{\alpha\cdot\beta}{|\beta|}$$

若 β 等于单位向量 e, 满足 $|e| = 1$, 则有

$$|\alpha|\cos\theta = \alpha\cdot e$$

使用 python 和 numpy 书写, 即为

```
import numpy as np

base = np.array([1 / np.sqrt(2), 1 / np.sqrt(2)])
alpha = np.array([1, 2])

shadow = alpha @ base
```

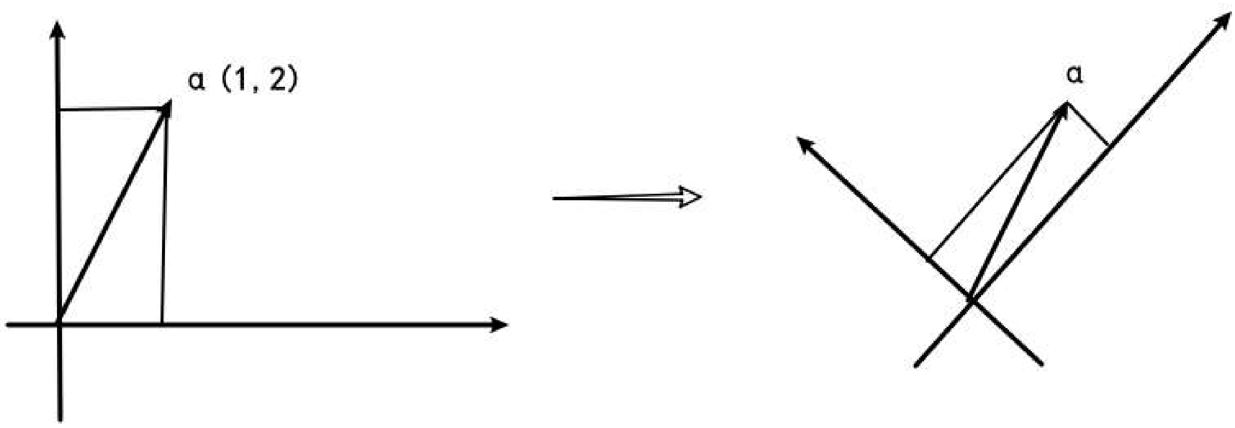
基的变换

我们令 $\alpha = (x_1, y_1)$, 其实就默认隐含了坐标系和基的概念.

这里, 我们默认使用了 $(1,0)$ 和 $(0,1)$ 作为两个基向量, 实际上我们完全可以使用其他正交的单位向量作为基向量.

例如, 我们使用 $e_1 = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$ 和 $e_2 = \begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$ 作为一组新的基, 对向量 $\alpha = \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}$ 进行分析.

由上面投影的概念和几何关系可知, 向量 α 在新的基向量 e_1, e_2 下的新坐标就是 α 到 e_1, e_2 方向上的投影:



由上述的求投影的公式可知, 新坐标 (x', y') 可以这样求得

$$x' = \alpha\cdot e_1 = \alpha^T e_1 = 1\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} + 2\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{3}{\sqrt{2}}$$

$$y' = \alpha \cdot e_2 = \alpha^T e_2 = 1 \cdot \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

即在 e_1, e_2 下的坐标为 $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$.

我们可以用矩阵描述这个变换, 其中左边的矩阵的两个行向量分别为两个新的基 e_1, e_2:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

对于多个向量 $\alpha_1(1,2), \alpha_2(2,3), \alpha_3(3,4)$ 一起做坐标变换, 可以用矩阵写为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{2}} & \frac{5}{\sqrt{2}} & \frac{7}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

推广之, 对于 r 个新的基 $e_1, e_2, \cdots, e_r$ 和 m 个要转换坐标的向量 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots \alpha_m$, 我们有

单个向量坐标变换:

$$\begin{pmatrix} e_1^T \\ e_2^T \\ \vdots \\ e_r^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1\alpha_1 \\ e_2\alpha_1 \\ \vdots \\ e_m\alpha_1 \end{pmatrix}$$

多个向量坐标变换:

$$\begin{pmatrix} e_1^T \\ e_2^T \\ \vdots \\ e_r^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1^T\alpha_1 & e_1^T\alpha_2 & \cdots & e_1^T\alpha_m \\ e_2^T\alpha_1 & e_2^T\alpha_2 & \cdots & e_2^T\alpha_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_m^T\alpha_1 & e_m^T\alpha_2 & \cdots & e_m^T\alpha_m \end{pmatrix}$$

对于数据分析, 我们可以认为每一个 α_i 均代表一个样本数据, 一共 m 个样本.

降维

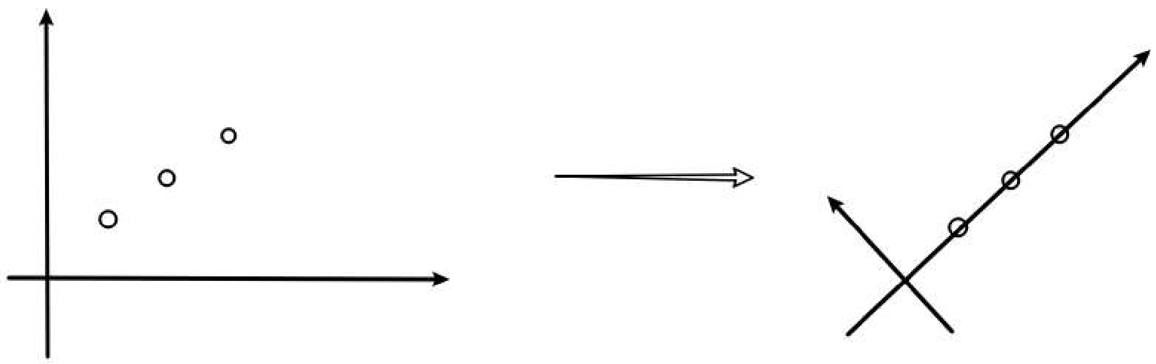
在坐标变换中, 如果我们能找到一个好的基向量, 就可以将数据聚集在坐标轴附近.

举一个极端的例子, 对于新的基向量 $e_1(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}), e_2(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ 和要进行坐标转换的向量 $\alpha_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}$

我们有

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

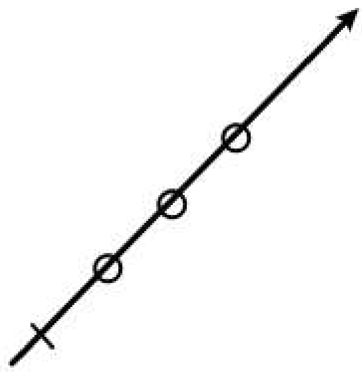
我们可以发现, 新坐标的非零部分全部聚集到了 e_1 对应的方向上, e_2 对应方向的数值全部为零, 我们可以认为信息全部聚集到了 e_1 维度上, 如图:



如果我们去除 e_2 维度, 只保留 e_1 维度的数据, 即降低了一个维度, 数据依然没有任何损失

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 3\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

如图所示:



PCA 主成分分析要做的就是找到最合适的基向量, 使得尽可能多的信息保留在少数几个维度里, 达到低损耗降维的效果.

那么如何选取最合适的基向量呢? 我们可以从方差入手.

方差和协方差

假定现在我们有两组数据, 分别是 $\alpha = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$, 并称 $x_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix}$ 为其中一个样本, 所以我们一共有 m 个样本.

举个例子, 我们可以认为 $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$ 是房子面积, $\beta = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 8 \end{pmatrix}$ 是房子价格, 其中第二个样本为 $\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix}$.

我们知道求方差的公式为

$$\operatorname{Var}(\alpha) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (a_i - \mu)^2$$

其中 μ 为均值

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i$$

相应的 python 实现:

```
import numpy as np

alpha = np.array([1., 3., 5.])
average = np.mean(alpha)
variance = ((alpha - average) ** 2).sum() / len(alpha)
```

为了简化公式, 我们可以将原式数据进行"中心化", 即将每一个数据都减去它的均值, 此时 $\alpha = \begin{pmatrix} a_1 - \mu \\ a_2 - \mu \\ \vdots \\ a_m - \mu \end{pmatrix}$ 则方差公式可以简化为

$$\operatorname{Var}(\alpha) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i^2$$

相应的 python 实现:

```
import numpy as np

alpha = np.array([1., 3., 5.])
alpha -= np.mean(alpha)
variance = (alpha ** 2).sum() / len(alpha)
```

方差描述的是数据的离散程度, 而协方差描述表示两个变量的相关性.

协方差公式为:

$$\operatorname{Cov}(\alpha, \beta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (a_i - \mu_\alpha)(b_i - \mu_\beta)$$

经过"中心化"之后, 协方差公式可以简化为:

$$\operatorname{Cov}(\alpha, \beta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i b_i$$

相应的 python 实现:

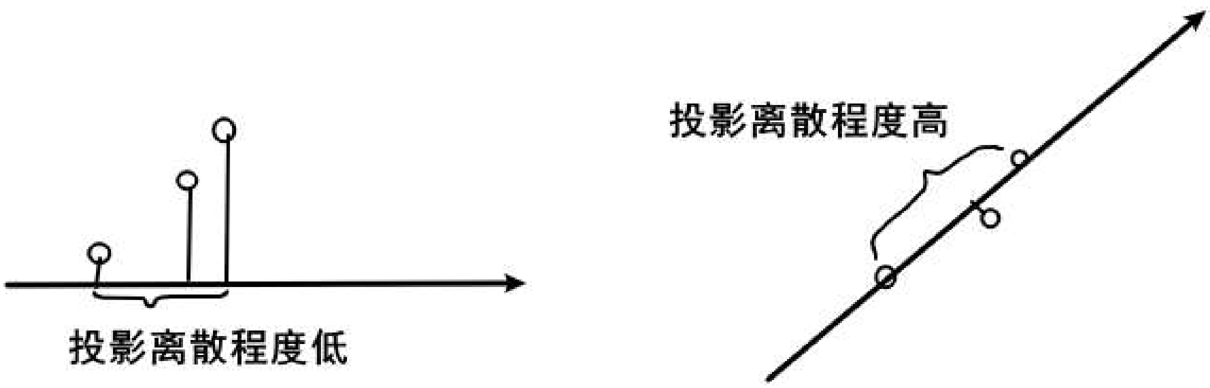
```python
import numpy as np

alpha = np.array([1., 3., 5.])
beta = np.array([2., 5., 8.])
alpha -= np.mean(alpha)
beta -= np.mean(beta)
covariance = (alpha * beta).sum() / len(alpha)
```

当协方差大于 0 时, 两个向量正相关, 当协方差小于零时, 两个向量负相关, 当协方差等于 0 时, 两个向量线性无关.

主成分分析

要推导出 PCA 最佳的基向量, 我们需要制定一个优化标准.

由几何意义我们可以很简单地看出, **所选取的基向量越好, 数据在该方向上的投影的离散程度越大**.

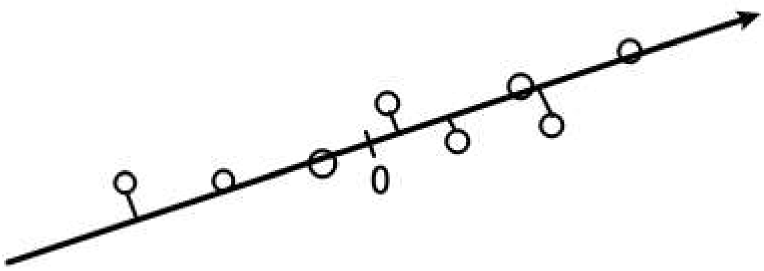


受到最小二乘法的启发, 我们可以以最大化方差为目标.

对于一个基向量 $e = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$, 我们将所有的样本点 $x_i = \begin{pmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ \vdots \\ x_{in} \end{pmatrix}, i = 1, 2, \cdots, m$ 投影到 e 方向上.

即有 x_i 在基 e 下的投影长度坐标值 $x_i^T e = \sum_{j=1}^{n} e_j x_{ij}$

如图:



则在**这个基向量方向上的方差**为

$$\mathrm{Var}(x) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i^T e)^2$$

我们只需要将该方差最大化, 解出基向量 e 对应的值, 即转化成了一个求极值的问题.

因为 $x_i^T e$ 是标量, 所以有 $(x_i^T e)^T = x_i^T e$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}(x) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i^T e)^2 \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i^T e)^T (x_i^T e) \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} e^T (x_i x_i^T) e \\
&= e^T \left(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i x_i^T\right) e
\end{aligned}$$

我们令 $P = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i x_i^T$, 为了更好地说明问题, 我们可以先令 $x_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix}$

$$
\begin{aligned}
P &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i x_i^T \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\begin{pmatrix} a_i^2 & a_i b_i \\ a_i b_i & b_i^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} a_i^2 & \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} a_i b_i \\ \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} a_i b_i & \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} b_i^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathrm{Var}(a) & \mathrm{Cov}(a,b) \\ \mathrm{Cov}(a,b) & \mathrm{Var}(b) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

即 P 对角线上的元素为 x_i 在各个方向的方差, 同时对角线之外的元素为各个方向元素之间的协方差. 这个结论从 2 维推广到 n 维也成立.

对于求最值问题:

$$
\begin{cases} \max\{e^T P e\} \\ s.t. e^T e = 1 \end{cases}
$$

使用拉格朗日乘数法可构造出

$$
L(e) = e^T P e + \lambda(1 - e^T e)
$$

对于 e 求导化简可得

$$
Pe = \lambda e
$$

即有 λ 是 P 的特征值, e 是 P 的特征向量, 仅在此时取得极值.

并且将 $Pe = \lambda e$ 代回原式有

$$
\mathrm{Var}(x) = e^T P e = e^T \lambda e = \lambda e^T e = \lambda
$$

即**方差等于 P 的特征值 λ**. 那么我们可知, 我们要找的最大方差便是 P 的最大特征值, 第二大方差即 P 的第二大特征值, 依次类推. 它们对应的特征向量即我们需要的基向量.

我们称 P 为协方差矩阵, 它是一个实对称矩阵, 根据线性代数相关的知识, 我们知道它有一个性质:

一个 n 行 n 列的实对称矩阵一定可以找到 n 个单位正交特征向量. 我们令这 n 个特征向量分别为 $e_1, e_2, \cdots, e_n$, 按照特征值由大到小的顺序从左到右排列, 再将这 n 个列向量排列成为矩阵 $E = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix}$, 则有

$$E^TPE = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

可见, 使用 n 个单位正交的特征向量作为新的基向量, 在新坐标中满足: **方差 (对角线元素) 最大**和**协方差 (非对角线元素) 最小**.

我们令 $X = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{m1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{mn} \end{pmatrix}$, 每一列都是一个样本.

则 P 可以记作

$$P = \frac{1}{m}XX^T$$

我们只需要解出 $\dfrac{1}{m}X^TX$ 的特征值和特征向量即可.

然后对于新的基矩阵 $E = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix}$, 根据投影和基变换的概念我们可以求出变换后的坐标:

$$X' = E^TX$$

如果我们只选取前 k 个特征值和特征向量, 取得新的基矩阵 $E_k = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_k \end{pmatrix}$, 则

$$X' = E_k^TX$$

便达到了降维的效果.

求解步骤

我们有 m 个 n 维的样本数据.

1. 将原始数据转化成为一个 n 行 m 列的数据矩阵 X;
2. 每一行减去均值, 进行"中心化";
3. 求出协方差矩阵 $P = \dfrac{1}{m}XX^T$;
4. 求出协方差矩阵的特征值和特征向量, 形成特征矩阵;
5. 计算 $X' = E_k^TX$, X' 即为降维过后的数据;
6. 将数据按特征值由大到小排列, 并选取前 k 维数据输出.

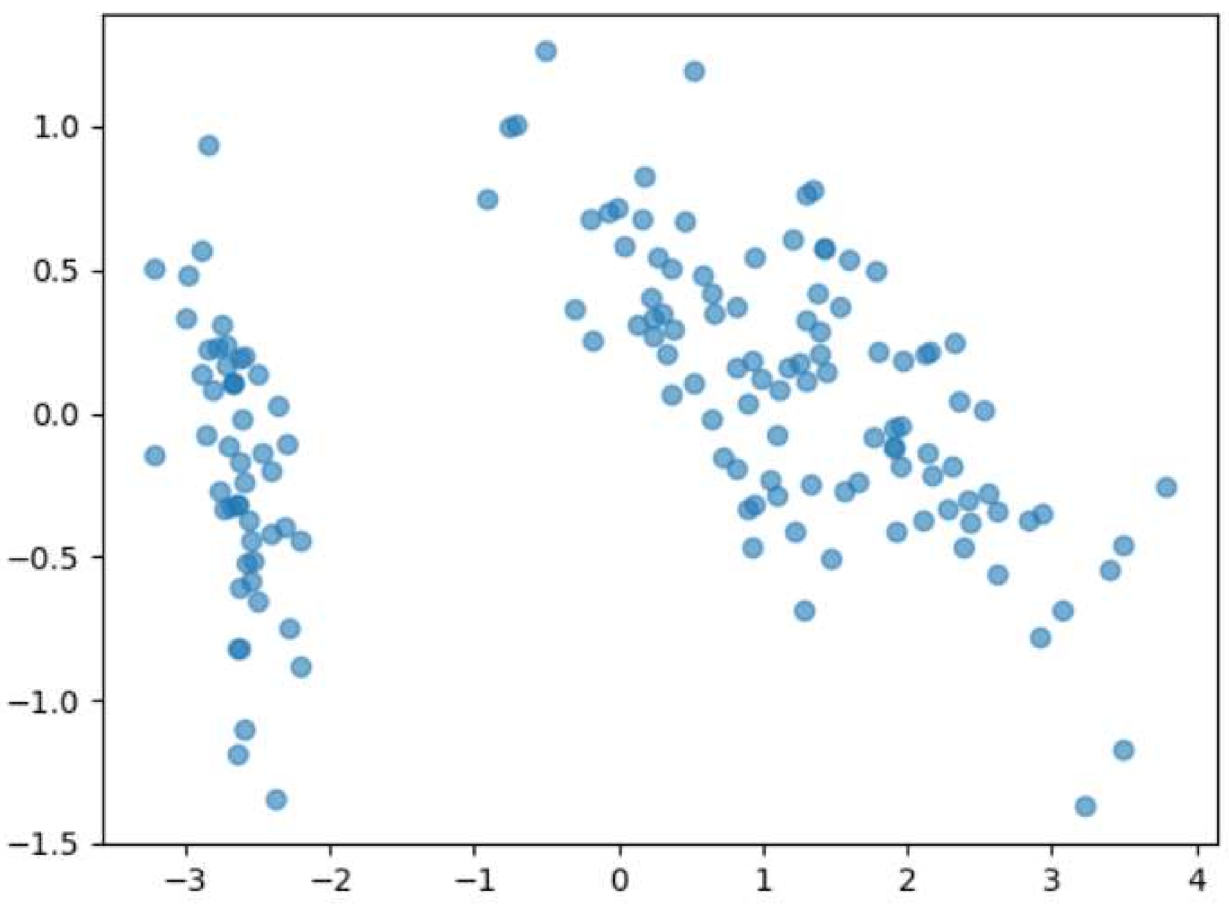
示例

python 与 numpy 的实现, 在这里我们使用 iris 数据集 (鸢尾花卉数据集):

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# 1. Loading dataset into Pandas DataFrame and get numpy data
url = "https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data"
df = pd.read_csv(url, names=['sepal length','sepal width','petal length','petal width','target'
data = df.iloc[:, :4].to_numpy()

def pca(data, n_component):
    data = data.T

    # 2. Subtract the mean
    data -= data.mean(axis = 1).reshape(-1, 1)

    # 3. Get the covariance matrix: 1/m * XX^T
    cov_matrix = 1 / len(data[0]) * data @ data.T

    # 4. Calculate the eigenvalue and eigenvector
    eigenvalues, eigenmatrix = np.linalg.eig(cov_matrix)

    # 5. Get data after dimensionality reduction and Sort eigenmatrix by eigenvalues
    new_data = eigenmatrix.T @ data

    # 6. Sort data and reduce dimension
    return new_data[sorted(range(len(eigenvalues)),  key=lambda v: -eigenvalues[v])][:n_compone

new_data = pca(data, 2)

print(new_data.T[:5])

# 7. Draw scatter plot
x = new_data[0]
y = new_data[1]
plt.scatter(x, y, alpha=0.6)
plt.show()
```

输出为:

```
[[-2.68420713 -0.32660731]
 [-2.71539062  0.16955685]
 [-2.88981954  0.13734561]
 [-2.7464372   0.31112432]
 [-2.72859298 -0.33392456]]
```

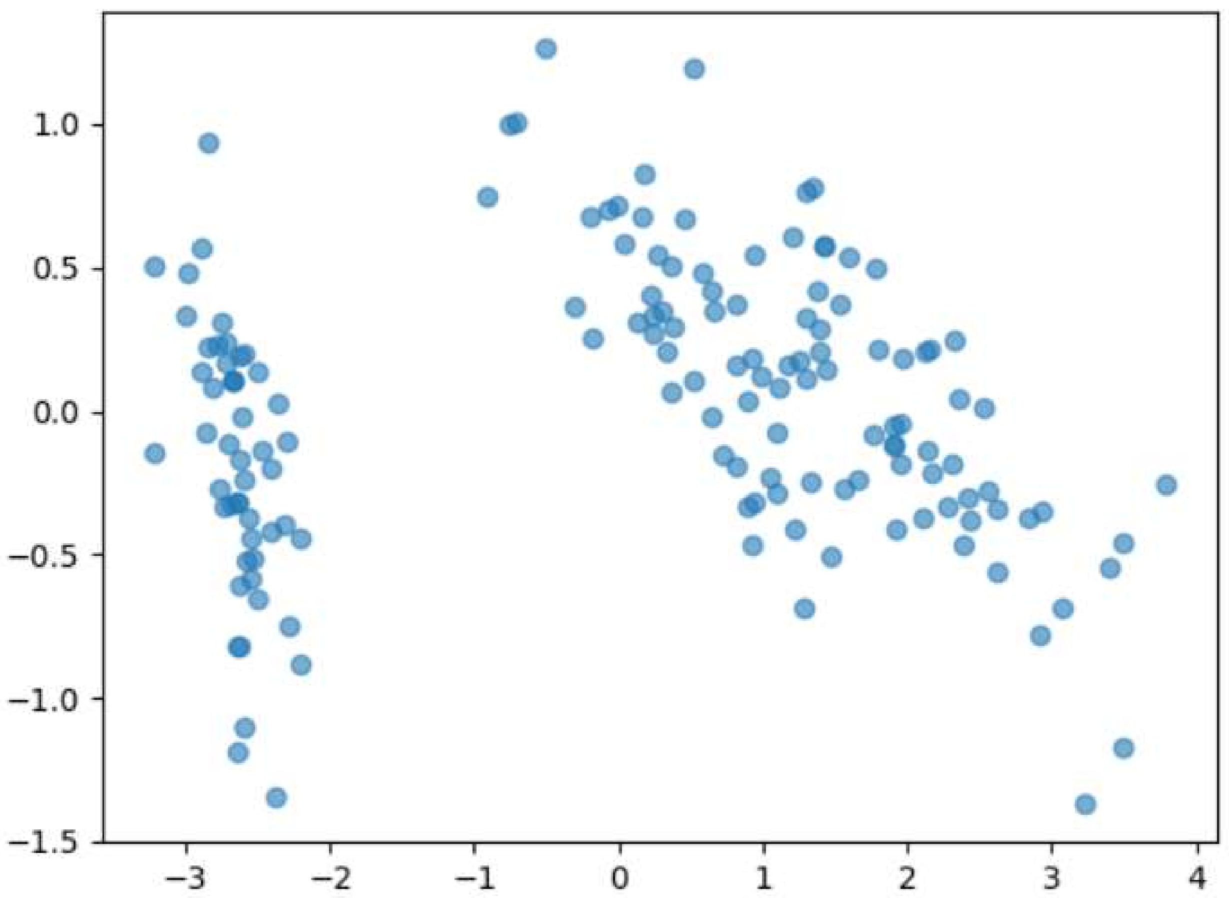


使用 sklearn 实现:

```
import pandas as pd
from sklearn.decomposition import PCA
import matplotlib.pyplot as plt

# 1. Loading dataset into Pandas DataFrame and get numpy data
url = "https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data"
df = pd.read_csv(url, names=['sepal length','sepal width','petal length','petal width','target'
data = df.iloc[:, :4].to_numpy().T

# 2. Use sklearn
pca=PCA(n_components=2)
new_data = pca.fit_transform(data.T).T

print(new_data.T[:5])

# 3. Draw scatter plot
x = new_data[0]
y = new_data[1]
plt.scatter(x, y, alpha=0.6)
plt.show()
```

输出为:

```
[[-2.68420713 -0.32660731]
 [-2.71539062  0.16955685]
 [-2.88981954  0.13734561]
 [-2.7464372   0.31112432]
 [-2.72859298 -0.33392456]]
```



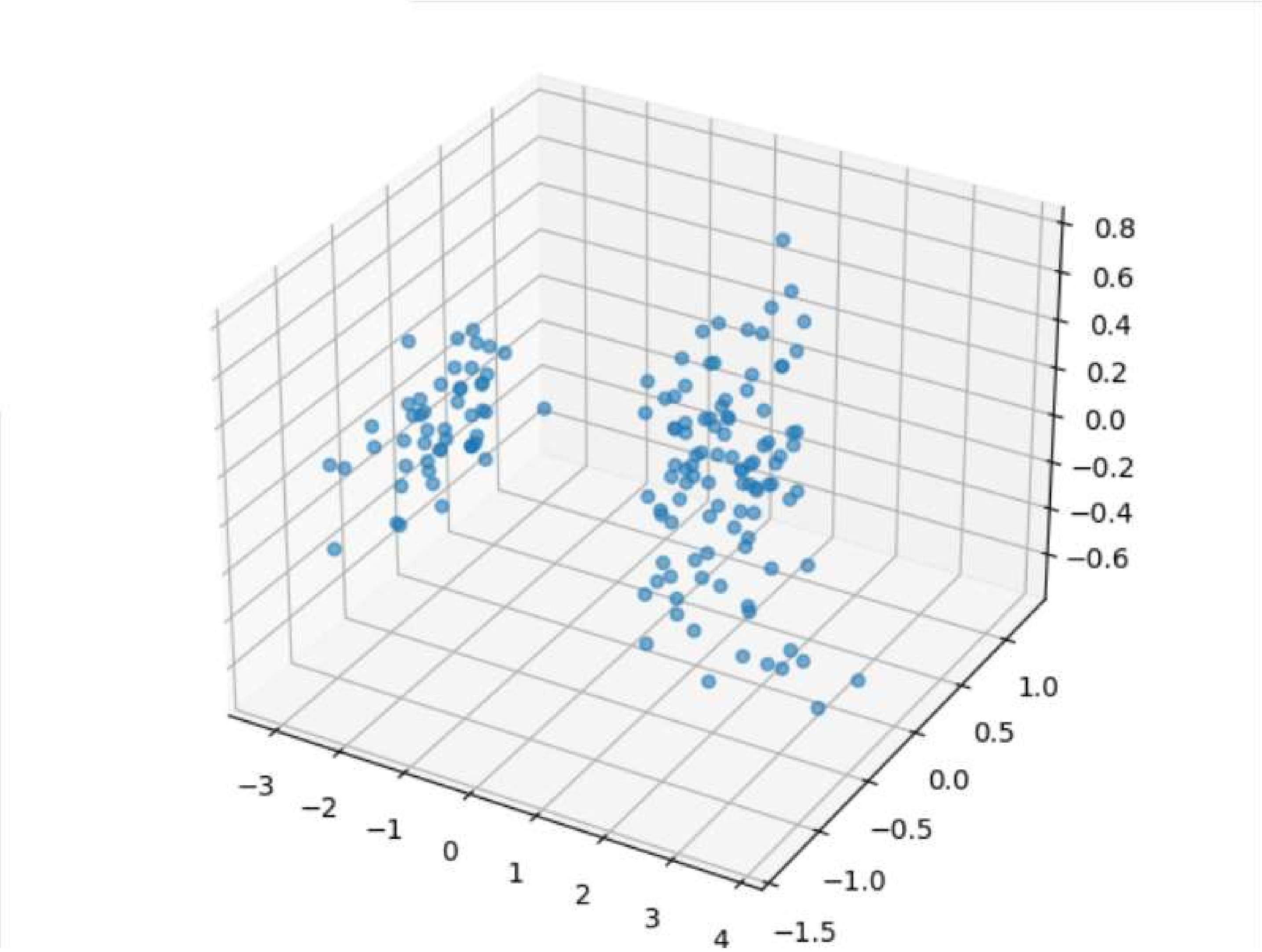
可见两者结果一致.

我们再将其投影到 3 维坐标观察:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

# 1. Loading dataset into Pandas DataFrame and get numpy data
url = "https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data"
df = pd.read_csv(url, names=['sepal length','sepal width','petal length','petal width','target'
data = df.iloc[:, :4].to_numpy()

def pca(data, n_component):
    data = data.T

    # 2. Subtract the mean
    data -= data.mean(axis = 1).reshape(-1, 1)

    # 3. Get the covariance matrix: 1/m * XX^T
    cov_matrix = 1 / len(data[0]) * data @ data.T

    # 4. Calculate the eigenvalue and eigenvector
    eigenvalues, eigenmatrix = np.linalg.eig(cov_matrix)

    # 5. Get data after dimensionality reduction and Sort eigenmatrix by eigenvalues
    new_data = eigenmatrix.T @ data

    # 6. Sort data and reduce dimension
    return new_data[sorted(range(len(eigenvalues)),  key=lambda v: -eigenvalues[v])][:n_compone

new_data = pca(data, 3)

print(new_data.T[:5])

# 7. Draw 3d scatter plot
fig = plt.figure()
ax = Axes3D(fig)
x = new_data[0]
y = new_data[1]
z = new_data[2]
ax.scatter(x, y, z, alpha=0.6)
plt.show()
```

输出为

```
[[-2.68420713 -0.32660731 -0.02151184]
 [-2.71539062  0.16955685 -0.20352143]
 [-2.88981954  0.13734561  0.02470924]
 [-2.7464372   0.31112432  0.03767198]
 [-2.72859298 -0.33392456  0.0962297 ]]
```



参考

1. 【机器学习】降维——PCA —— 知乎@阿泽
2. 如何通俗易懂地讲解什么是 PCA 主成分分析？ —— 知乎@马同学
3. 《机器学习》周志华
4. NumPy 中文
5. Principle Component Analysis (PCA) for Data Visualization
6. 主成分分析(PCA)——基于python+numpy