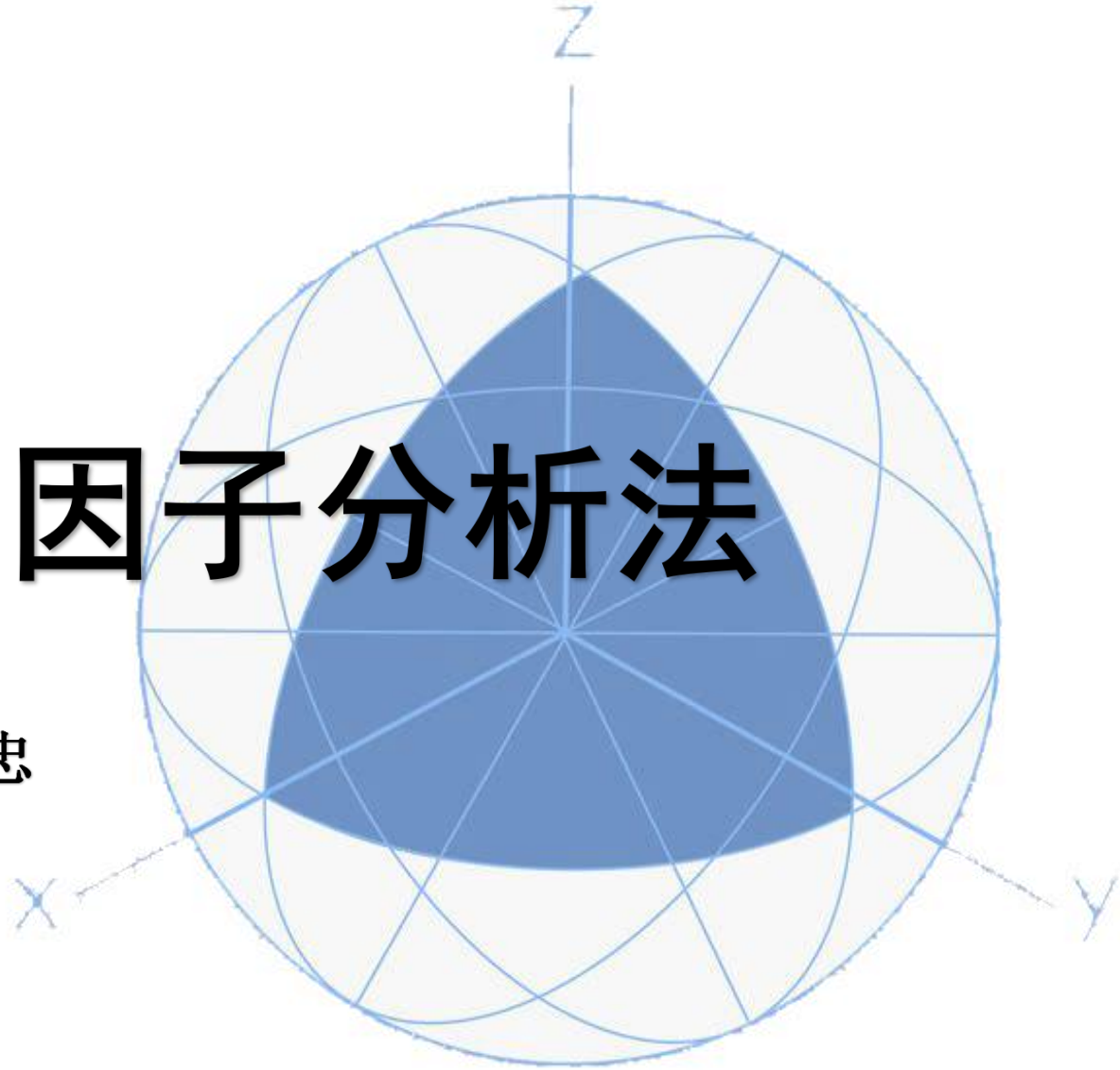
主成分分析和因子分析法

谭　忠



目录
CONTENTS

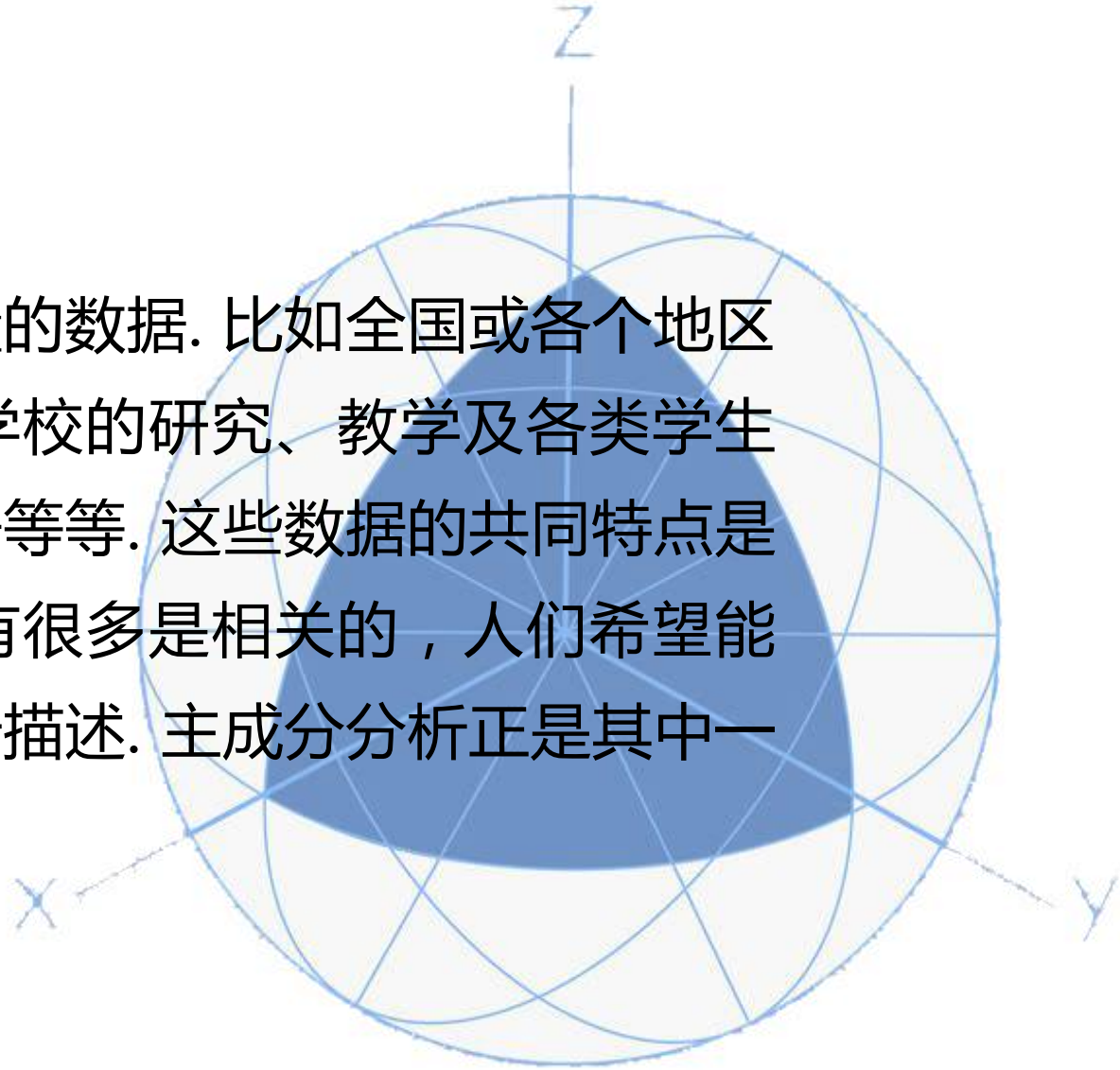
厦门大学
XIAMEN UNIVERSITY

Part 1

源头问题与当今应用

8.1源头问题与当今应用

案例引入：假定你是一个公司的财务经理，掌握公司的所有重要的数据，比如固定资产、资金流动、每一笔借贷的数额和期限、各种税费、工资支出等等. 如果让你向上级介绍公司状况，你能把这些指标和数字都原封不动的摆出去吗？当然不能. 你必须要把各个方面进行高度概括，用一两个指标简单地把情况说清楚.



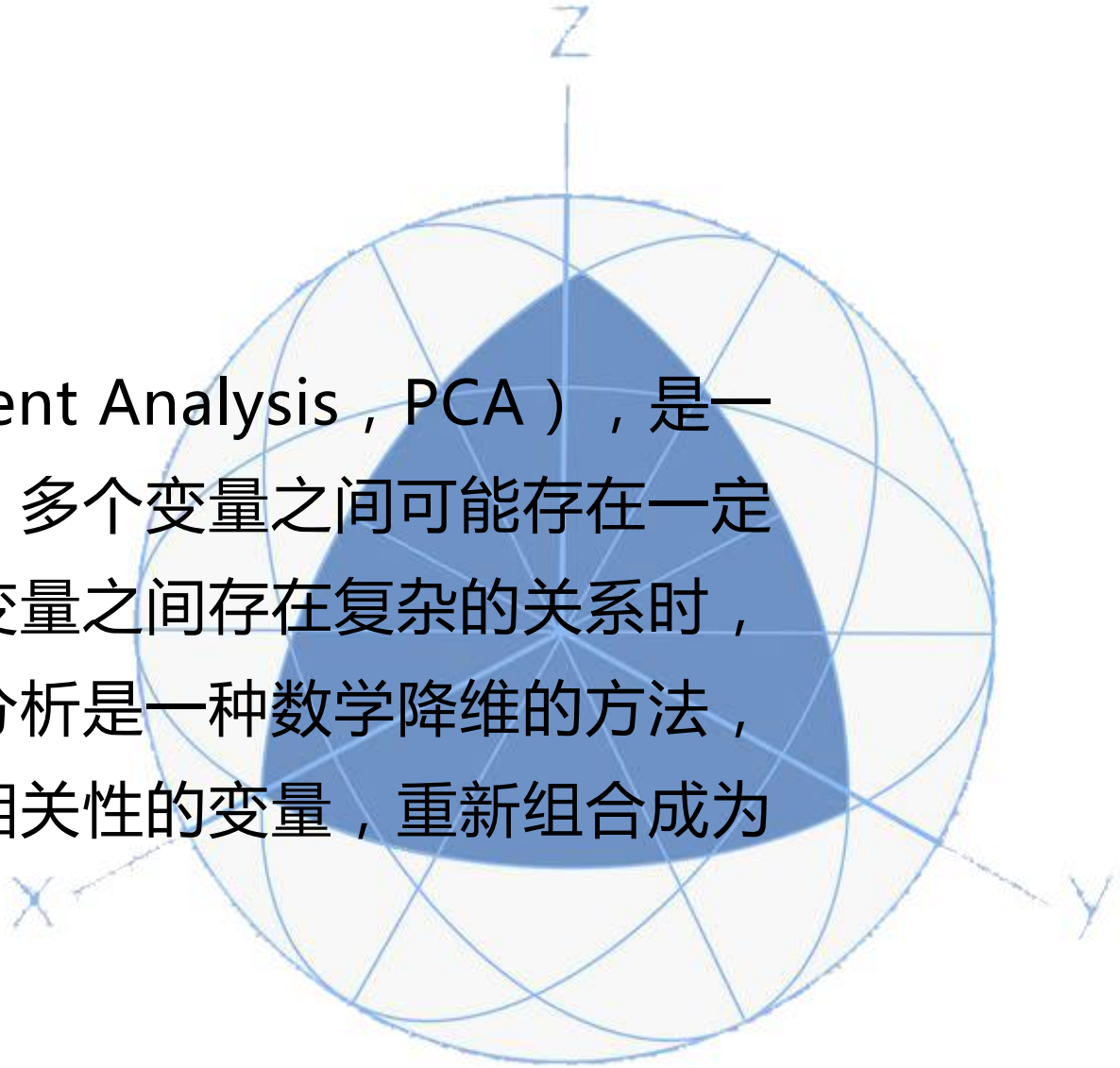
其实，每个人都会遇到有很多变量的数据. 比如全国或各个地区的经济和社会变量的数据；各个学校的研究、教学及各类学生人数及科研经费等各种变量的数据等等. 这些数据的共同特点是变量很多，在如此多的变量中，有很多是相关的，人们希望能够找出少数“代表”来对它们进行描述. 主成分分析正是其中一种方法.

Part 2

主成分分析

一、定义

主成分分析（Principal Component Analysis，PCA），是一种统计方法。在处理实际问题中，多个变量之间可能存在一定的相关性，当变量的个数较多且变量之间存在复杂的关系时，增加了问题分析的难度。主成分分析是一种数学降维的方法，该方法主要将原来众多具有一定相关性的变量，重新组合成为一种新的相互无关的综合变量。



二、主成分分析的基本思想

设研究某个实际问题要考虑 p 个随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$，它们可以构成 p 维随机变量 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_p)^T$. 为了避免遗漏重要的信息，我们要考虑尽可能多的与研究问题有关的变量，此时，会产生以下两个问题：

(1)随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的个数 p 比较大，将增大计算量和增加分析问题的复杂性；

(2)随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 之间存在一定的相关性，因而它们的观测样本所反映的信息在于一定程度上有重叠.

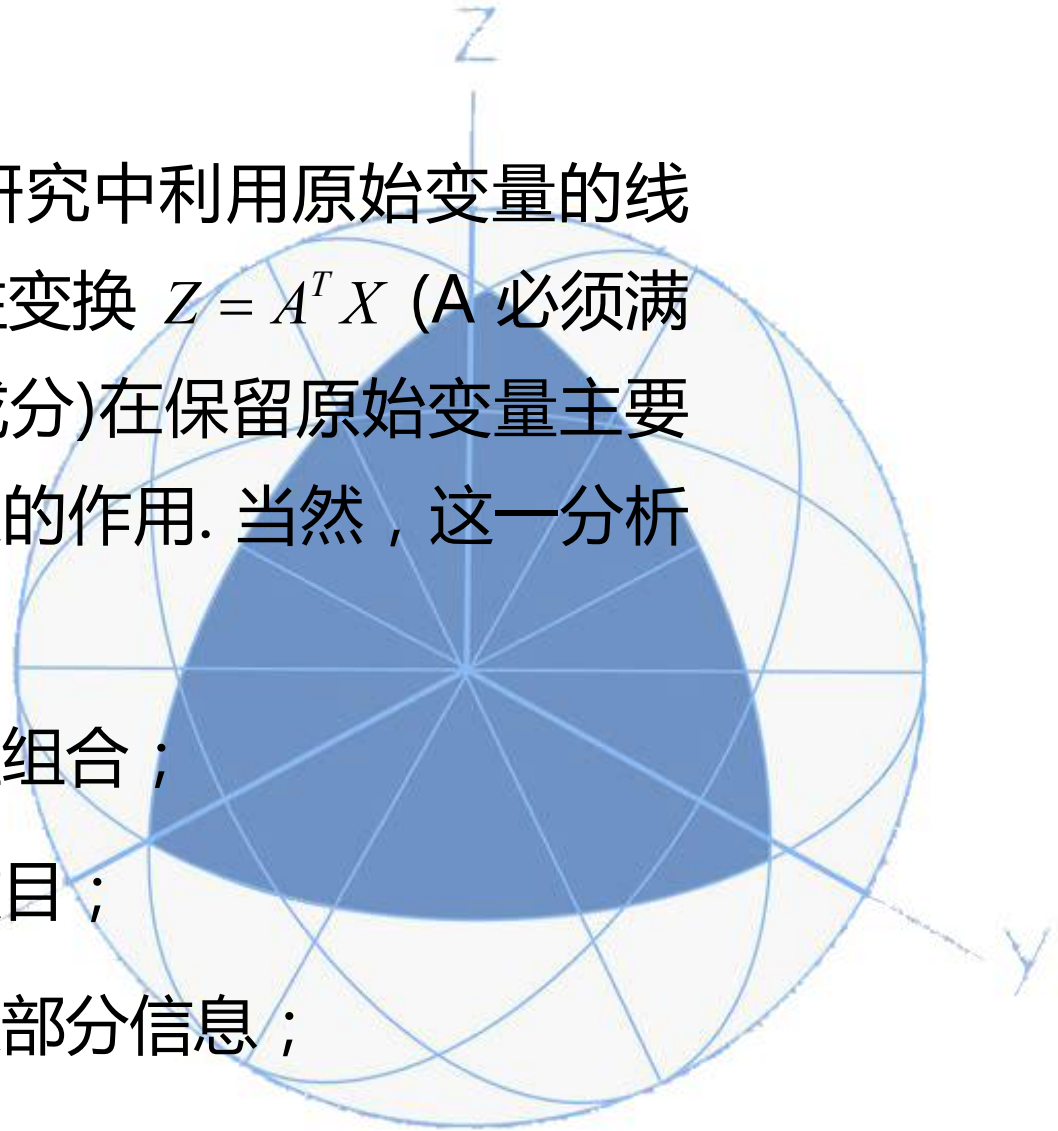
为了解决这些问题，人们希望在定量研究中利用原始变量的线性组合形成几个新变量，即对 X 做线性变换 $Z = A^T X$ (A 必须满足一定的条件)，Z 的各分量 (称为主成分)在保留原始变量主要信息的前提下起到变量降维与简化问题的作用. 当然，这一分析过程应使得：

(1)每一个新变量都是各原始变量的线性组合；

(2)新变量的数目大大少于原始变量的数目；

(3)新变量保留了原始变量所包含的绝大部分信息；

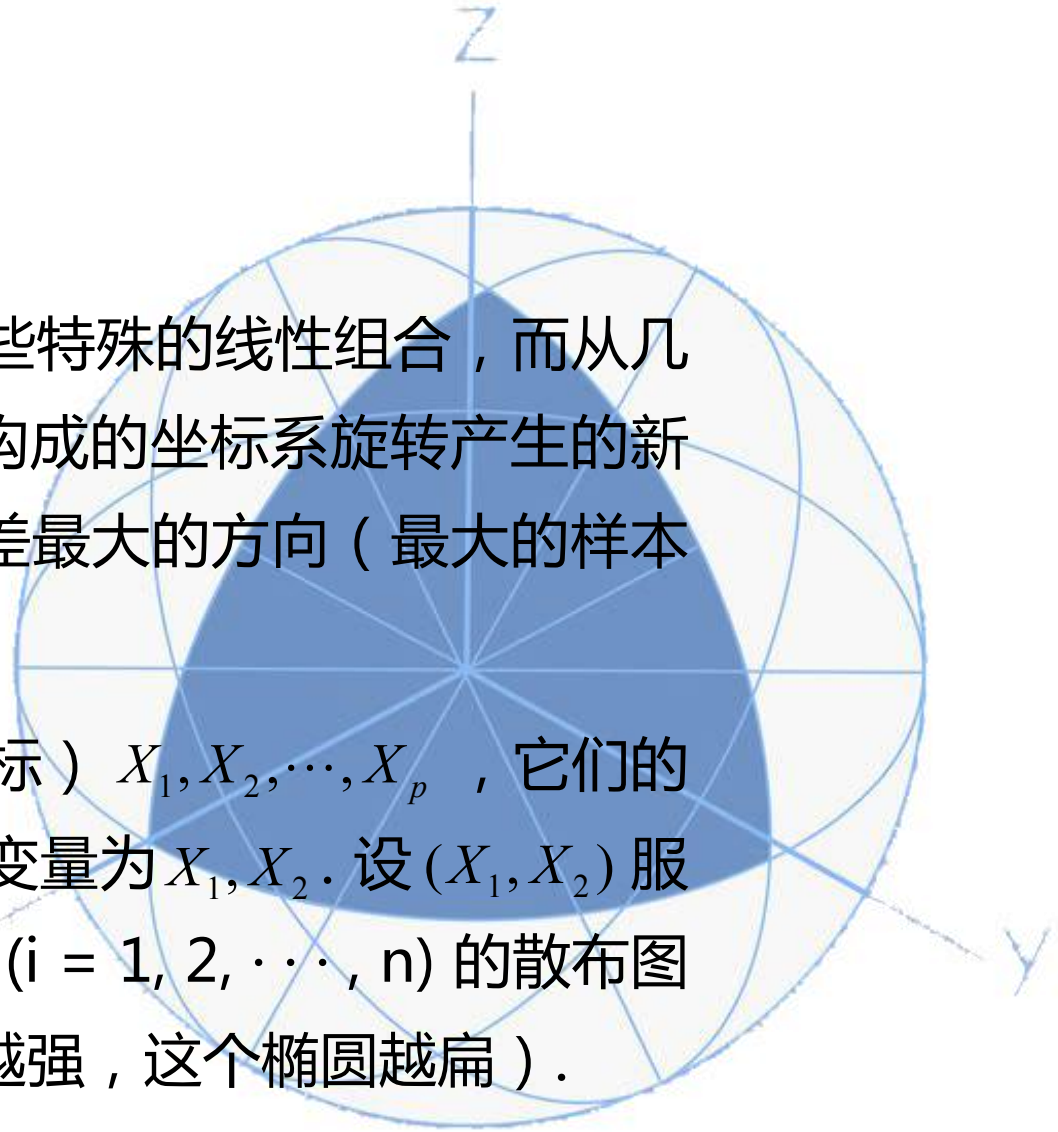
(4)各新变量之间互不相关.

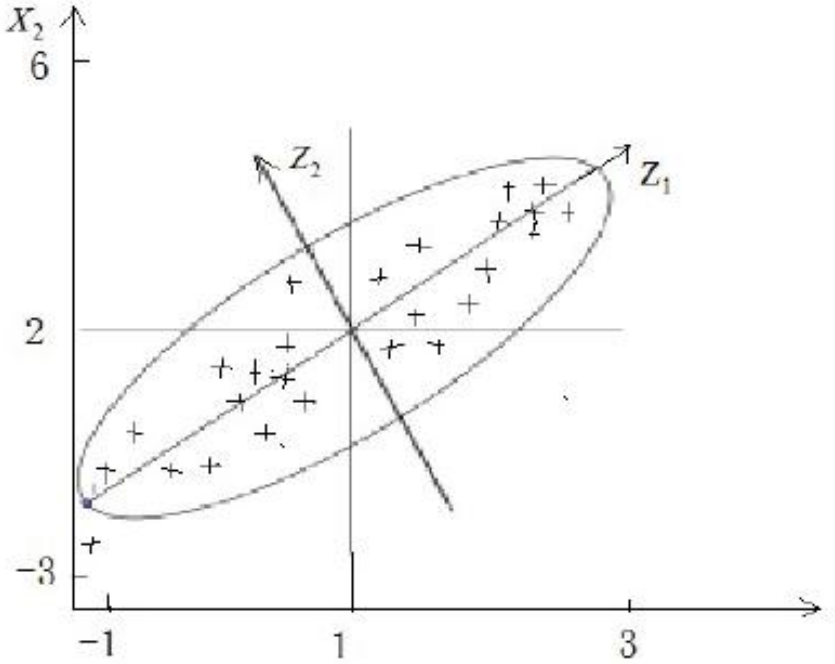


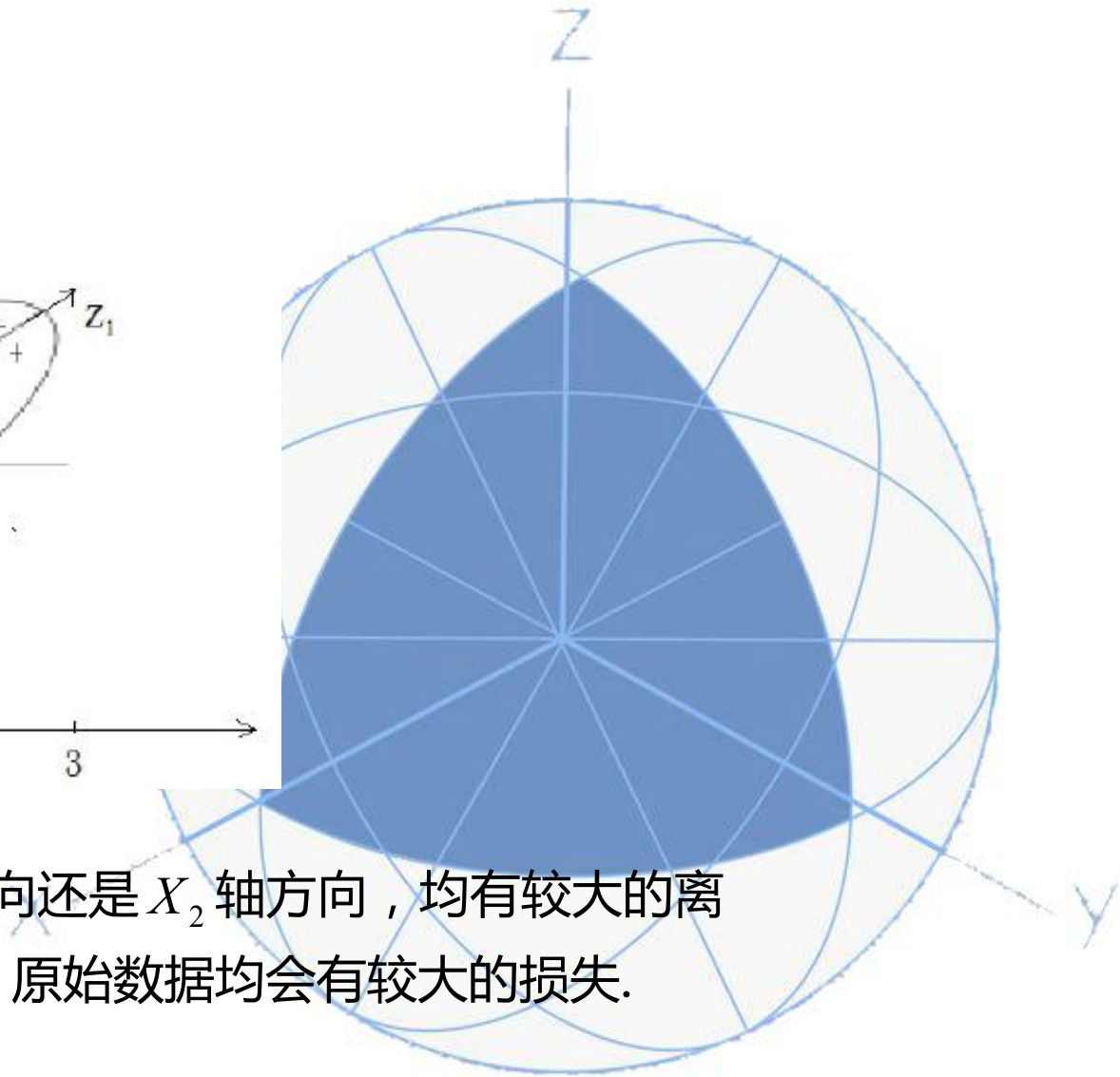
三、主成分的几何意义

从代数学观点看主成分就是 p 个变量的一些特殊的线性组合，而从几何上看这些线性组合正是把 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 构成的坐标系旋转产生的新坐标系，新坐标轴的方向就是原始数据变差最大的方向（最大的样本方差）.

设有 n 个样品，每个样品有 p 个变量（指标） $X_1, X_2, \cdots, X_p$ ，它们的综合指标记为 $Z_1, Z_2, \cdots, Z_p$. 当 p = 2 时原变量为 X_1, X_2 . 设 (X_1, X_2) 服从二元正态分布，则样品点 $X_{(i)} = (x_{i1}, x_{i2})$ (i = 1, 2, · · · , n) 的散布图在一个椭圆内分布着（当 X_1, X_2 的相关性越强，这个椭圆越扁）.



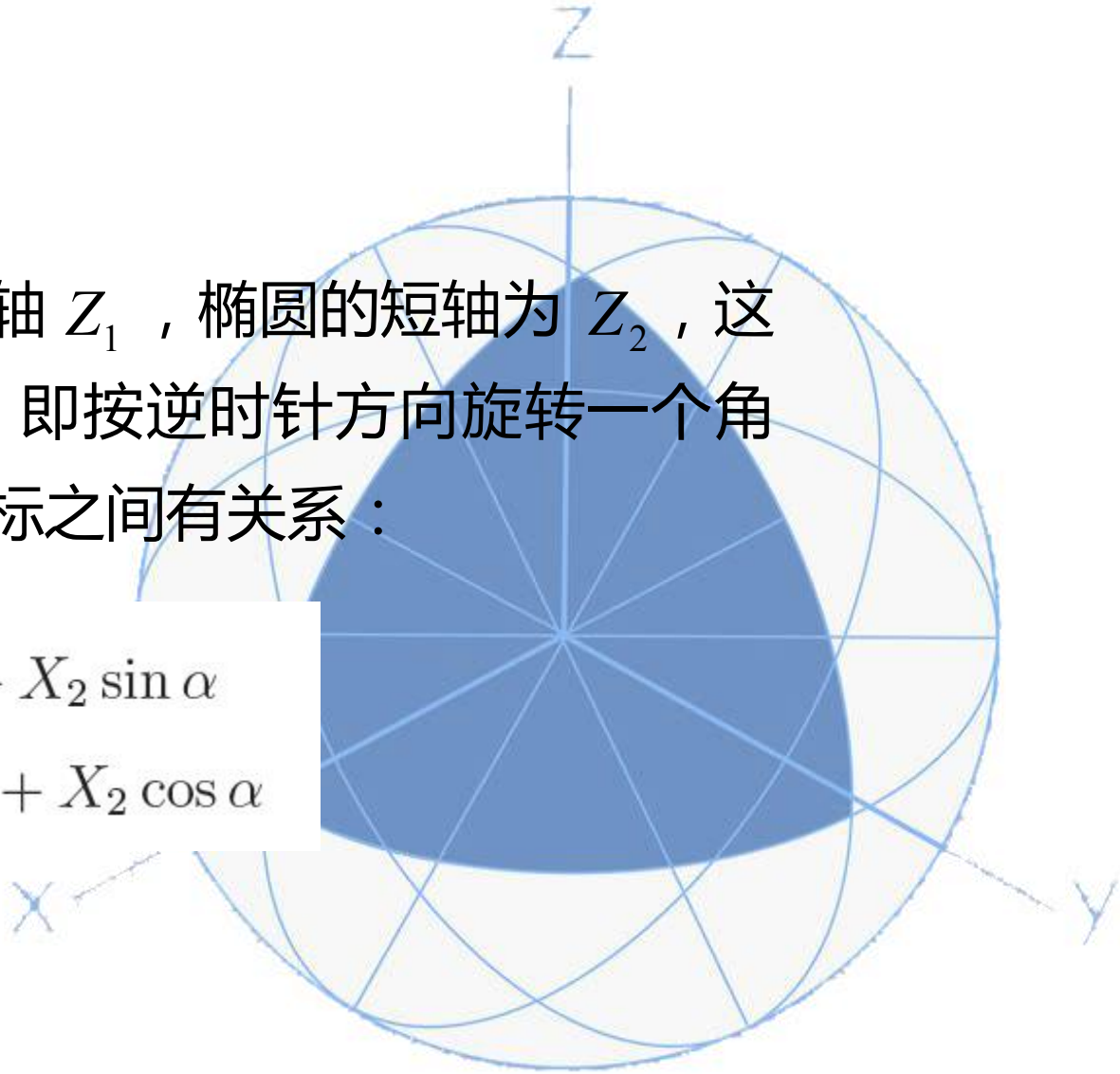




由图可看出，这 n 个观测无论沿 X_1 轴的方向还是 X_2 轴方向，均有较大的离散性，显然，若只考虑 X_1, X_2 中任何一个，原始数据均会有较大的损失.

现我们考虑若取椭圆的长轴为坐标轴 Z_1 ，椭圆的短轴为 Z_2 ，这相当于在平面上作一个坐标变换，即按逆时针方向旋转一个角度 α，根据旋转变换公式，新老坐标之间有关系：

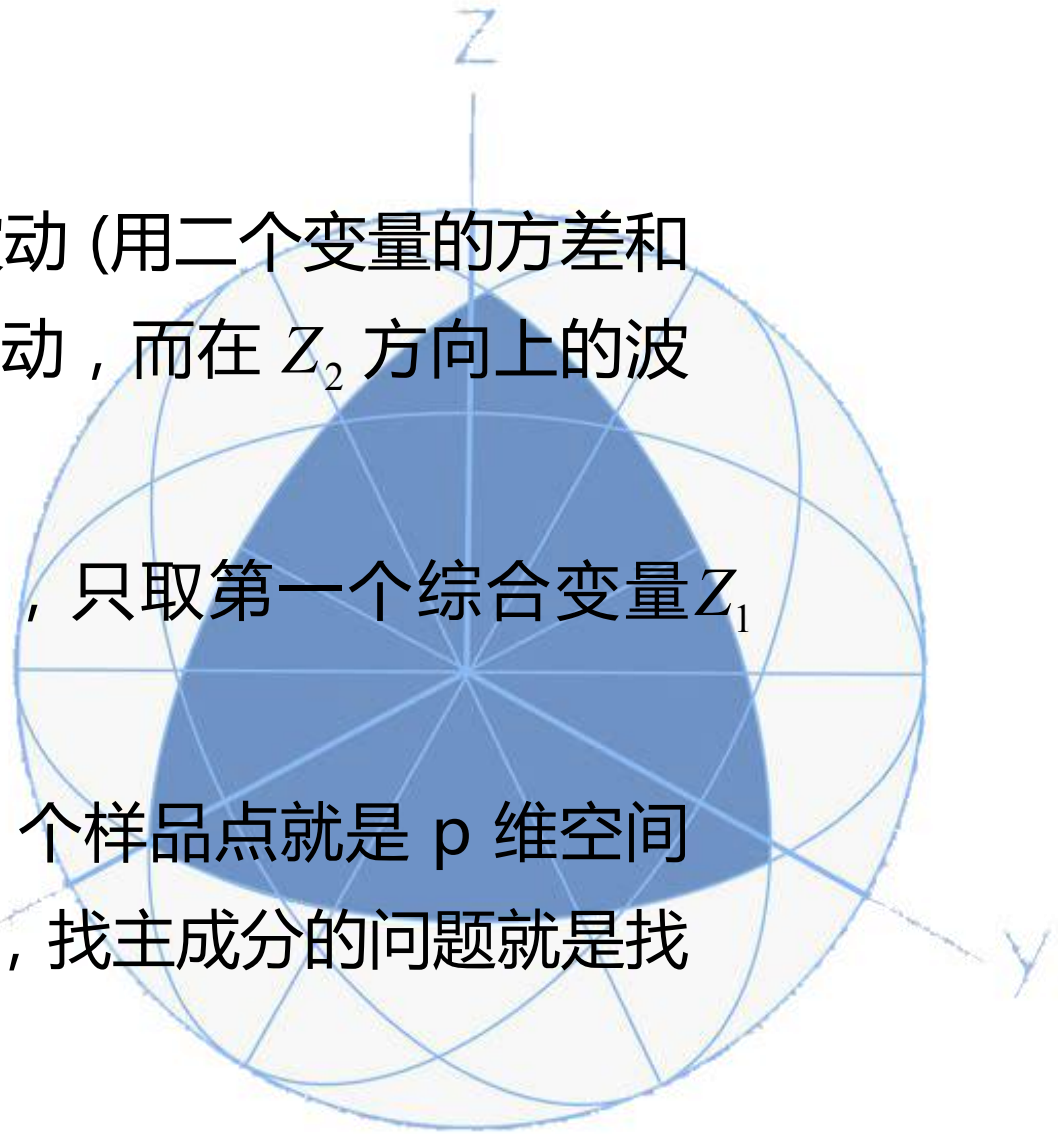
$$\begin{cases} Z_1 = X_1 \cos\alpha + X_2 \sin\alpha \\ Z_2 = -X_1 \sin\alpha + X_2 \cos\alpha \end{cases}$$



从图上可以看出二维平面上 n 个点的波动 (用二个变量的方差和表示)大部分可以归结为在 Z_1 方向的波动，而在 Z_2 方向上的波动很小，可以忽略.

这样一来，二维问题可以降为一维了，只取第一个综合变量Z_1即可，而 Z_1 是椭圆的长轴，容易得到.

一般情况，p 个变量组成 p 维空间，n 个样品点就是 p 维空间的 n 个点. 对于 p 元正态分布变量来说，找主成分的问题就是找 p 维空间中椭球的主轴问题.

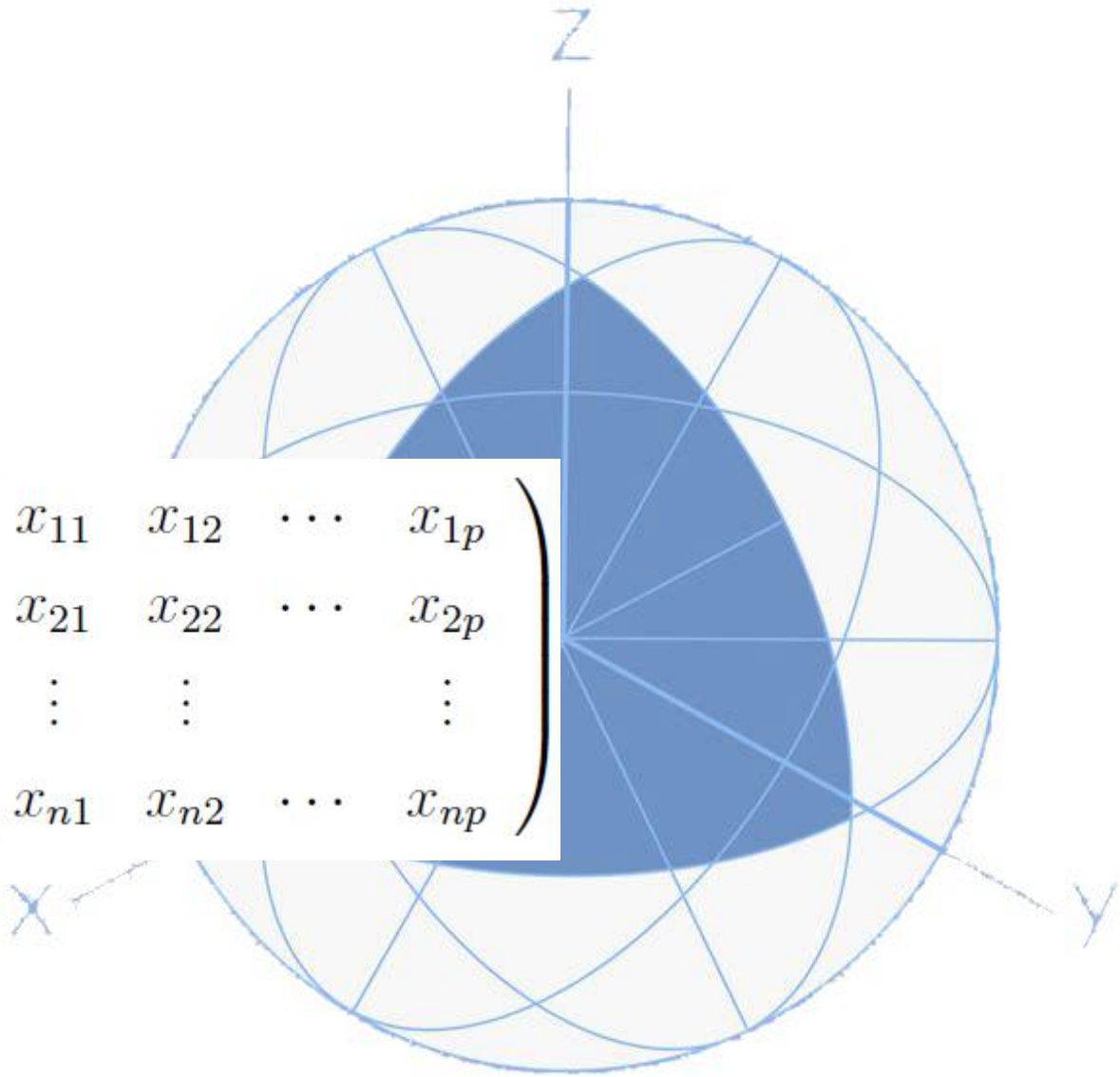


四、主成分分析的方法原理

设

$$X = (X_1, X_2, \cdots X_p)^T = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

是 p 维随机向量



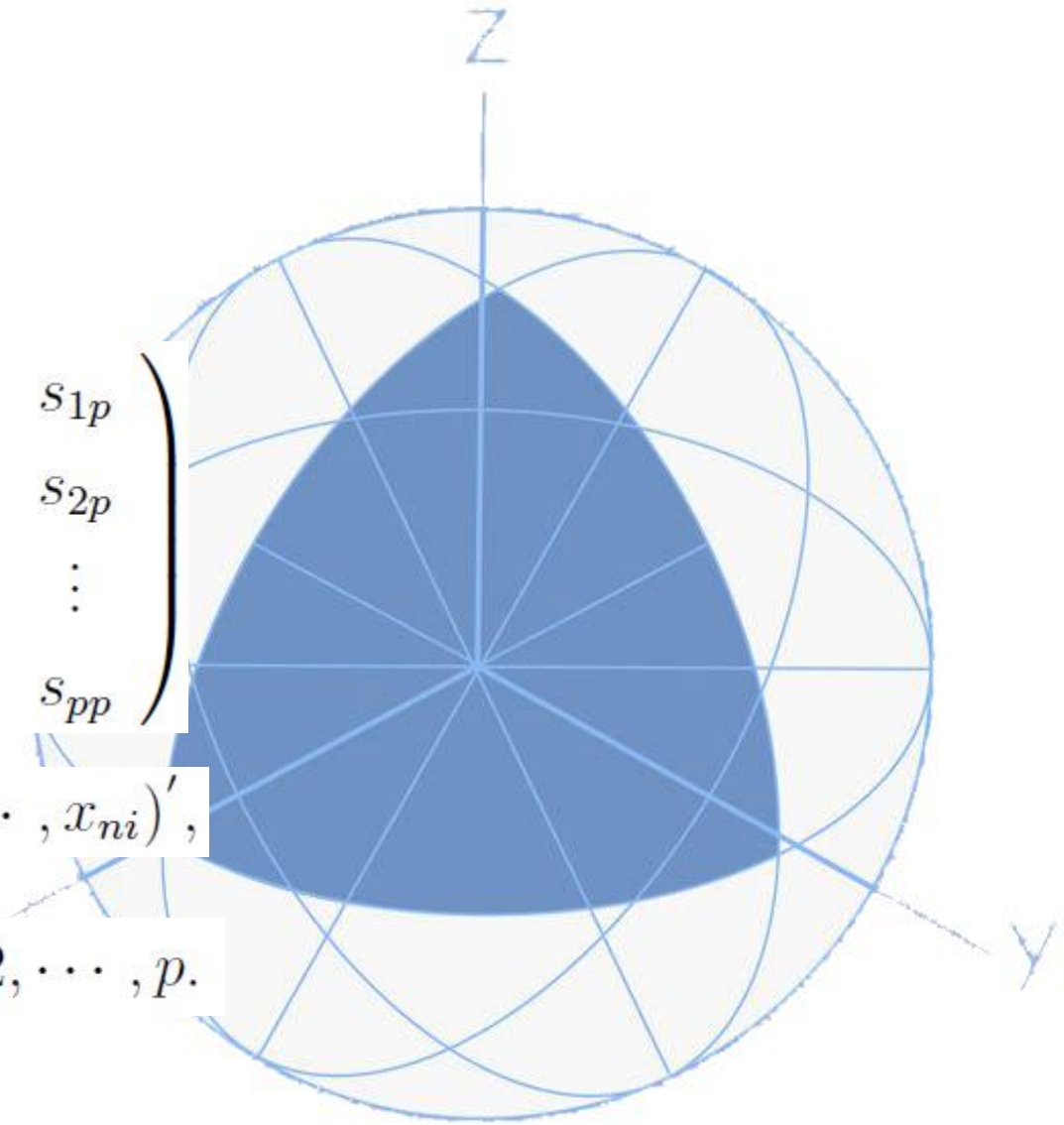
均值向量 $E(X)=\mu$

协方差阵

$$D(X)=\Sigma=\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{pmatrix}$$

其中 $s_{ij}=cov(X_i,X_j), X_i=(x_{1i},x_{2i}\cdots,x_{ni})',$

$$X_j=(x_{1j},x_{2j}\cdots,x_{nj})', i,j=1,2,\cdots,p.$$

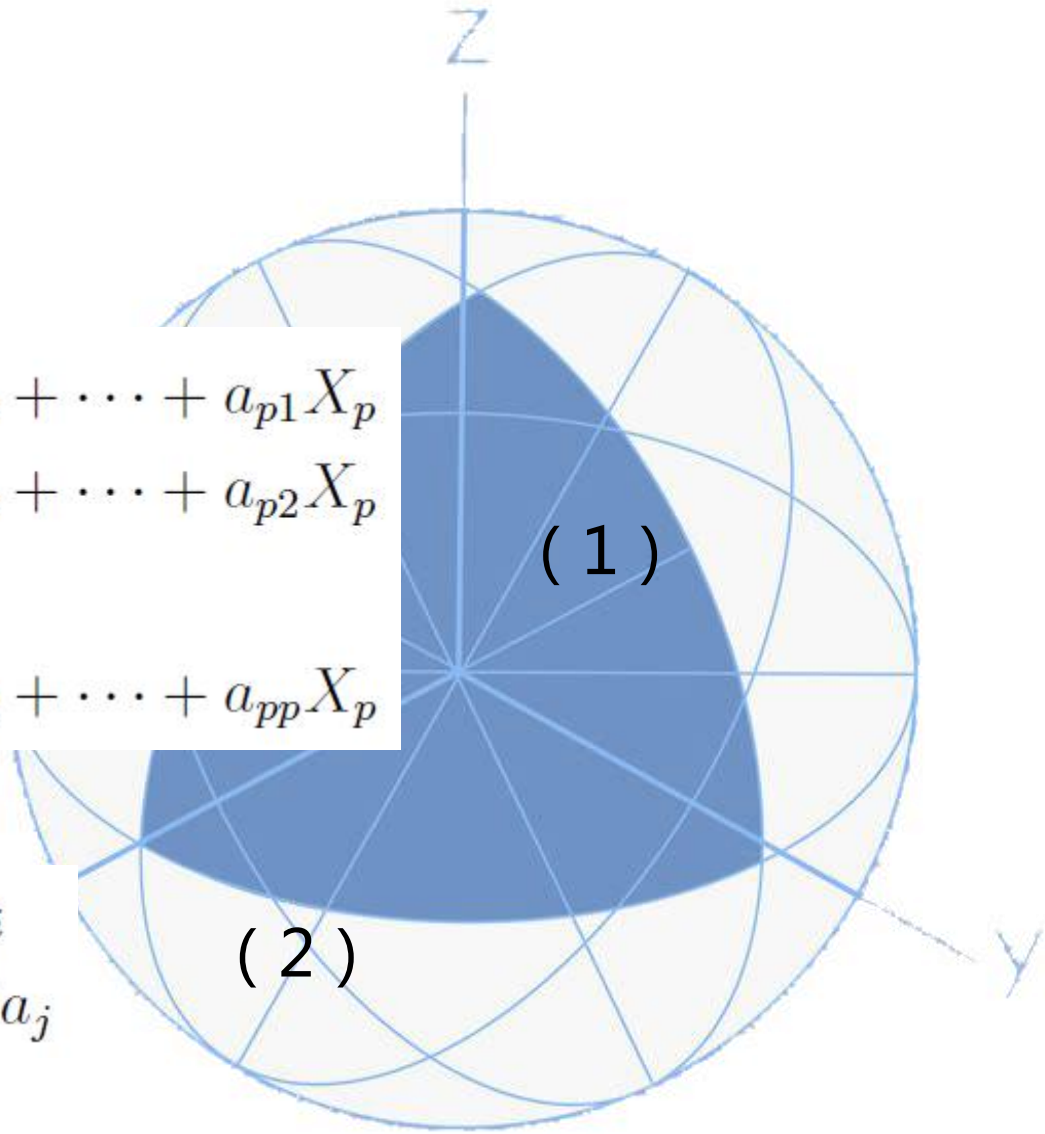


考虑它的线性变换：

$$\begin{cases} Z_1 = a_1' X = a_{11}X_1 + a_{21}X_2 + \cdots + a_{p1}X_p \\ Z_2 = a_2' X = a_{12}X_1 + a_{22}X_2 + \cdots + a_{p2}X_p \\ \vdots \\ Z_p = a_p' X = a_{1p}X_1 + a_{2p}X_2 + \cdots + a_{pp}X_p \end{cases} \quad (1)$$

易见

$$Var(Z_i) = a_i' \Sigma a_i$$
$$Cov(Z_i, Z_j) = a_i' \Sigma a_j \quad (2)$$



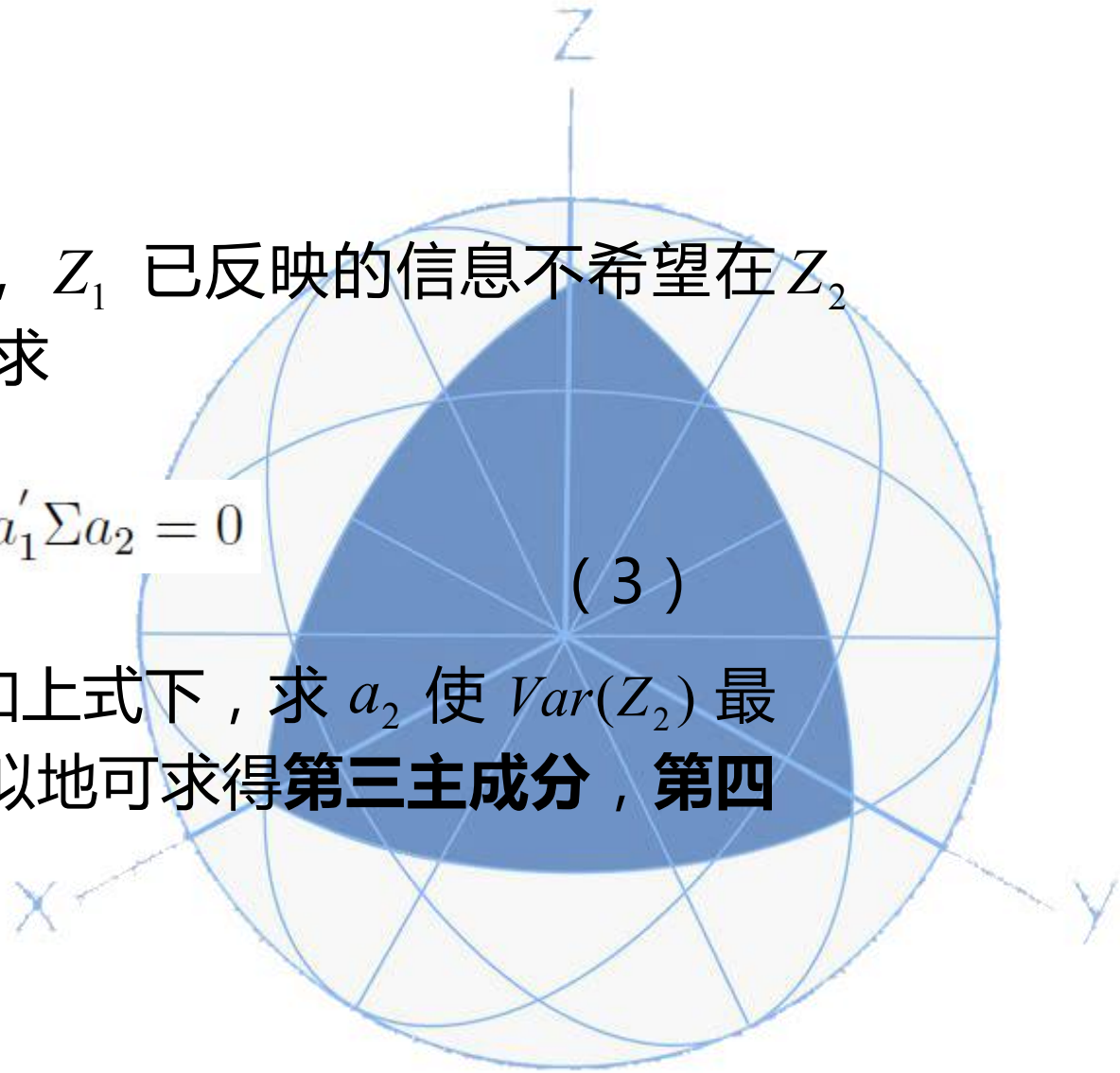
假如我们希望用 Z_1 来代替原来的 p 个变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$，这就要求 Z_1 尽可能多地反映原来 p 个变量的信息，这里所说的“信息”最经典的方法是用 Z_1 的方差来表达，$Var(Z_1)$ 越大，表示 Z_1 包含的信息越多.

由(2)式可以看出，对 a_1 必须有某种限制，否则可使 $Var(Z_1) \to \infty$ 常用的限制是：$a_1' a_1 = 1$. 若存在满足以上约束的 a_1 使 $Var(Z_1)$ 最大，Z_1 就称为**第一主成分**.如果第一主成分不足以表达原来 p 个变量的绝大部分信息，考虑 X 的第二个线性组合 Z_2.

为了有效地代表原始变量的信息， Z_1 已反映的信息不希望在 Z_2 中出现，用统计语言来讲，就是要求

$$Cov(Z_1, Z_2) = a_1' \Sigma a_2 = 0 \qquad (3)$$

于是求 Z_2，就是在约束 $a_2' a_2 = 1$ 和上式下，求 a_2 使 $Var(Z_2)$ 最大，所求 Z_2 称为**第二主成分**，类似地可求得**第三主成分**，**第四主成分**等等.

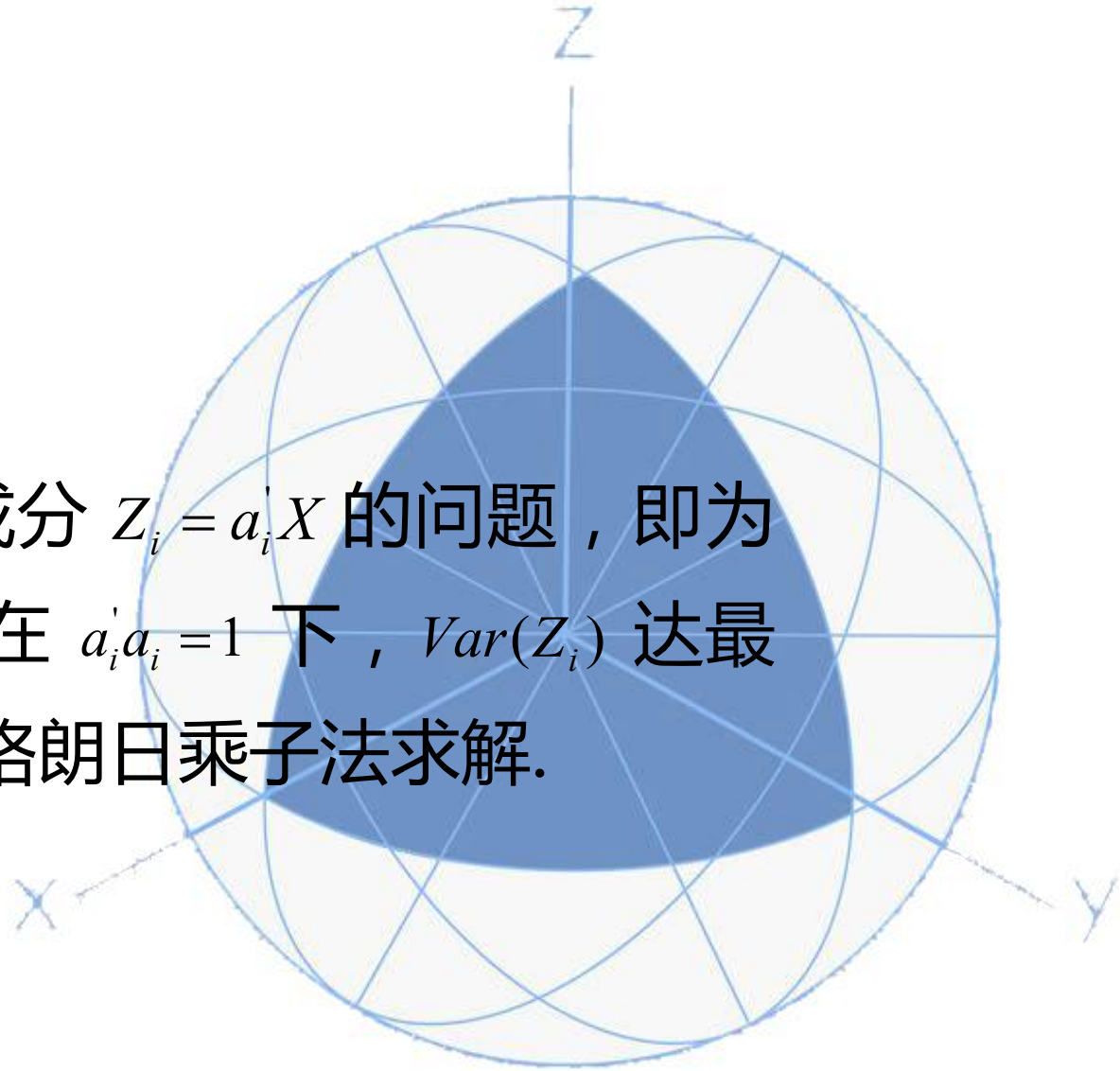


定义 1 设 $X=(X_1,X_2,\cdots,X_p)^T$ 为 p 维随机向量，称 $Z_i=a_i'X$ 为 X 的第 i 主成分(i = 1, 2, · · · , p)，如果：

（1）$a_i'a_i=1$;

（2）当$i>1$时，$a_i'\Sigma a_j=0(j=1,2,\cdots,i-1)$;

（3）$Var(Z_i)=maxVar(a'X)$,满足$a_i'a_i=1$，$a_i'\Sigma a_j=0(j=1,2,\cdots,i-1)$。



五、主成分求法

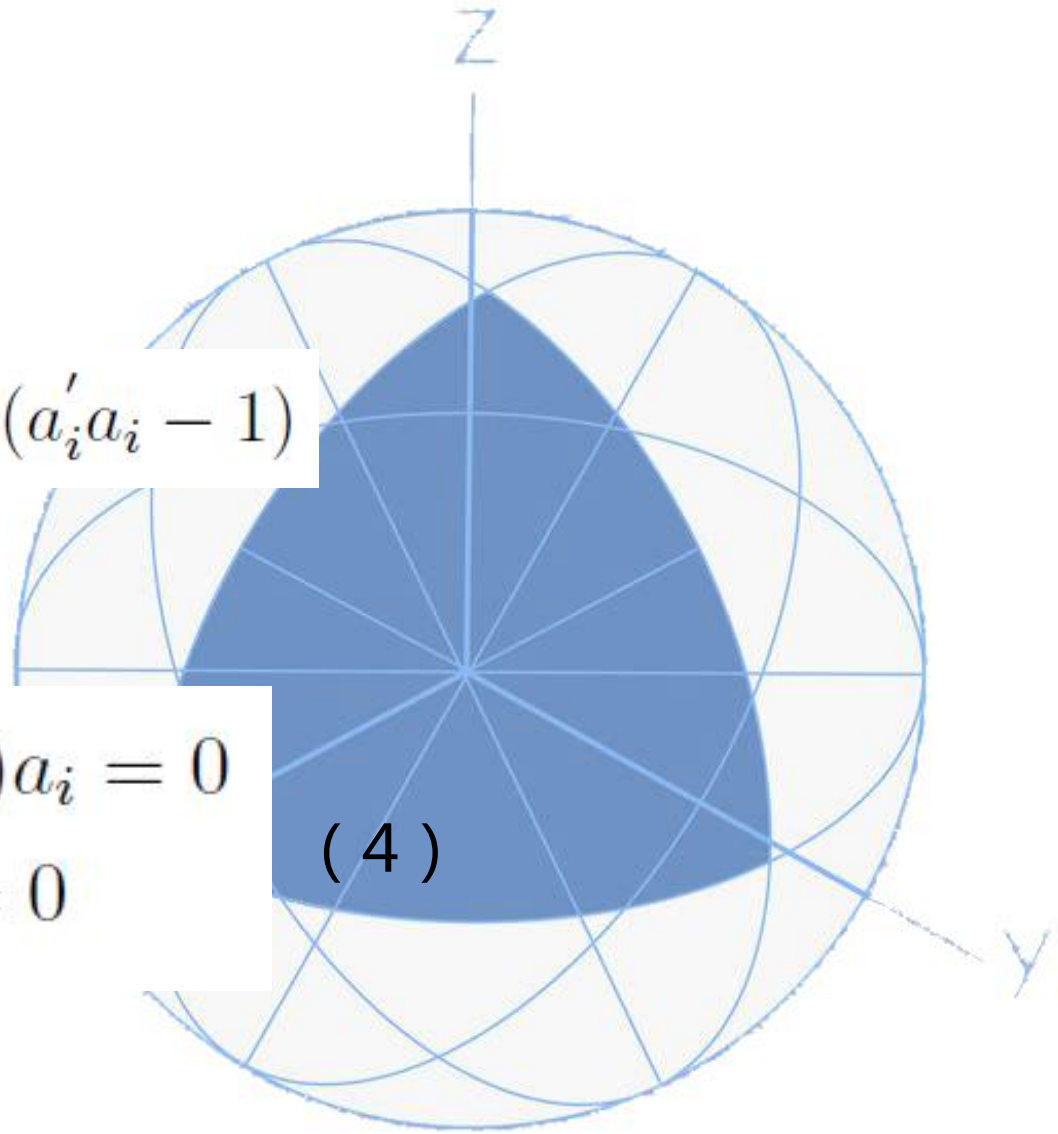
由上述定义可知，求第 i 主成分 $Z_i = a_i' X$ 的问题，即为求 $a_i = (a_{1i}, a_{2i}, \cdots, a_{pi})'$ 使得在 $a_i' a_i = 1$ 下，$Var(Z_i)$ 达最大. 这是条件极值问题，用拉格朗日乘子法求解.

令

$$\varphi(a_i) = Var(a_i'X) - \lambda(a_i'a_i - 1)$$

考虑

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial a_i} = 2(\Sigma - \lambda I)a_i = 0 \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} = a_i'a_i - 1 = 0 \end{cases} \quad (4)$$



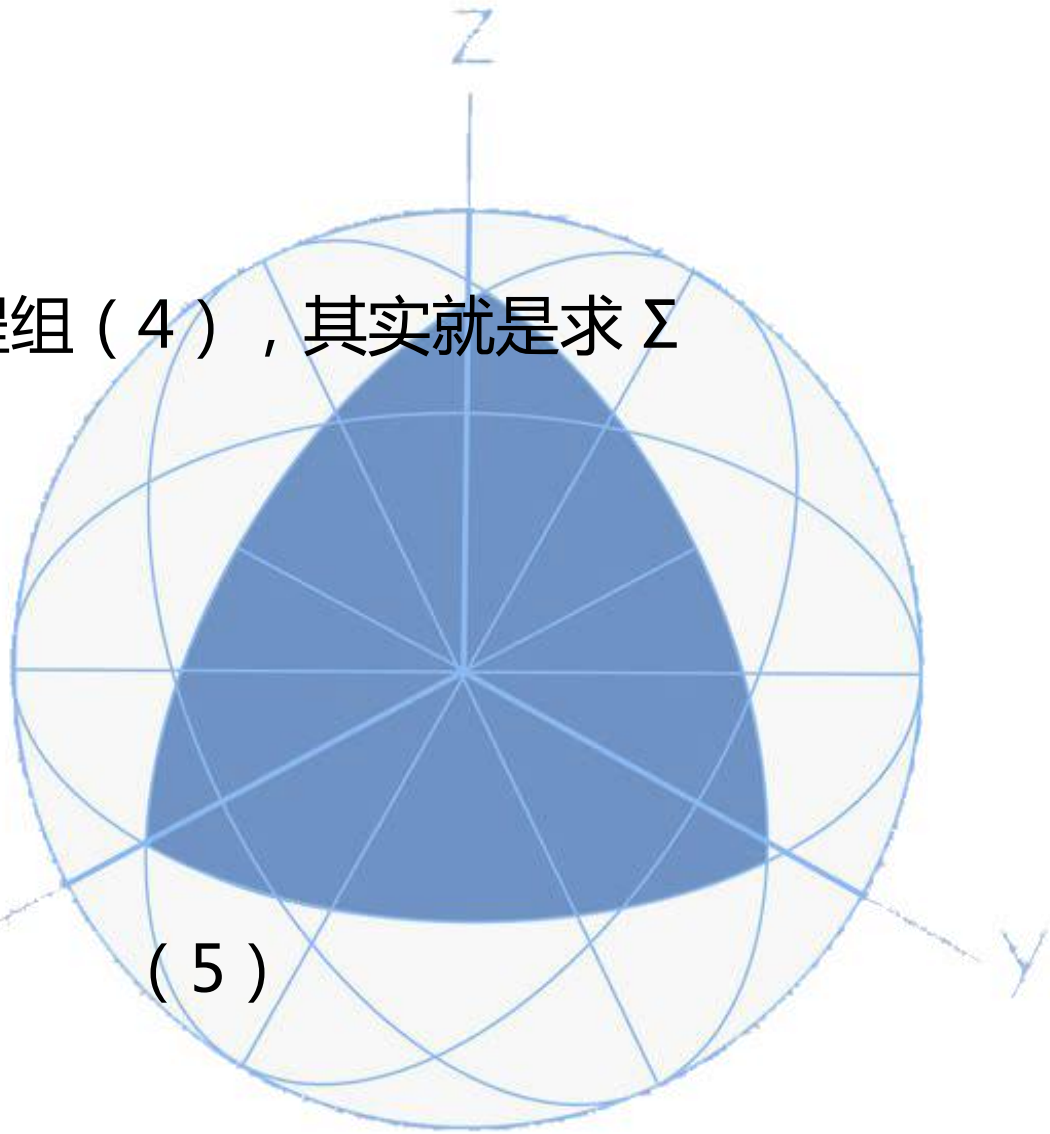
因 $a_i \neq 0$，故 | Σ - λI |= 0 求解上述方程组（4），其实就是求 Σ 的特征值和特征向量问题.

由方程组（4）

$$(\Sigma - \lambda I)a_i = 0$$

两边左乘 a_i' 得到

$$a_i'\Sigma a_i = \lambda \qquad (5)$$



由于 X 的协差阵 Σ 为非负定的，其特征值均大于零，不妨设 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda \geq 0$. 由(5)式知道 Z_i 方差为 λ，那么方差最大值为 λ_1 对应的单位化正交特征向量为 a_1 . 即可得出 Z1 表达式.

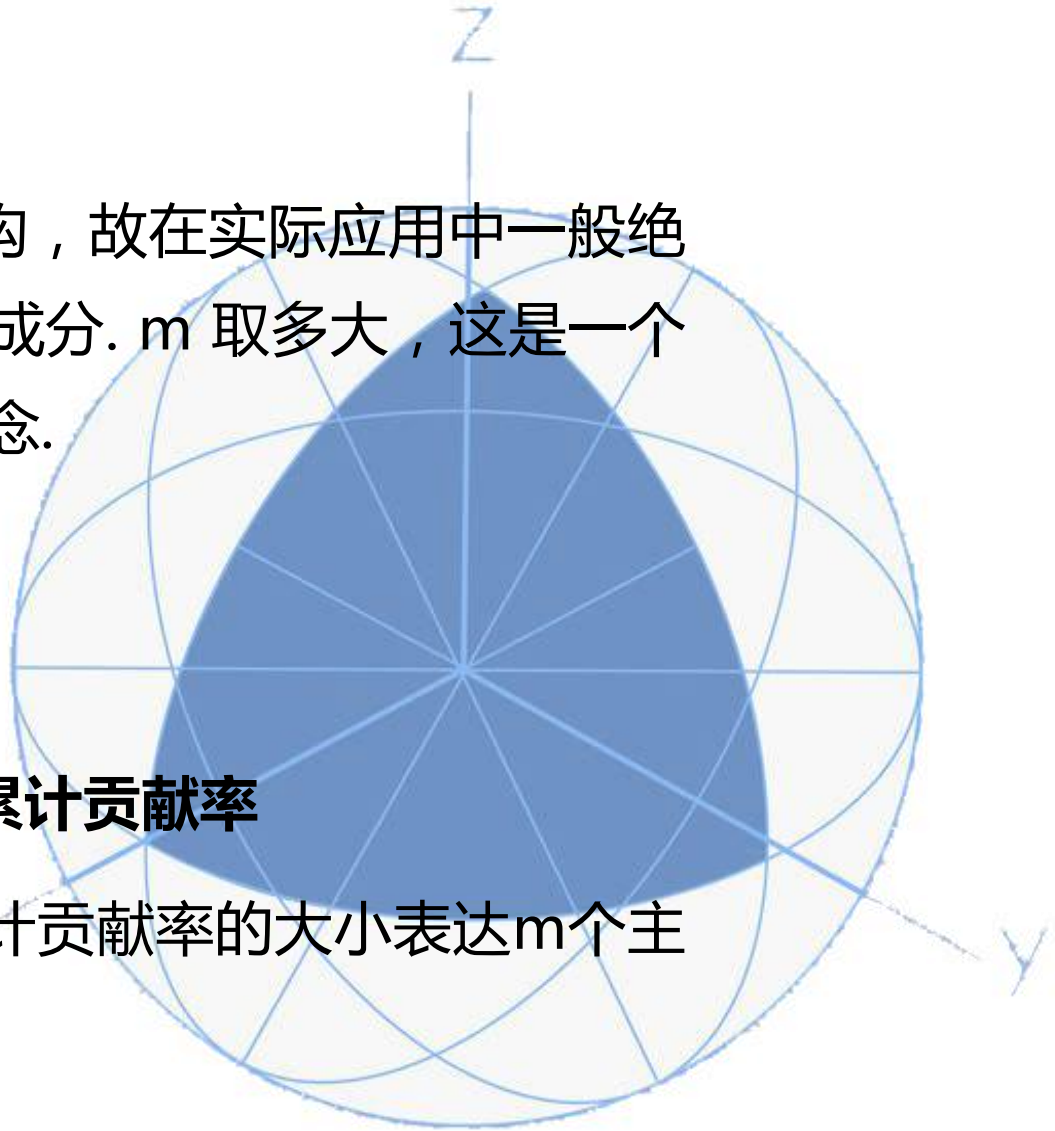
同理可得 $Z_2, Z_3 \cdots, Z_p$.

主成分分析的目的之一是为了简化数据结构，故在实际应用中一般绝不用 p 个主成分，而选用 m(m < p) 个主成分. m 取多大，这是一个很实际的问题. 为此，我们引进贡献率的概念.

我们称 $\frac{\lambda_k}{\sum_{i=1}^{p}\lambda_i}$ 为主成分 Z_k 的**贡献率**；

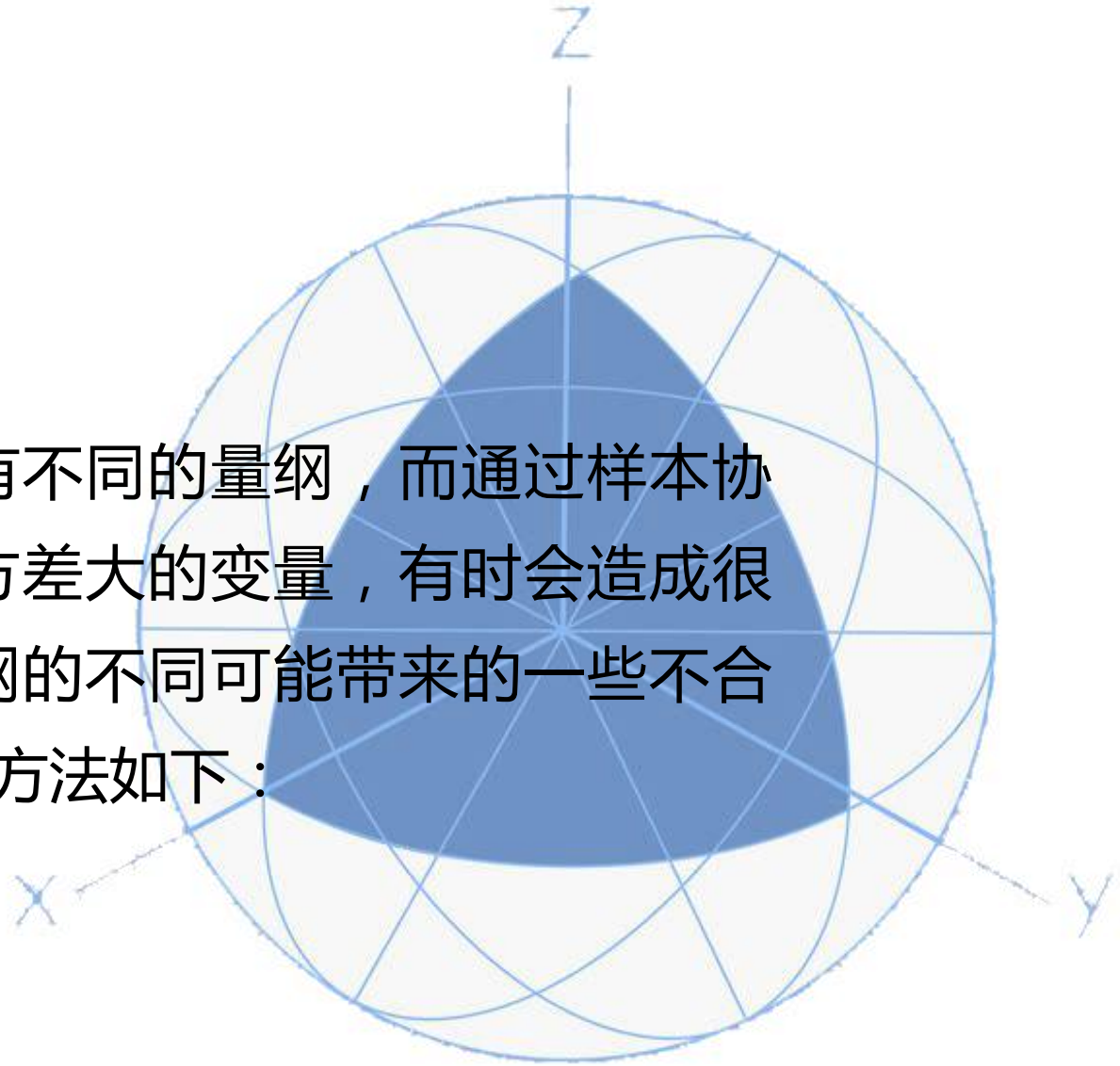
又称 $\frac{\sum_{k=1}^{m}\lambda_k}{\sum_{i=1}^{p}\lambda_i}$ 为主成分 $Z_1,\cdots,Z_m$ (m < p) 的**累计贡献率**

通常取m,使累积贡献率达到85%以上，累计贡献率的大小表达m个主成分提取了 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的多少信息.



六、标准化的主成分

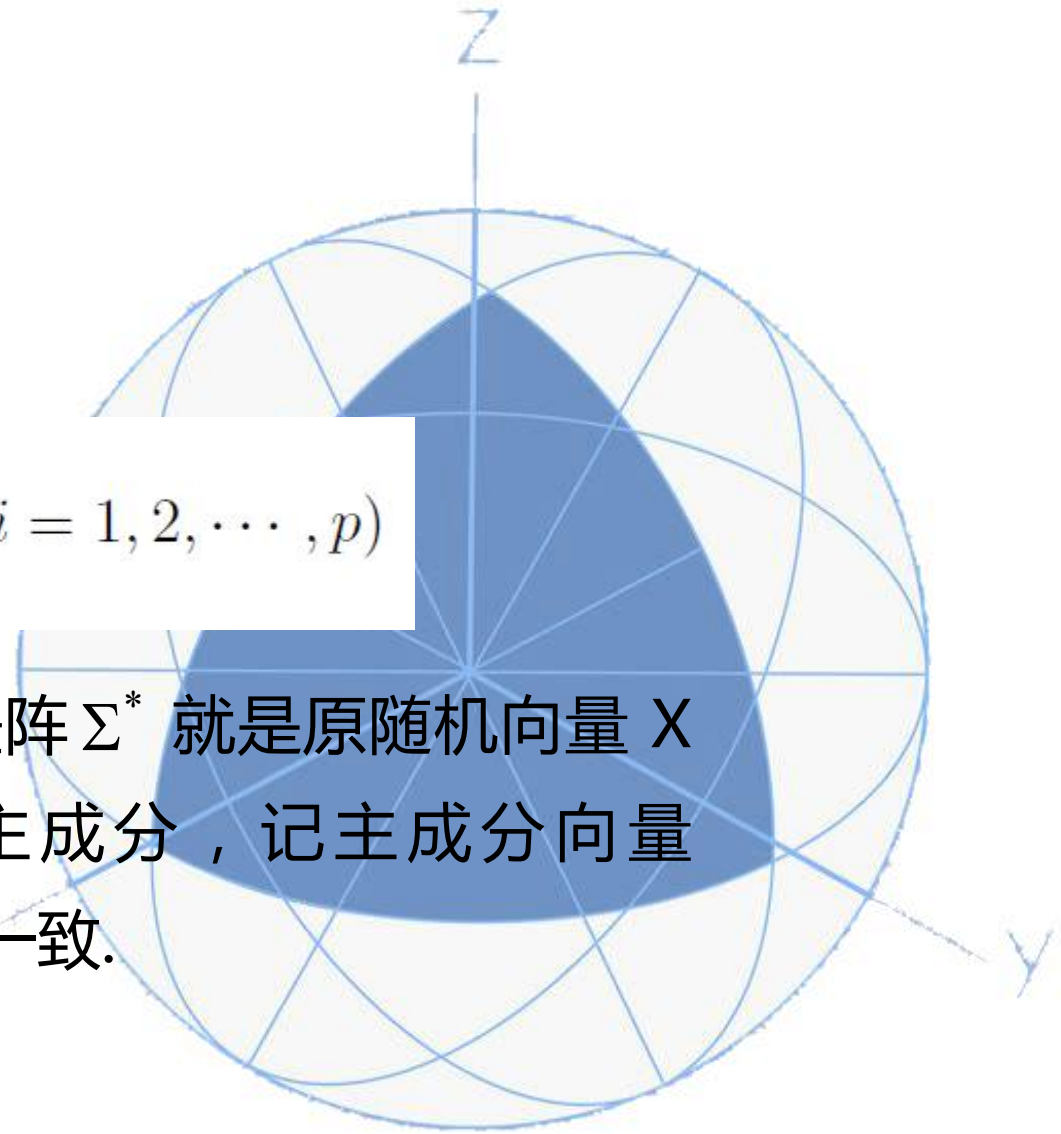
在实际问题中，不同的变量往往有不同的量纲，而通过样本协方差阵来求主成分总是优先考虑方差大的变量，有时会造成很不合理的结果，为了消除由于量纲的不同可能带来的一些不合理的影响，常采用将变量标准化。方法如下：



记 $E(X_i)=\mu_i, Var(X_i)=\sigma_i^2$ ，令

$$X_i^*=\frac{X_i-E(X_i)}{\sqrt{Var(X_i)}}=\frac{X_i-\mu_i}{\sigma_i}(i=1,2,\cdots,p)$$

这时标准化后的随机向量 X^* 的协方差阵 Σ^* 就是原随机向量 X 的相关阵 R，从相关阵 R 出发求主成分，记主成分向量为 $Z^*=(Z_1^*,Z_2^*,\cdots,Z_P^*)$，方法与前面一致.



七、利用主成分进行综合评价

对主成分进行加权综合，将主成分的权数根据它们的方差贡献率来确定，因为方差贡献率反映了各个主成分的信息含量多少. 设 $Z_1, Z_2 \cdots, Z_m$ 是利用主成分分析所提取出来的前 m 个主成分，它们的特征根分别是 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m$，每个主成分 Z_i 的方差贡献率为 α_i，则可构造综合评价函数

$$Y = \alpha_1 Z_1 + \alpha_2 Z_2 + \cdots + \alpha_m Z_m$$

其中 Z_i 为第 i 个主成分的得分.把 m 个主成分得分带入 Y 函数后，即可得到每个样本的综合评价函数得分，根据每个样本的综合评价函数得分的大小就可以对其进行综合排名.

由上分析，进行主成分分析的主要**步骤**如下：

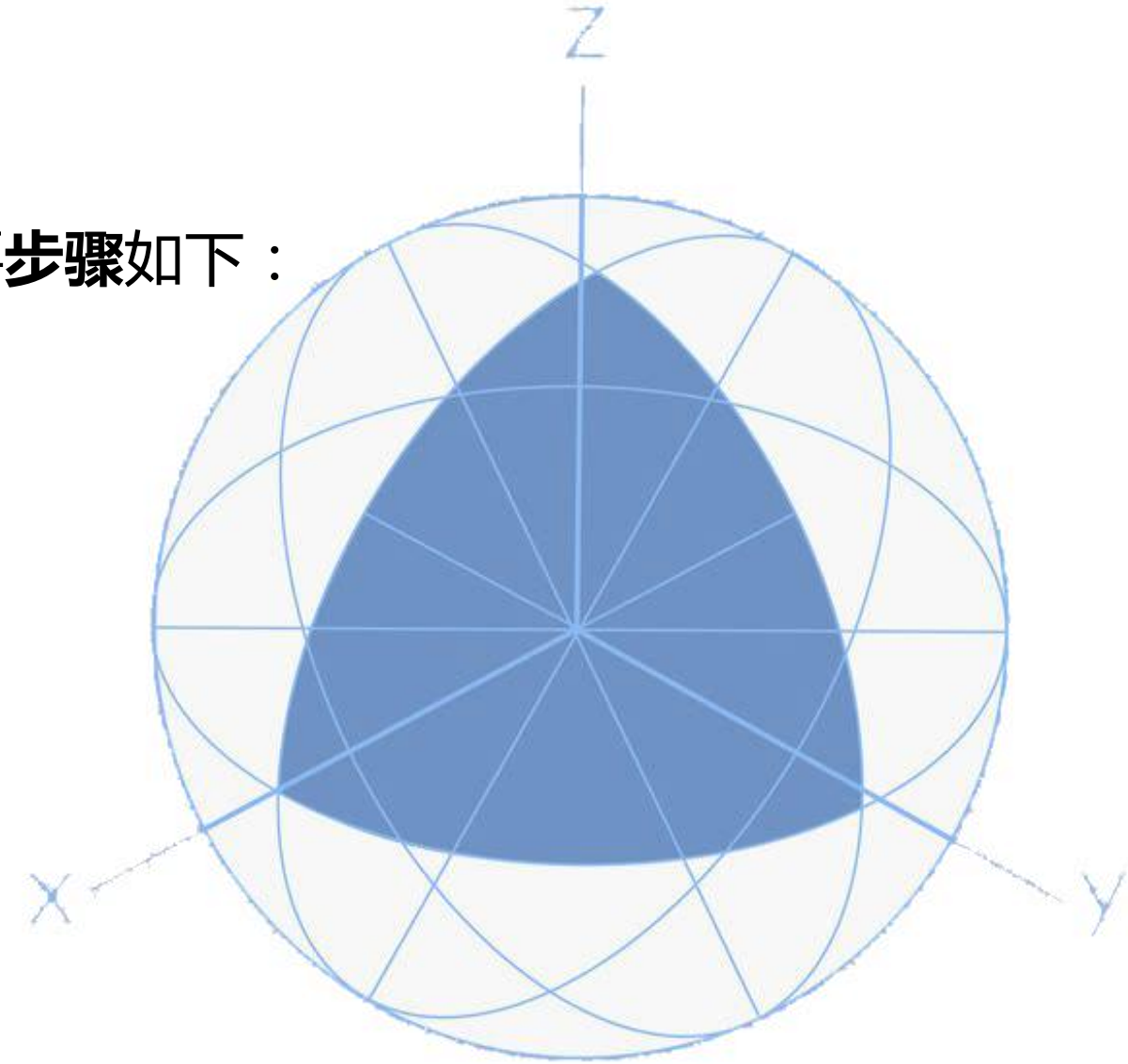
(1)指标数据标准化；

(2)求指标之间的相关阵 R；

(3)确定主成分个数 m；

(4)求主成分 Z_i 表达式；

(5)利用主成分进行综合评价.

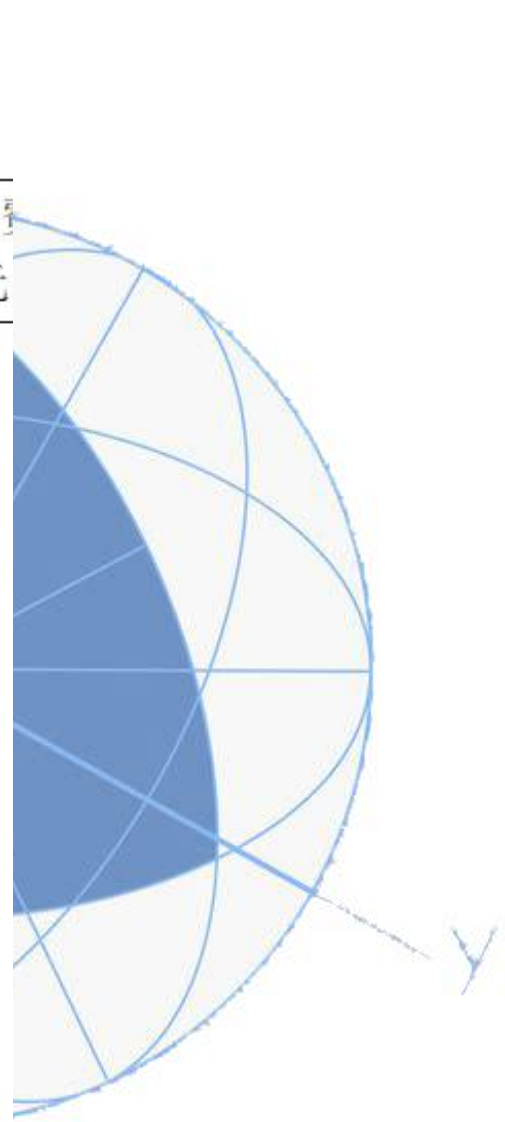


八、案例分析：地区居民家庭收支情况

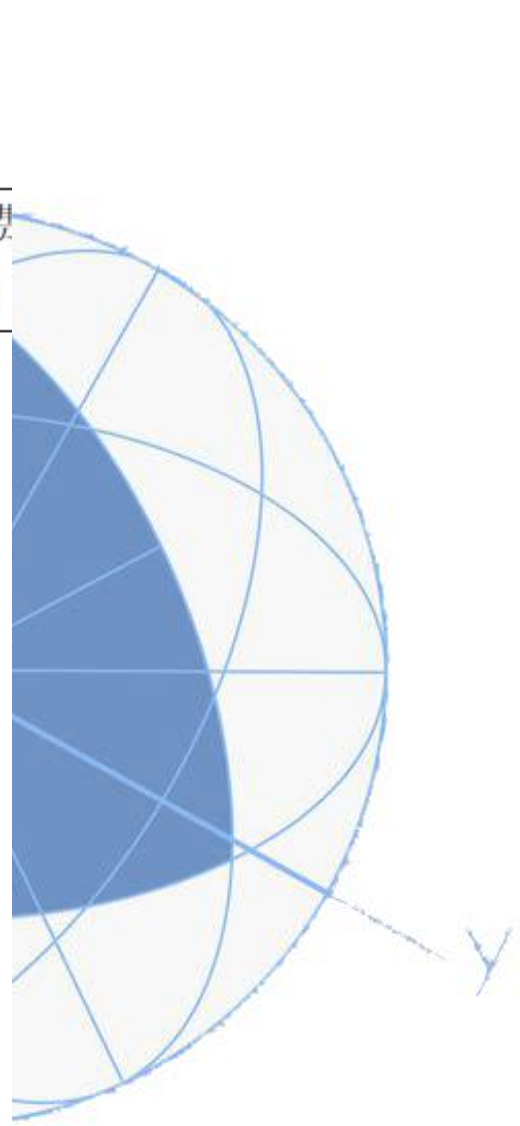
下表是我国 2005 年第 1,2 季度分地区城镇居民家庭收支基本情况，通过这个例子，介绍如何利用 R 软件实现主成分分析。

地区	平均每户人口/人	平均每户就业人口/人	平均每一就业者负担人数/人	平均每人实际可支配收入/元	平均每人消费性支出/元
北京	2.9	1.6	1.8	8545.1	6249.3
天津	2.9	1.4	2	6189.1	4549.1
河北	2.9	1.5	1.9	4582.9	3317.3
山西	3	1.5	2	4359.7	3066.8
内蒙古	2.9	1.5	1.9	4712.1	3557.8
辽宁	2.9	1.4	2	4501.2	3530.7
吉林	3	1.5	1.9	4293.7	3271.5

地区	平均每户人口/人	平均每户就业人口/人	平均每一就业者负担人数/人	平均每人实际可支配收入/元	平均每人消费性支出/元
黑龙江	2.8	1.3	2.2	3902.3	2858.7
上海	3	1.6	1.9	9656.5	6623.3
江苏	2.9	1.4	2.1	6371.1	4222.1
浙江	2.8	1.4	1.9	8921.2	6127.5
安徽	3	1.6	1.9	4311.6	3121.4
福建	3.1	1.6	1.9	6471.8	4292.3
江西	2.9	1.5	1.9	4369.7	2945.1
山东	2.9	1.7	1.7	5357.7	3517.6
河南	3	1.5	1.9	4415.8	2934
湖南	3	1.5	2	4558.5	3338.1
湖北	2.9	1.4	2.1	5010.7	3616.4
广东	3.3	1.7	1.9	7828.8	5941.7



地区	平均每户人口/人	平均每户就业人口/人	平均每一就业者负担人数/人	平均每人实际可支配收入/元	平均每人消费性支出/元
广西	3	1.5	2	4876.8	3508.5
海南	3.6	1.6	2.3	4323	2975.4
重庆	3.1	1.6	1.9	5283.8	4187.8
四川	2.9	1.4	2	4333.5	3326.7
贵州	3.1	1.4	2.1	4177.4	3066.3
云南	3	1.3	2.2	4619.8	3415.4
西藏	3.4	1.7	2	4668.8	4467.1
陕西	3	1.5	2	4342.7	3186.6
甘肃	2.9	1.5	1.9	4.31.8	3113.2
青海	3	1.3	2.3	3971.8	3070.3
宁夏	2.9	1.3	2.2	4.78.3	3133.7
新疆	3	1.5	2.1	4.18.4	3015.1



（1）导入数据，求出相关系数矩阵.

```
> test<-read.csv("C:\\Users\\Administrator\\Desktop\\主1.csv",header=T)
> a=cor(test[,2:6])
> a
           x1         x2         x3          x4          x5
x1  1.00000000  0.5301188  0.2415472 -0.05059688  0.03818932
x2  0.53011882  1.0000000 -0.6346865  0.31947029  0.35702655
x3  0.24154721 -0.6346865  1.0000000 -0.41956430 -0.39797614
x4 -0.05059688  0.3194703 -0.4195643  1.00000000  0.96767839
x5  0.03818932  0.3570265 -0.3979761  0.96767839  1.00000000
> |
```

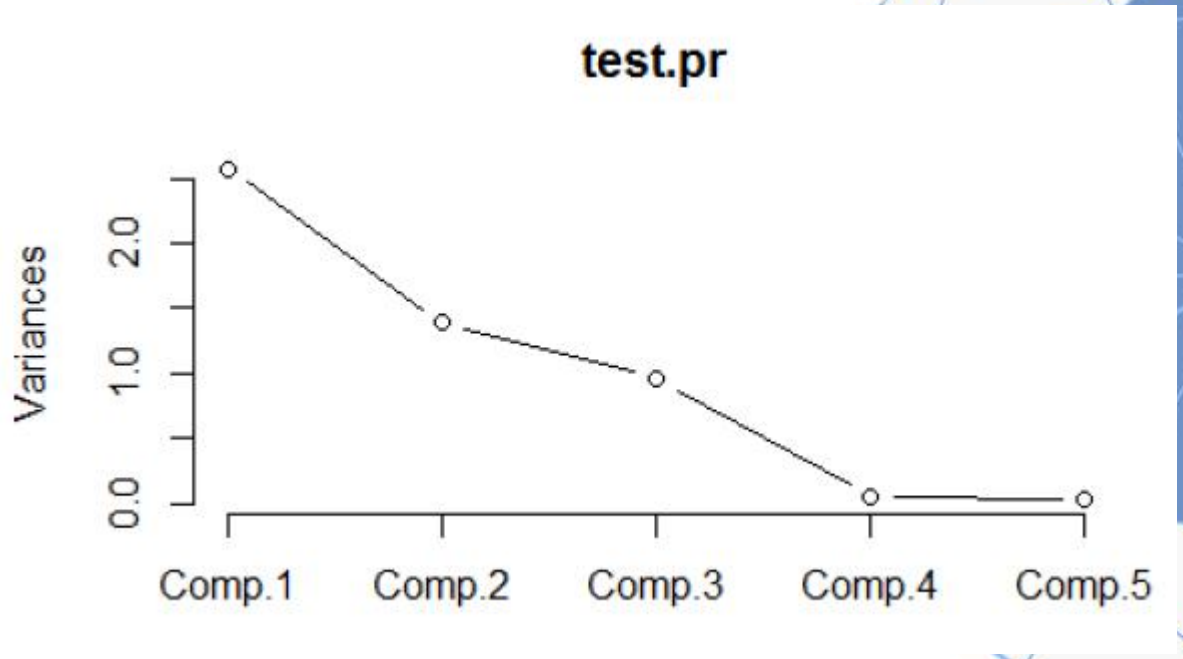
（2）求出相关系数矩阵的特征值和特征向量.

```
> eigen(a)
$values
[1] 2.57600426 1.38949217 0.96112276 0.04661280 0.02676801

$vectors
            [,1]       [,2]       [,3]       [,4]       [,5]
[1,]  0.07530817  0.7873023 -0.3427597  0.4668378 -0.1976412
[2,]  0.44110005  0.5192346  0.3304279 -0.6276242  0.1809184
[3,] -0.44961650  0.1062337 -0.6836021 -0.5441940  0.1519883
[4,]  0.54395888 -0.2539892 -0.3731209 -0.2182263 -0.6728717
[5,]  0.54928423 -0.1864255 -0.4084142  0.2106667  0.6725695
```

继续求解方差贡献率，累计方差贡献率，并据此寻找主成份以及求出载荷矩阵.

```
> test.pr<-princomp(test[,2:6],cor=TRUE)
> summary(test.pr,loadings=TRUE)
Importance of components:
                          Comp.1    Comp.2    Comp.3      Comp.4      Comp.5
Standard deviation     1.6049935 1.1787672 0.9803687 0.215899986 0.163609320
Proportion of Variance 0.5152009 0.2778984 0.1922246 0.009322561 0.005353602
Cumulative Proportion  0.5152009 0.7930993 0.9853238 0.994646398 1.000000000

Loadings:
   Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5
x1         0.787 -0.343  0.467 -0.198
x2  0.441  0.519  0.330 -0.628  0.181
x3 -0.450  0.106 -0.684 -0.544  0.152
x4  0.544 -0.254 -0.373 -0.218 -0.673
x5  0.549 -0.186 -0.408  0.211  0.673
```

在观察累计方差贡献率的同时我们可以参看碎石图如下：



(3)将数据标准化： x_i 为经标准化的变量如下：

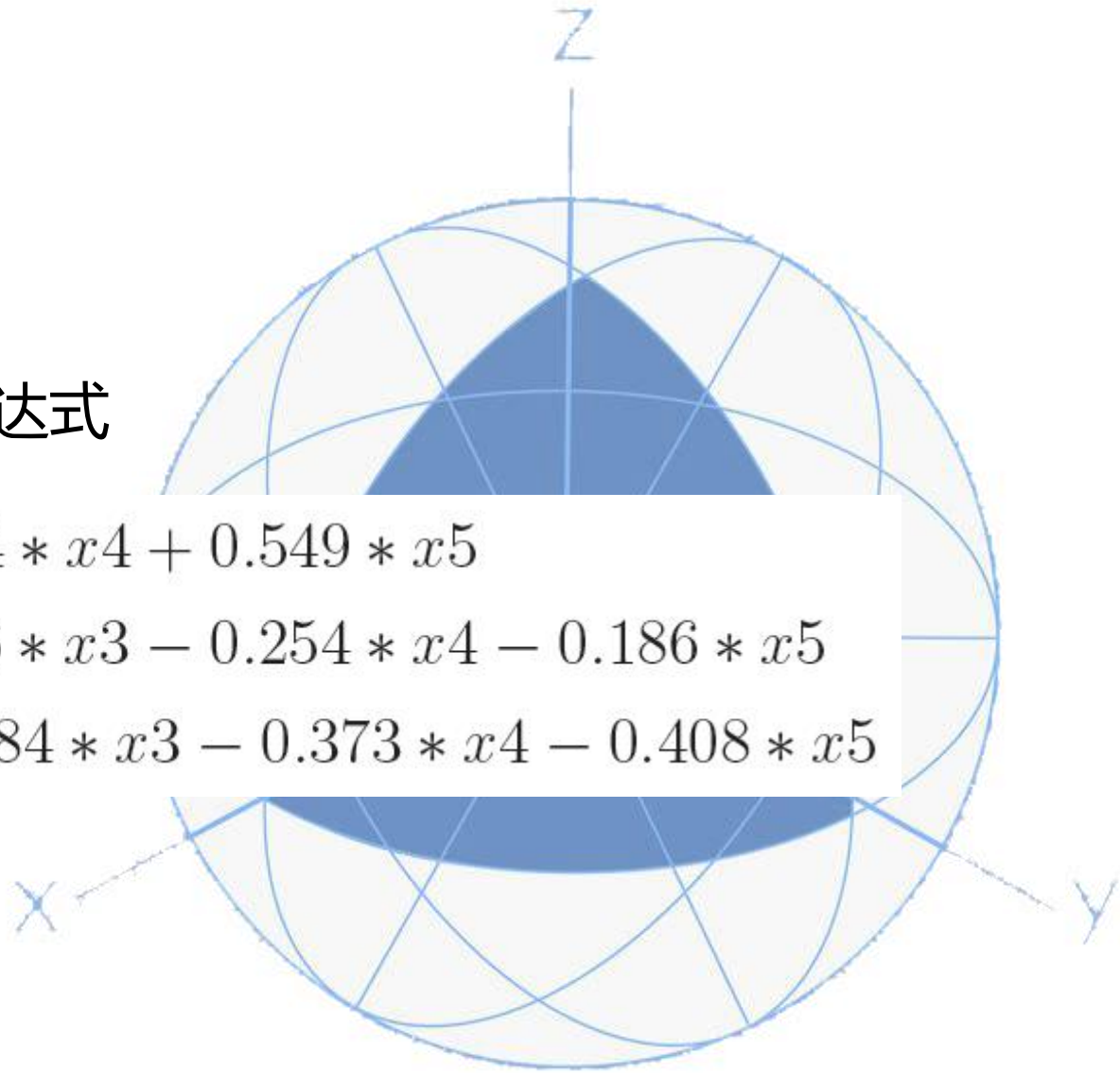
```
> zhongwen=as.character(test[,1])
> zu=scale(test[,2:6])
> zu1=as.data.frame(zu)
> zu2=cbind(zhongwen,zu1)
> zu2
   zhongwen         x1          x2          x3          x4         x5
1        北京 -0.5976143  0.94151885 -1.40352942  2.31217218  2.3083851
2        天津 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868  0.62463748  0.7113280
3        河北 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.39588897 -0.4457447
4        山西  0.0000000  0.08307519  0.02300868 -0.53770288 -0.6810481
5      内蒙古 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.31379955 -0.2198347
6        辽宁 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868 -0.44779845 -0.2452906
7        吉林  0.0000000  0.08307519 -0.69026037 -0.57963710 -0.4887662
8      黑龙江 -1.1952286 -1.63381212  1.44954678 -0.82831973 -0.8765237
9        上海  0.0000000  0.94151885 -0.69026037  2.82770895  2.6596964
10       江苏 -0.5976143 -0.77536847  0.73627773  0.74027427  0.4041655
11       浙江 -1.1952286 -0.77536847 -0.69026037  2.36052361  2.1939741
12       安徽  0.0000000  0.94151885 -0.69026037 -0.56826403 -0.6297604
13       福建  0.5976143  0.94151885 -0.69026037  0.80425572  0.4701068
14       江西  0.5976143  0.08307519 -0.69026037  0.53134021  0.7953651
```

(4)主成分表达式

根据载荷矩阵可以得到主成分的表达式

$$pc1 = 0.441 * x2 - 0.450 * x3 + 0.544 * x4 + 0.549 * x5$$
$$pc2 = 0.787 * x1 + 0.519 * x2 + 0.106 * x3 - 0.254 * x4 - 0.186 * x5$$
$$pc3 = -0.343 * x1 + 0.330 * x2 - 0.684 * x3 - 0.373 * x4 - 0.408 * x5$$

其中 x_i 为经标准化的变量.



(5)计算主成分得分以及综合得分，其中综合得分公式为

$$y = 0.51520 * pc1 + 0.27790 * pc2 + 0.19222 * pc3$$

便可在原数据的基础上，得到以 Y 为变量名的综合得分如下：

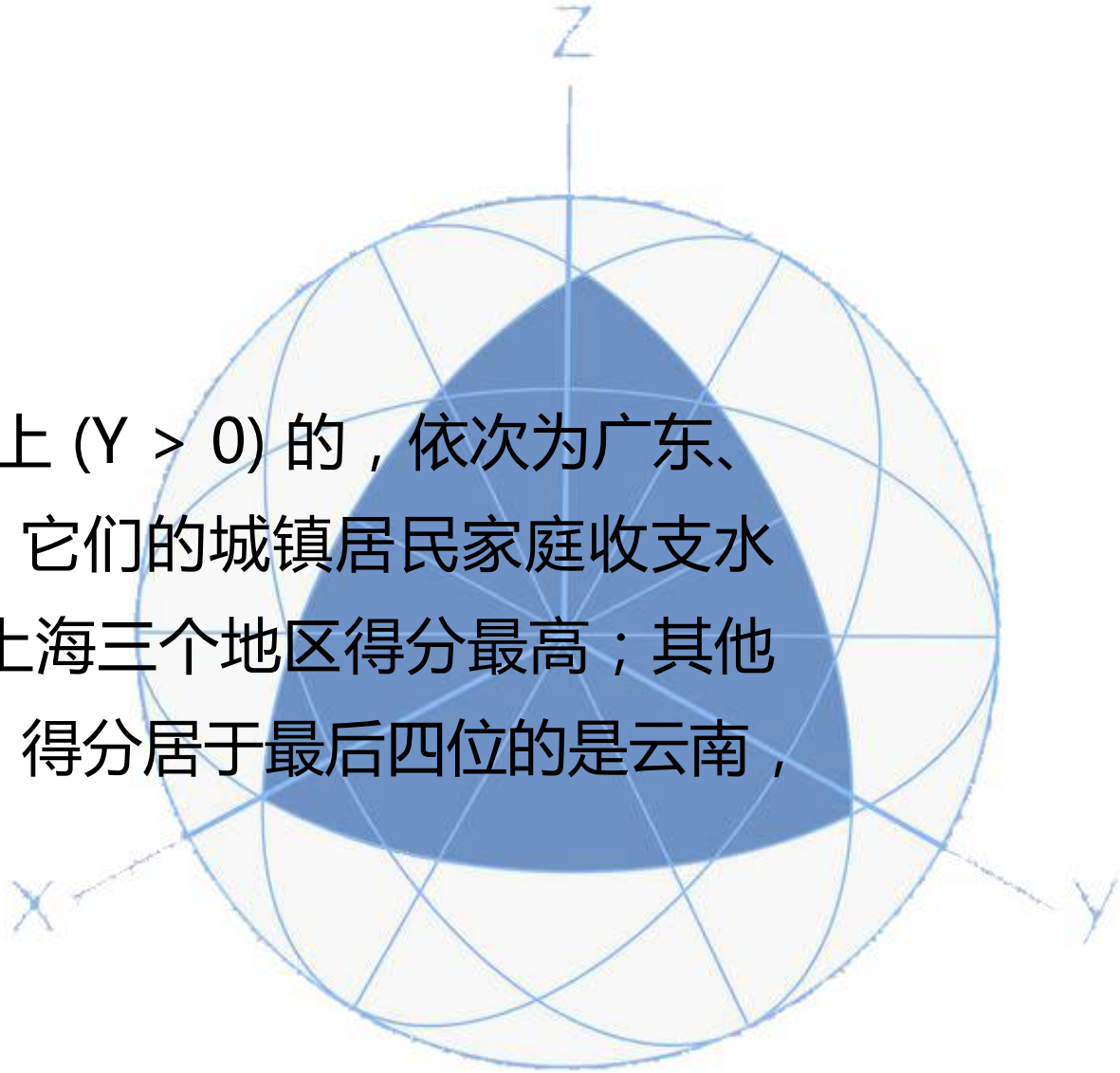
```
> zu3
   zhongwen         x1          x2          x3         x4         x5         pc1         pc2         pc3          y
1        北京 -0.5976143  0.94151885 -1.40352942  2.31217218  2.3083851  3.57192315 -1.1470997 -0.32856430  1.45831918
2        天津 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868  0.62463748  0.7113280  0.37803045 -1.1612647 -0.58983942 -0.24133310
3        河北 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.39588897 -0.4457447 -0.11282411 -0.3169097  1.03406503  0.05257179
4        山西  0.0000000  0.08307519  0.02300868 -0.53770288 -0.6810481 -0.64012350  0.3088064  0.49010767 -0.14976583
5     内蒙古 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.31379955 -0.2198347  0.05585714 -0.3797797  0.91127439  0.09840198
6        辽宁 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868 -0.44779845 -0.2452906 -0.73055831 -0.7109349  0.20047958 -0.53541627
7        吉林  0.0000000  0.08307519 -0.69026037 -0.57963710 -0.4887662 -0.23640192  0.2080868  0.91517417  0.11194782
8     黑龙江 -1.1952286 -1.63381212  1.44954678 -0.82831973 -0.8765237 -2.30462462 -1.2615148 -0.45409967 -1.62520462
9        上海  0.0000000  0.94151885 -0.69026037  2.82770895  2.6596964  3.72427395 -0.7974609 -1.35705224  1.43627897
10       江苏 -0.5976143 -0.77536847  0.73627773  0.74027427  0.4041655 -0.04866642 -1.0578977 -0.99552567 -0.51042265
11       浙江 -1.1952286 -0.77536847 -0.69026037  2.36052361  2.1939741  2.45729631 -2.4238809 -1.14938684  0.37146741
12       安徽  0.0000000  0.94151885 -0.69026037 -0.56826403 -0.6297604  0.07095289  0.6769552  1.25174404  0.46529101
13       福建  0.5976143  0.94151885 -0.69026037  0.80425572  0.4701068  1.42143072  0.5940823  0.08606665  0.91396032
14       江西 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.53134921 -0.7953651 -0.37845610 -0.2174734  1.22723684 -0.01951698
```

对得分进行排名，结果如下：

```
> Y=arrange(zu3,-y)
> Y
   zhongwen         x1          x2          x3          x4         x5         pc1        pc2         pc3          y
1      广东  1.7928429  1.79996251 -0.69026037  1.66644872  2.0194457  3.11962443  1.4730854 -0.99433862  1.82546918
2      北京 -0.5976143  0.94151885 -1.40352942  2.31217218  2.3083851  3.57192315 -1.1470997 -0.32856430  1.45831918
3      上海  0.0000000  0.94151885 -0.69026037  2.82770895  2.6596964  3.72427395 -0.7974609 -1.35705224  1.43627897
4      山东 -0.5976143  1.79996251 -2.11679847  0.09639337 -0.2575959  1.65736061  0.2629064  2.31600389  1.37211614
5      西藏  2.3904572  1.79996251  0.02300868 -0.34131094  0.6343025  0.94598850  2.7866220 -0.37316358  1.19004602
6      福建  0.5976143  0.94151885 -0.69026037  0.80425572  0.4701068  1.42143072  0.5940823  0.08606665  0.91396032
7      重庆  0.5976143  0.94151885 -0.69026037  0.04943975  0.3719463  0.95692072  0.8040634  0.40766249  0.79481567
8      安徽  0.0000000  0.94151885 -0.69026037 -0.56826403 -0.6297604  0.07095289  0.6769552  1.25174404  0.46529101
9      浙江 -1.1952286 -0.77536847 -0.69026037  2.36052361  2.1939741  2.45729631 -2.4238809 -1.14938684  0.37146741
10     吉林  0.0000000  0.08307519 -0.69026037 -0.57963710 -0.4887662 -0.23640192  0.2080868  0.91517417  0.11194782
11   内蒙古 -0.5976143  0.08307519 -0.69026037 -0.31379955 -0.2198347  0.05585714 -0.3797797  0.91127439  0.09840198
12     河南  0.0000000  0.08307519 -0.69026037 -0.50205879 -0.8057917 -0.36824632  0.2473486  1.01558387  0.07423321

22     新疆  0.0000000  0.08307519  0.73627773 -0.75455363 -0.7296117 -1.10572281  0.4485259  0.10293092 -0.42523767
23     江苏 -0.5976143 -0.77536847  0.73627773  0.74027427  0.4041655 -0.04866642 -1.0578977 -0.99552567 -0.51042265
24     辽宁 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868 -0.44779845 -0.2452906 -0.73055831 -0.7109349  0.20047958 -0.53541627
25     四川 -0.5976143 -0.77536847  0.02300868 -0.55434949 -0.4369149 -0.89372383 -0.6482288  0.31840583 -0.57938534
26     贵州  0.5976143 -0.77536847  0.73627773 -0.65353028 -0.6815177 -1.40293618  0.4387107 -0.44264123 -0.68595953
27     湖北 -0.5976143 -0.77536847  0.73627773 -0.12407897 -0.1647896 -0.83123094 -0.7325263 -0.44098822 -0.71658600
28     云南  0.0000000 -1.63381212  1.44954678 -0.37244393 -0.3535959 -1.76954086 -0.5339269 -1.24745927 -1.29983237
29     宁夏 -0.5976143 -1.63381212  1.44954678 -0.71649515 -0.6182066 -2.10197596 -0.8676428 -0.80618532 -1.47902089
30   黑龙江 -1.1952286 -1.63381212  1.44954678 -0.82831973 -0.8765237 -2.30462462 -1.2615148 -0.45409967 -1.62520462
31     青海  0.0000000 -1.63381212  2.16281582 -0.78416173 -0.6777604 -2.49245271 -0.2934495 -1.44950545 -1.64428519
>
```

结果分析：

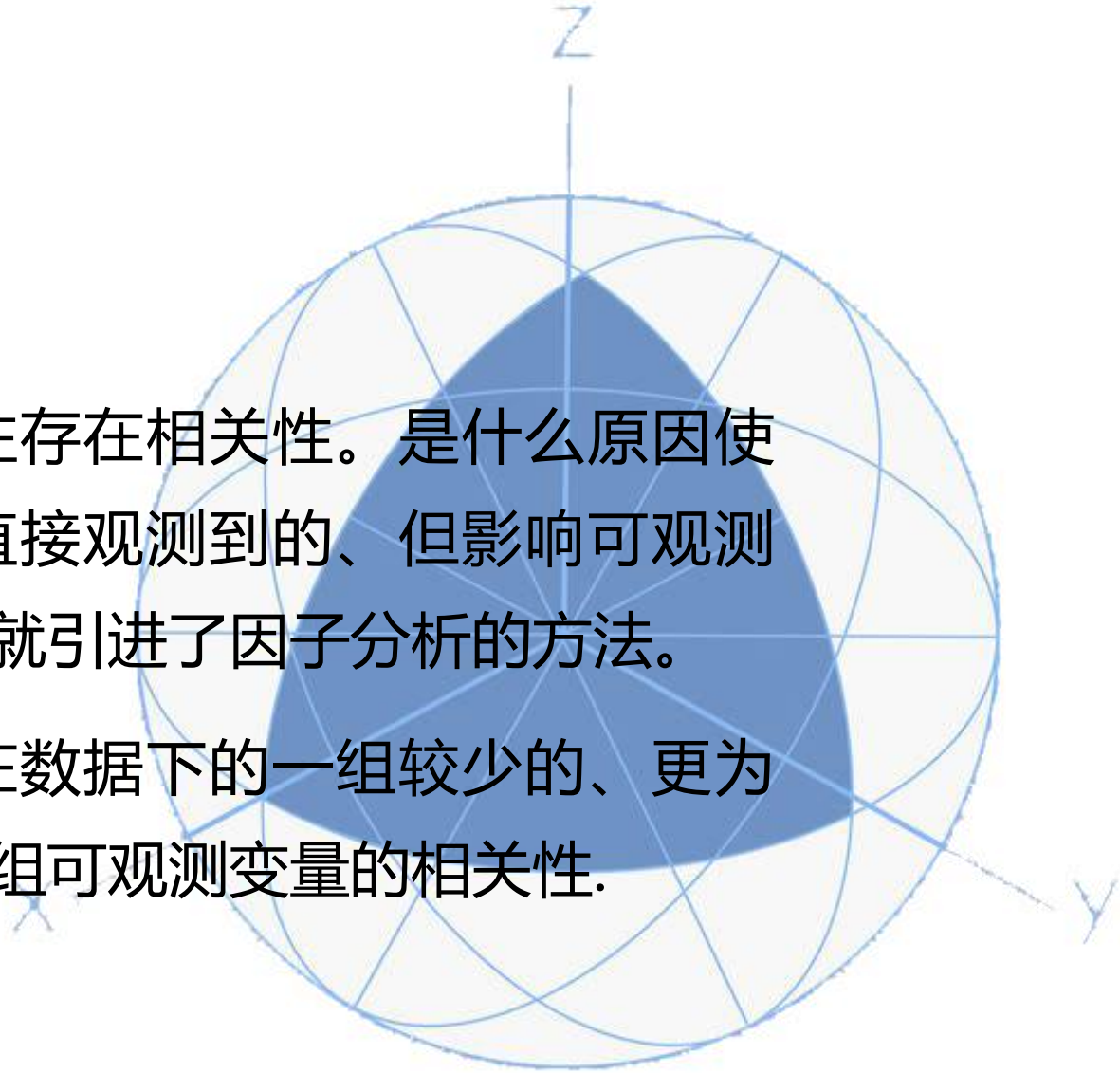
综合主成分得分在超过平均水平之上 (Y > 0) 的，依次为广东、北京、上海、山东、西藏、福建，它们的城镇居民家庭收支水平较高的地区. 其中广东，北京，上海三个地区得分最高；其他省则位于全国平均水平之下 (< 0)；得分居于最后四位的是云南，宁夏，黑龙江，青海.



厦门大学
XIAMEN UNIVERSITY

Part 3

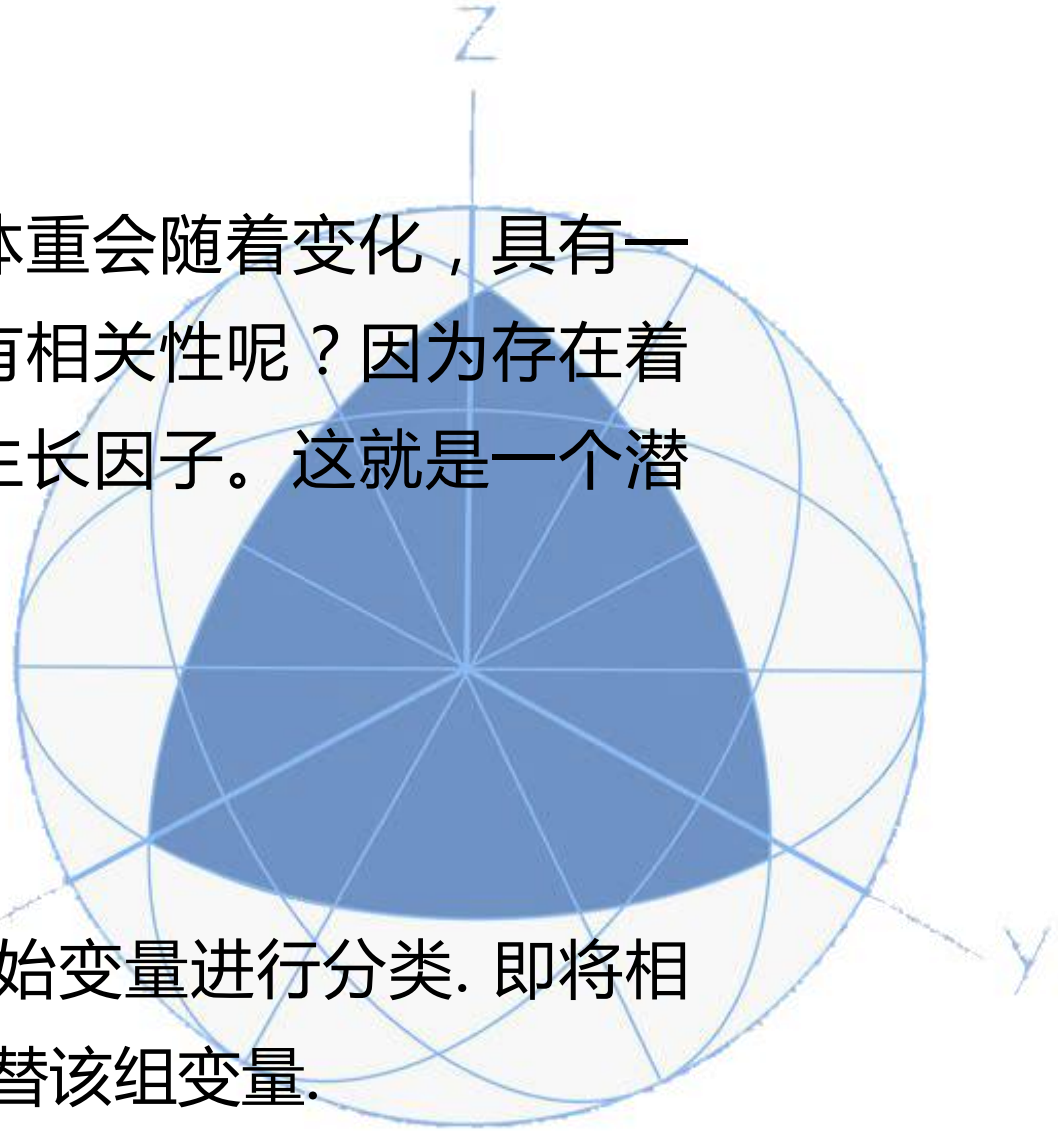
因子分析



一、因子分析法介绍

在多变量分析中，某些变量间往往存在相关性。是什么原因使变量间有关联呢？是否存在不能直接观测到的、但影响可观测变量变化的公共因子呢？这里我们就引进了因子分析的方法。

因子分析法目标是通过发掘隐藏在数据下的一组较少的、更为基本的无法观测的变量，来解释一组可观测变量的相关性.



例：随着年龄的增长，儿童的身高、体重会随着变化，具有一定的相关性，身高和体重之间为何会有相关性呢？因为存在着一个同时支配或影响着身高与体重的生长因子。这就是一个潜在的无法观测的变量。

因子分析主要用于：

1、减少分析变量个数；

2、通过对变量间相关关系探测，将原始变量进行分类. 即将相关性高的变量分为一组，用共性因子代替该组变量.

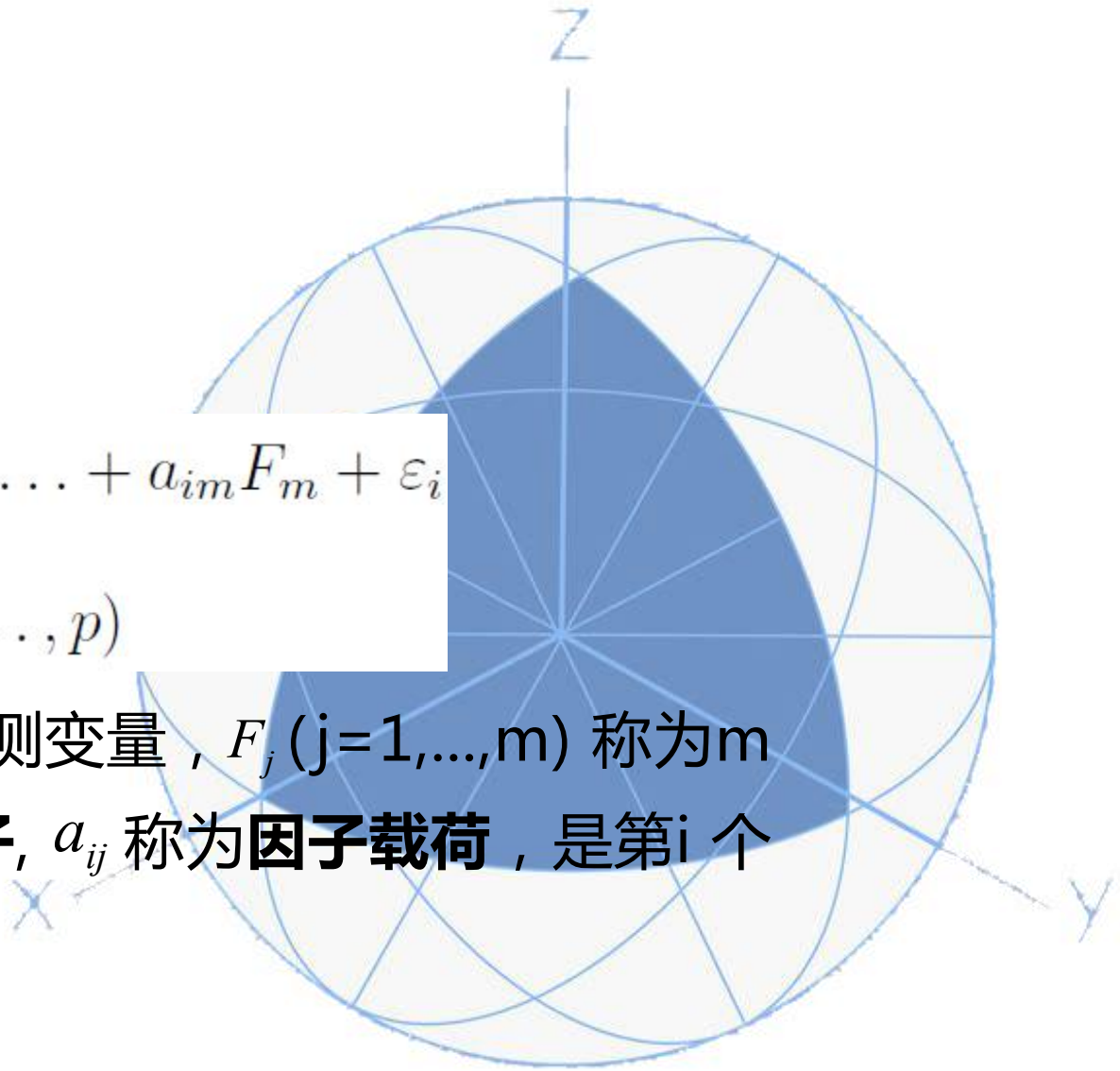
二、因子分析的数学模型

模型形式为：

$$X_i = a_{i1}F_1 + a_{i2}F_2 + \ldots + a_{im}F_m + \varepsilon_i$$

$$(i = 1, 2, \ldots, p)$$

式中的 X_i (i=1,...,p) 是第i个可观测变量，F_j (j=1,...,m) 称为m个**公共因子**，ε_i 称为 X_i 的**特殊因子**，a_{ij} 称为**因子载荷**，是第i 个变量在第j个因子上的负荷.

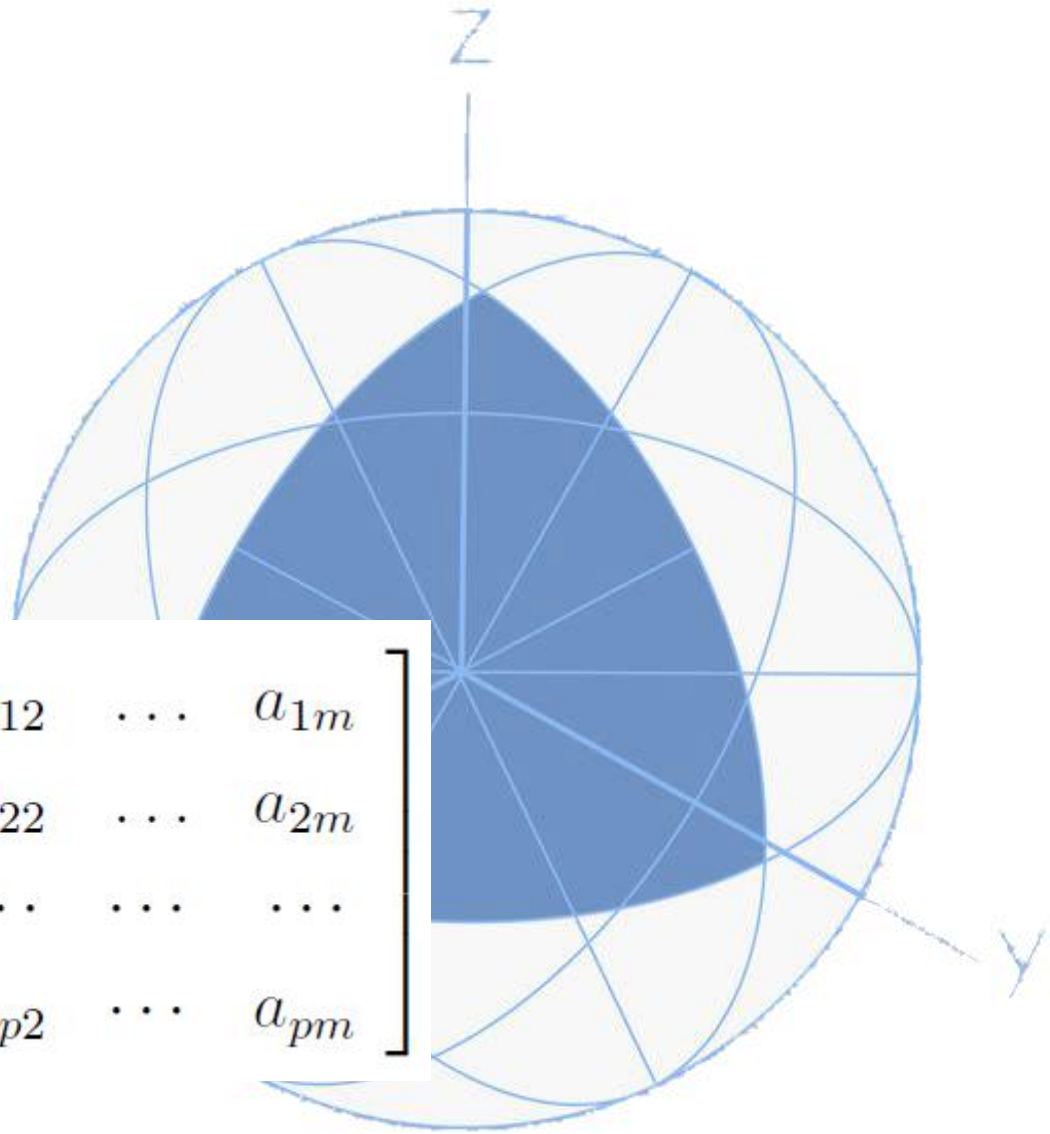


该模型可用矩阵表示为：

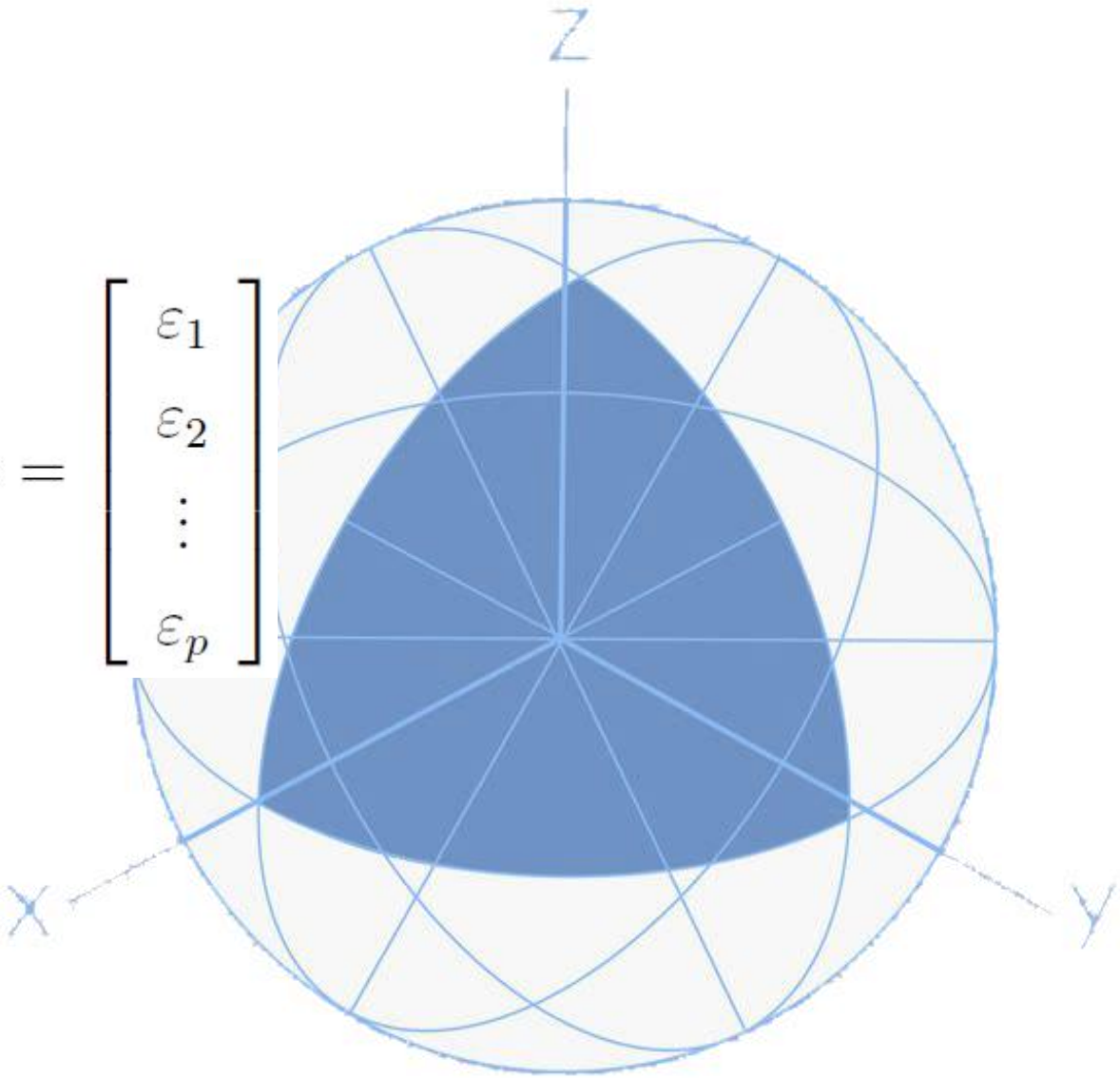
$$X = AF + \varepsilon$$

其中

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_p \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pm} \end{bmatrix}$$



$$F = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_m \end{bmatrix}, \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_p \end{bmatrix}$$



矩阵A称为**因子载荷矩阵。**

且满足以下四个条件：

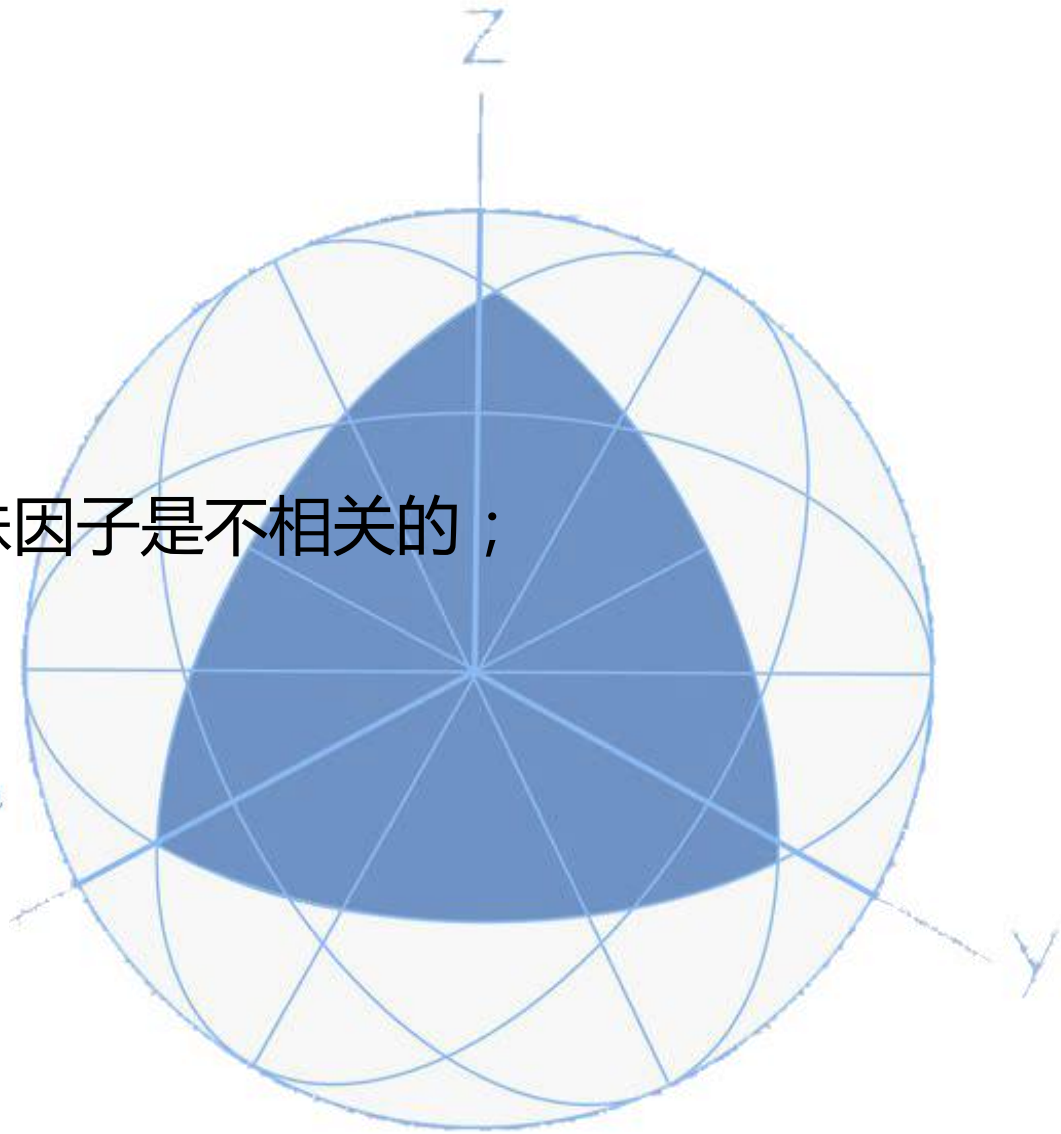
（1）m ≤ p;

（2）cov(F, ε) = 0，即公共因子与特殊因子是不相关的；

（3）

$$D_F = D(F) = \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ 0 & & 1 \end{bmatrix} = I_m$$

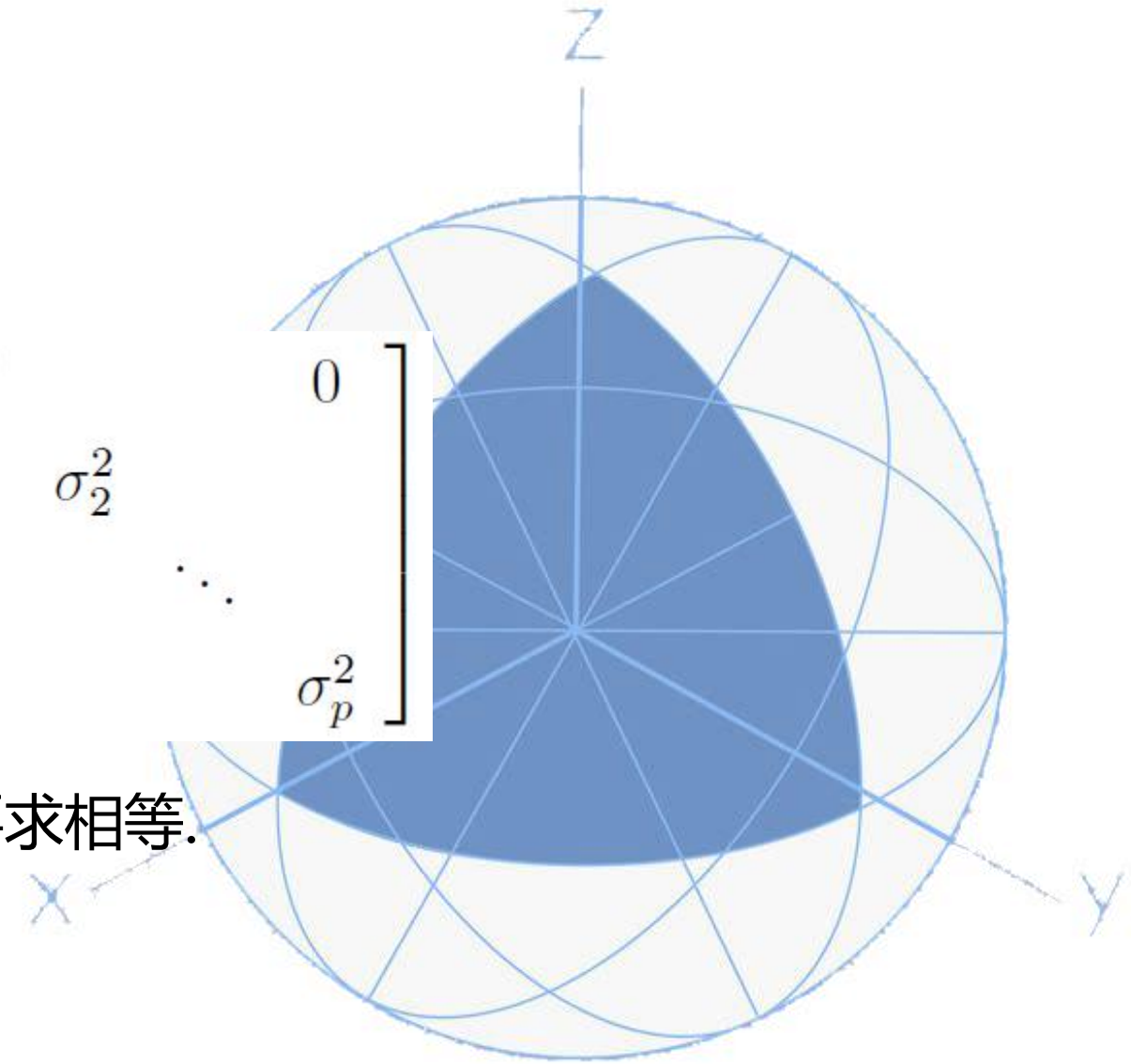
，即各个公共因子不相关且方差为 1；



（4）

$$D_\varepsilon = D(\varepsilon) = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & & 0 \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sigma_p^2 \end{bmatrix}$$

即各个特殊因子不相关，方差不要求相等.

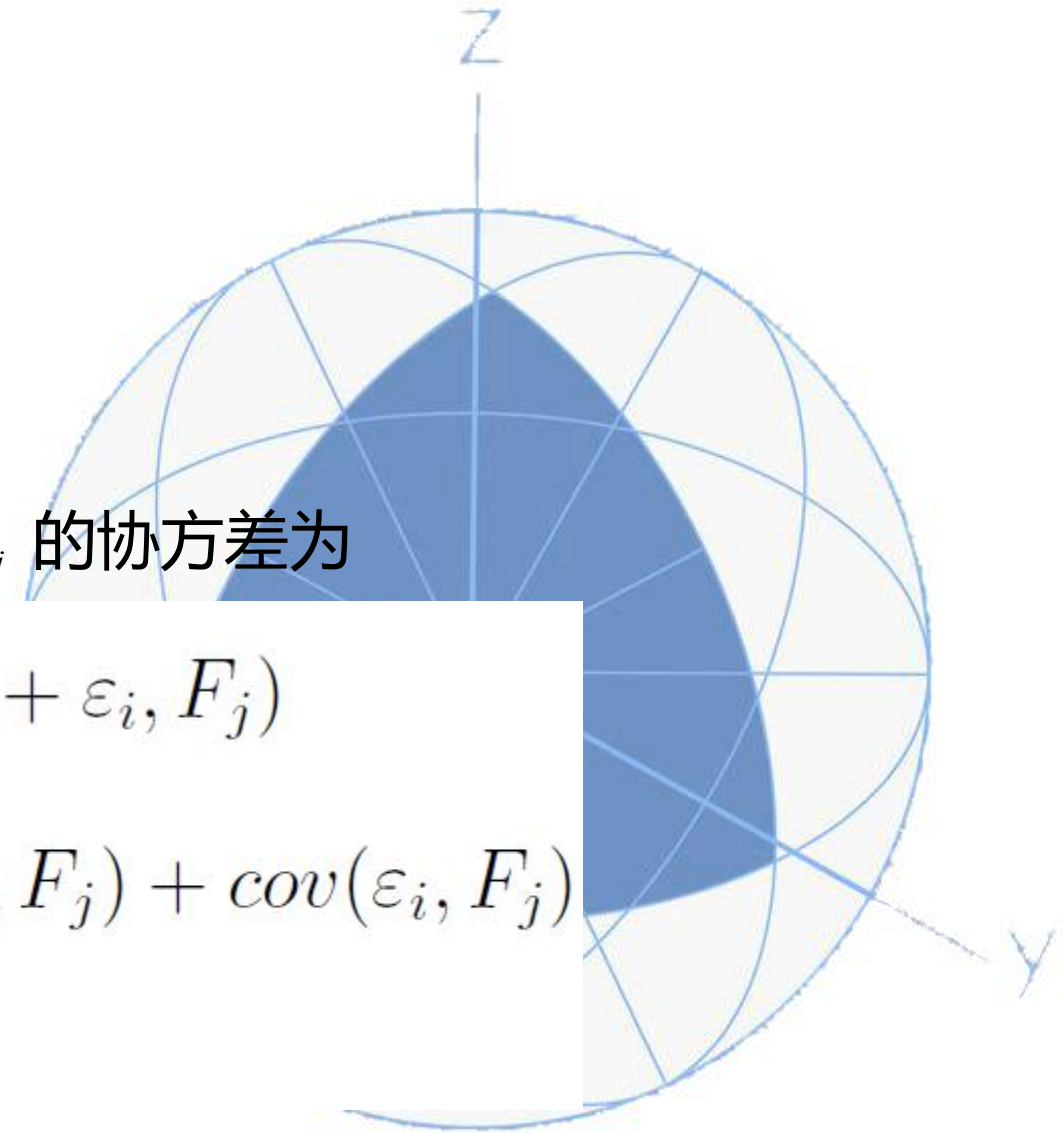


三、因子载荷阵的统计意义

1、因子载荷

对于因子模型，我们可以得到，X_i 与 F_j 的协方差为

$$\begin{aligned} cov(X_i, F_j) &= cov(\sum_{k=1}^{m} a_{ik}F_k + \varepsilon_i, F_j) \\ &= cov(\sum_{k=1}^{m} a_{ik}F_k, F_j) + cov(\varepsilon_i, F_j) \\ &= a_{ij} \end{aligned}$$



如果对 X_i 作了标准化处理，X_i的标准差为 1，且 F_j 的标准差为 1，因此

$$r_{X_i,F_j} = \frac{cov(X_i, F_j)}{\sqrt{D(X_i)}\sqrt{D(F_j)}} = cov(X_i, F_j) = a_{ij}$$

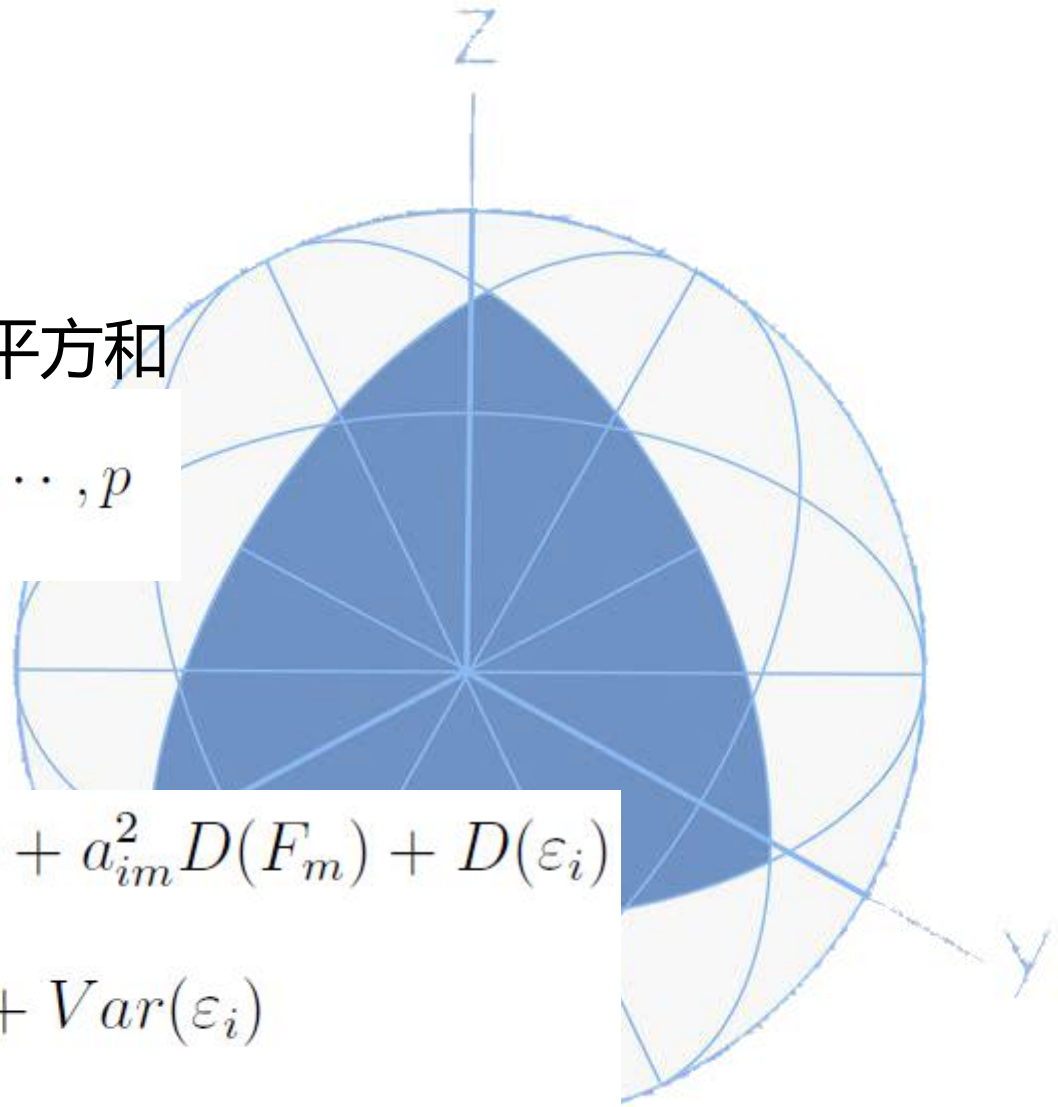
从上面的分析，我们知道对于标准化后的 X_i，a_{ij} 是 X_i 与 F_j 的相关系数，它一方面表示 X_i 对 F_j 的依赖程度，绝对值越大，密切程度越高. 了解这一点对我们理解抽象的因子含义，即因子命名，有非常重要的作用.

2、变量共同度

设因子载荷矩阵为 A，称第 i 行元素的平方和

$$h_i^2 = \sum_{j=1}^{m} a_{ij}^2 \quad i = 1, 2, \cdots, p$$

为变量 X_i 的共同度.



由因子模型，知

$$D(X_i) = a_{i1}^2 D(F_1) + a_{i2}^2 D(F_2) + \cdots + a_{im}^2 D(F_m) + D(\varepsilon_i)$$

$$= a_{i1}^2 + a_{i2}^2 + \cdots + a_{im}^2 + Var(\varepsilon_i)$$

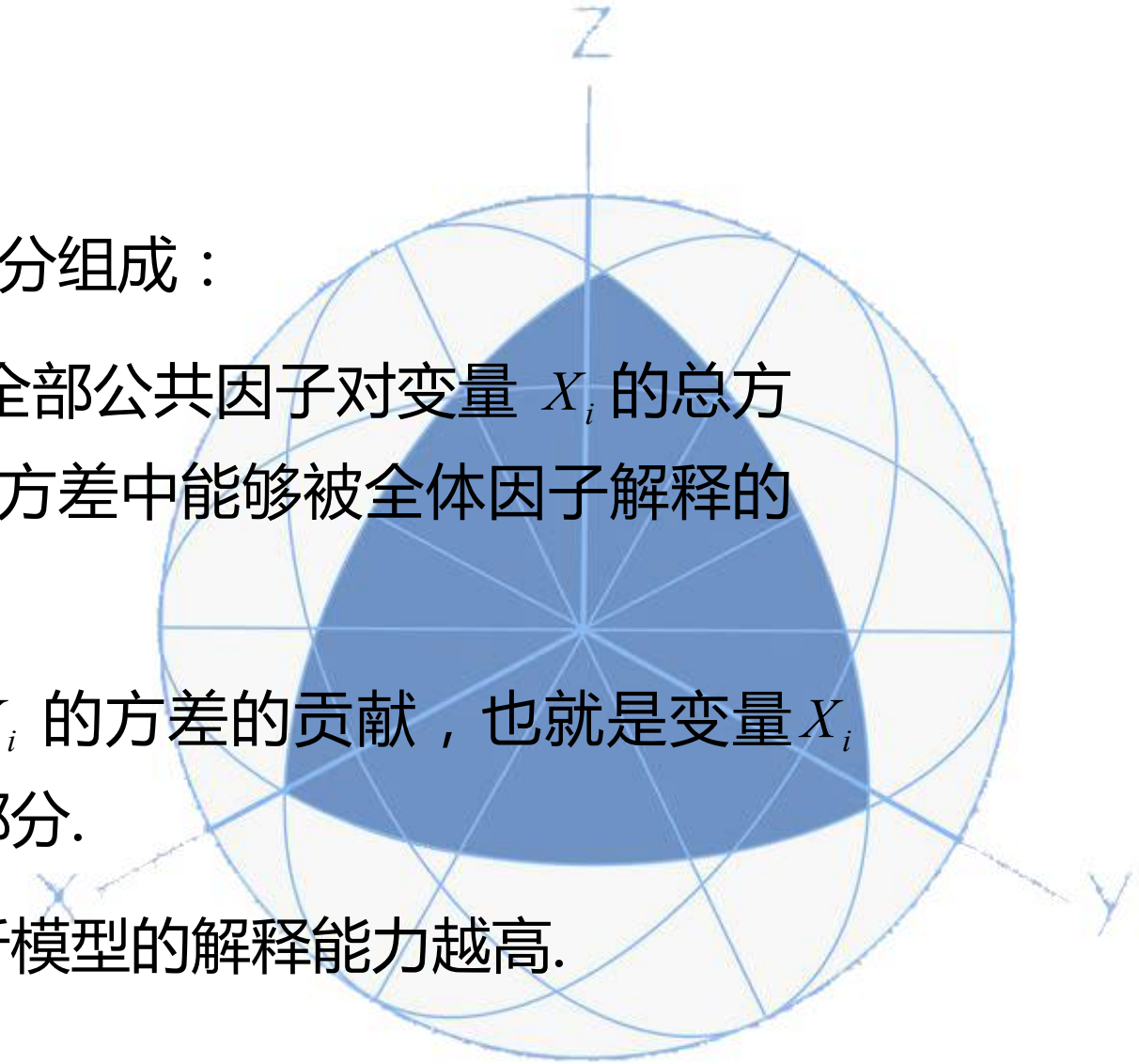
$$= h_i^2 + \sigma_i^2$$

上式说明，变量 X_i 的方差由两部分组成：

第一部分为共同度 h_i^2，它描述了全部公共因子对变量 X_i 的总方差所作的贡献，反映了变量 X_i 的方差中能够被全体因子解释的部分.

第二部分为特殊因子 ε_i 对变量 X_i 的方差的贡献，也就是变量 X_i 的方差中没有被全体因子解释的部分.

变量共同度越高，说明该因子分析模型的解释能力越高.

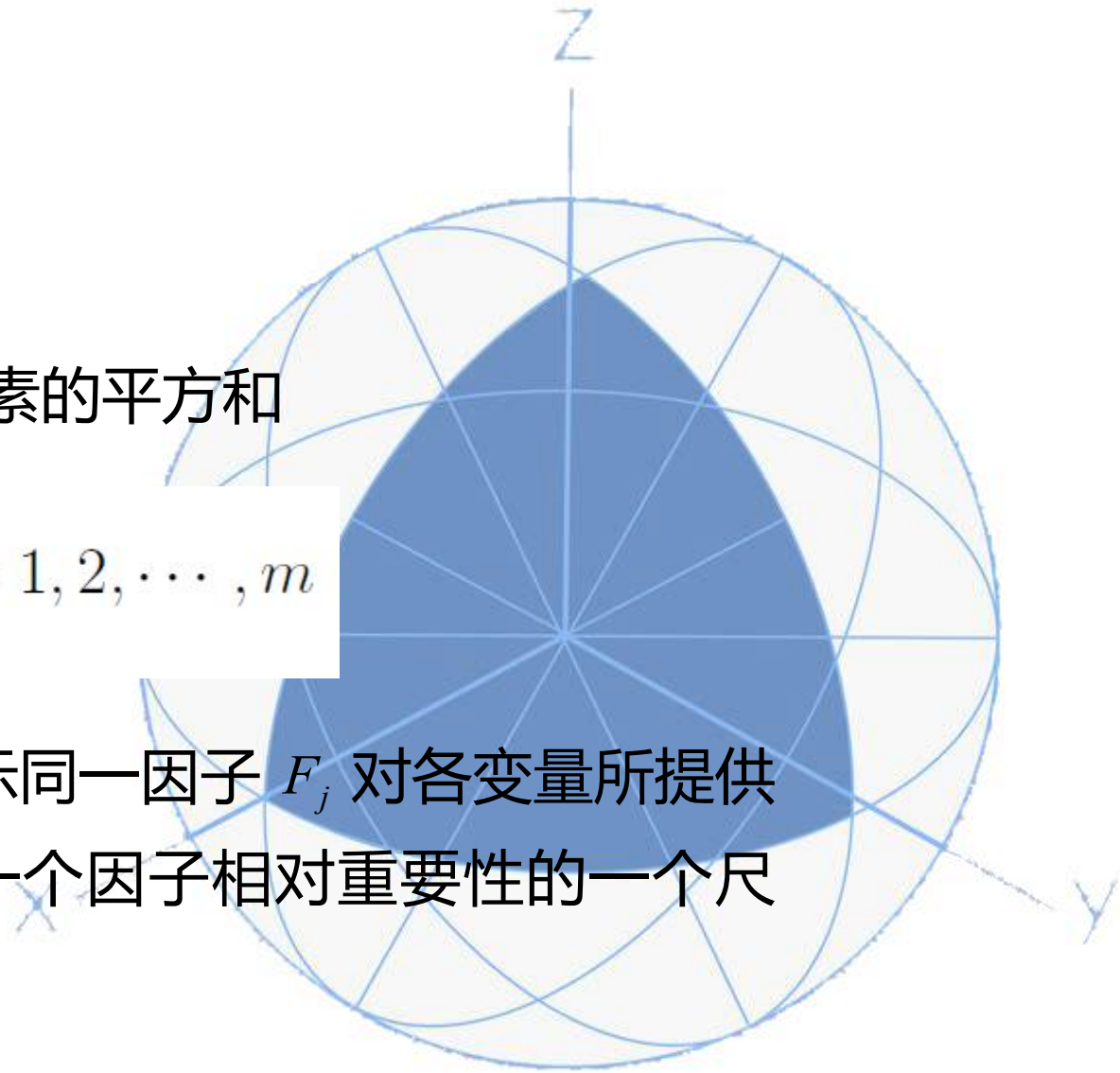


3、因子的方差贡献

设因子载荷矩阵为 A，称第 j 列元素的平方和

$$g_j^2 = \sum_{i=1}^{p} a_{ij}^2 \quad j = 1, 2, \cdots, m$$

为因子 F_j 对 X 的贡献，即 g_j^2 表示同一因子 F_j 对各变量所提供的方差贡献之总和，它是衡量每一个因子相对重要性的一个尺度.



四、因子载荷阵的求解

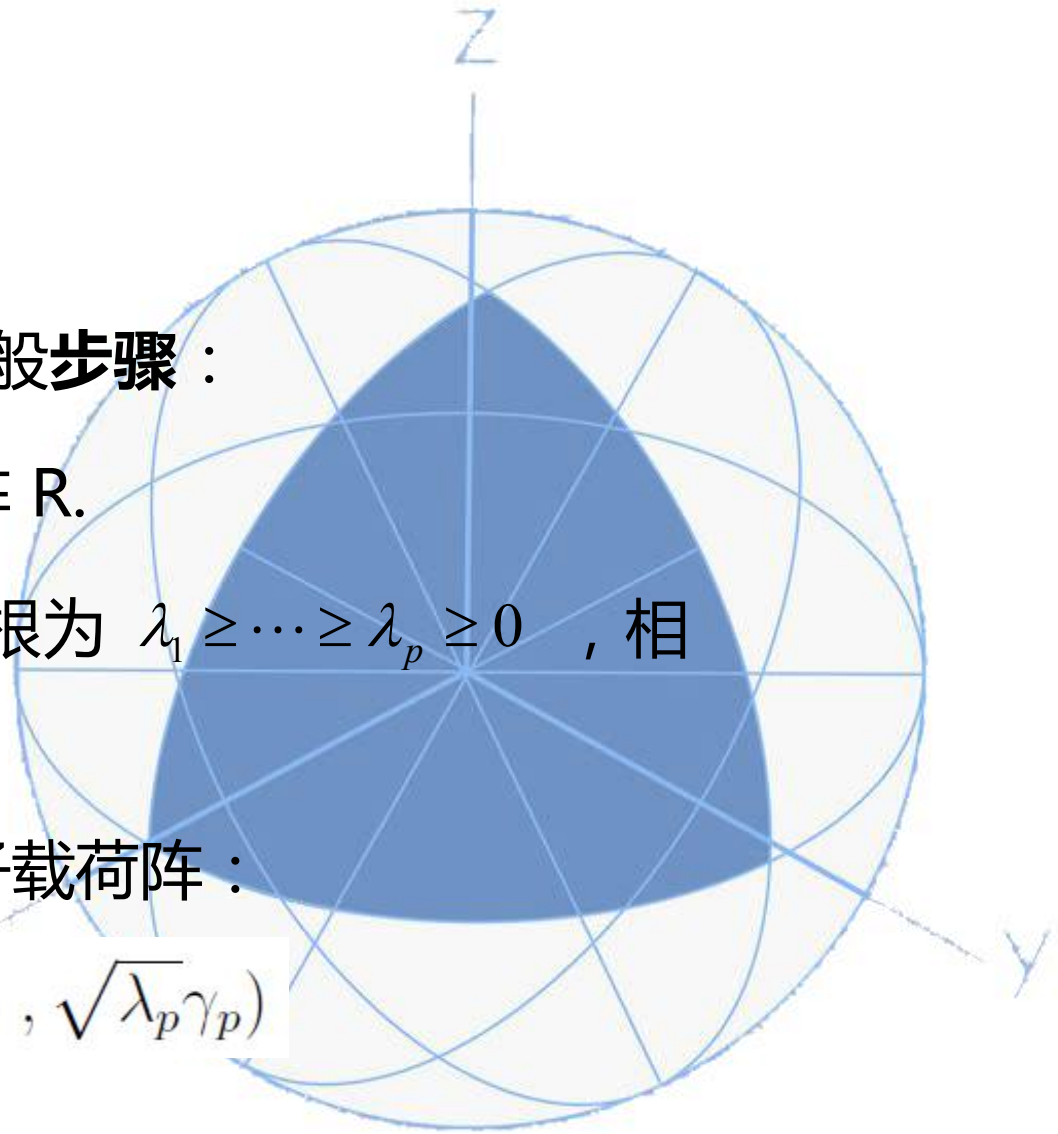
使用主成分分析法求解因子载荷阵的一般**步骤**：

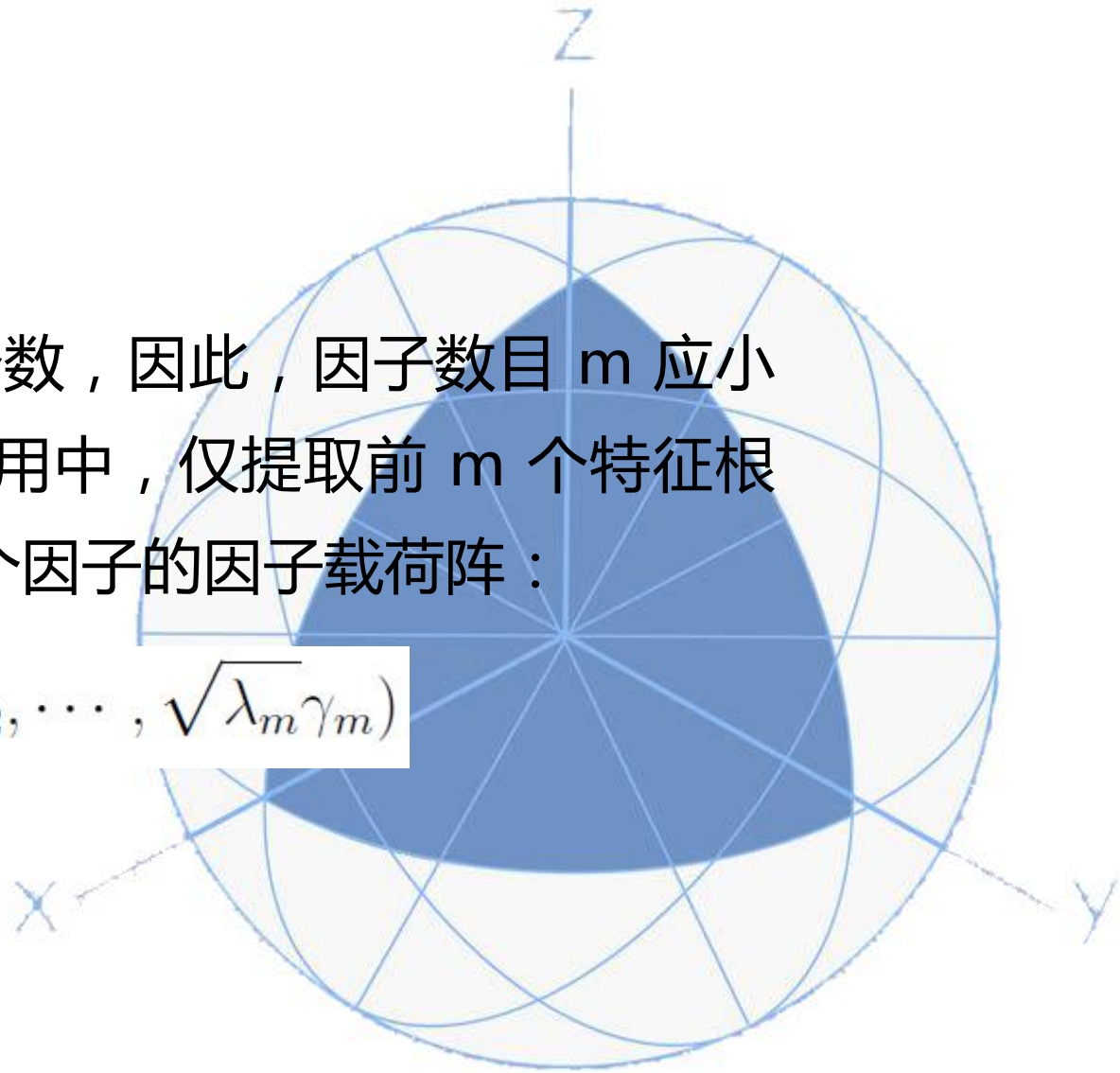
(1)计算原始数据的协差阵 Σ 或相关矩阵 R.

(2)计算协差阵 Σ 或相关矩阵 R 的特征根为 $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ ，相应的单位特征向量为 $\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_p$.

(3)利用 Σ 的特征根和特征向量计算因子载荷阵：

$$A = (\sqrt{\lambda_1}\gamma_1, \sqrt{\lambda_2}\gamma_2, \cdots, \sqrt{\lambda_p}\gamma_p)$$





由于因子分析的目的是减少变量个数，因此，因子数目 m 应小于原始变量个数 p. 所以在实际应用中，仅提取前 m 个特征根和对应的特征向量，构成仅含 m 个因子的因子载荷阵：

$$A = (\sqrt{\lambda_1}\gamma_1, \sqrt{\lambda_2}\gamma_2, \cdots, \sqrt{\lambda_m}\gamma_m)$$

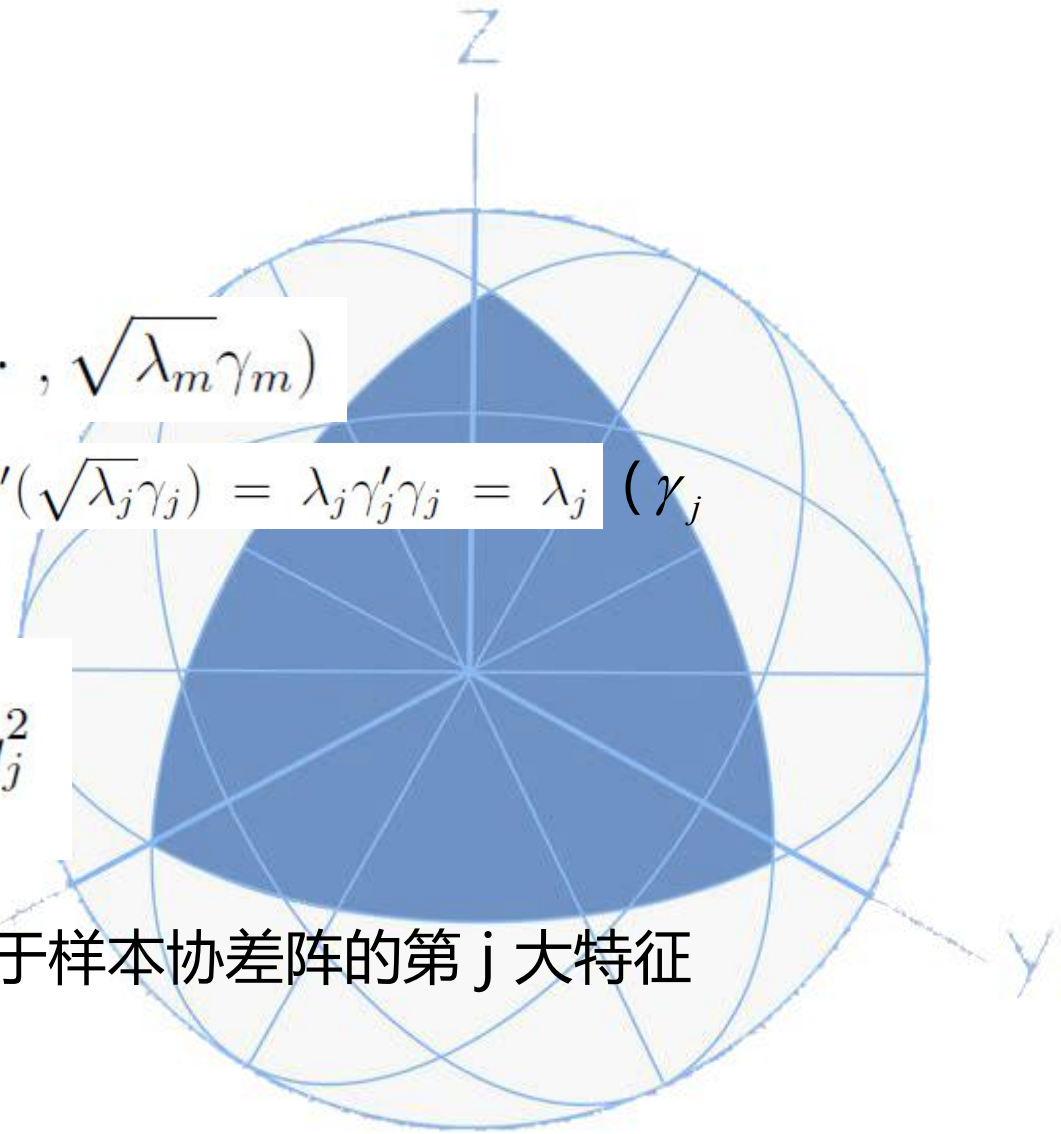
由因子载荷阵的表达式：

$$A = (\sqrt{\lambda_1}\gamma_1, \sqrt{\lambda_2}\gamma_2, \cdots, \sqrt{\lambda_m}\gamma_m)$$

可知，A 中第 j 列元素的平方和为 $(\sqrt{\lambda_j}\gamma_j)'(\sqrt{\lambda_j}\gamma_j) = \lambda_j\gamma_j'\gamma_j = \lambda_j$ (γ_j 是单位特征向量)即有

$$\lambda_j = \sum_{i=1}^{p} a_{ij}^2 = g_j^2$$

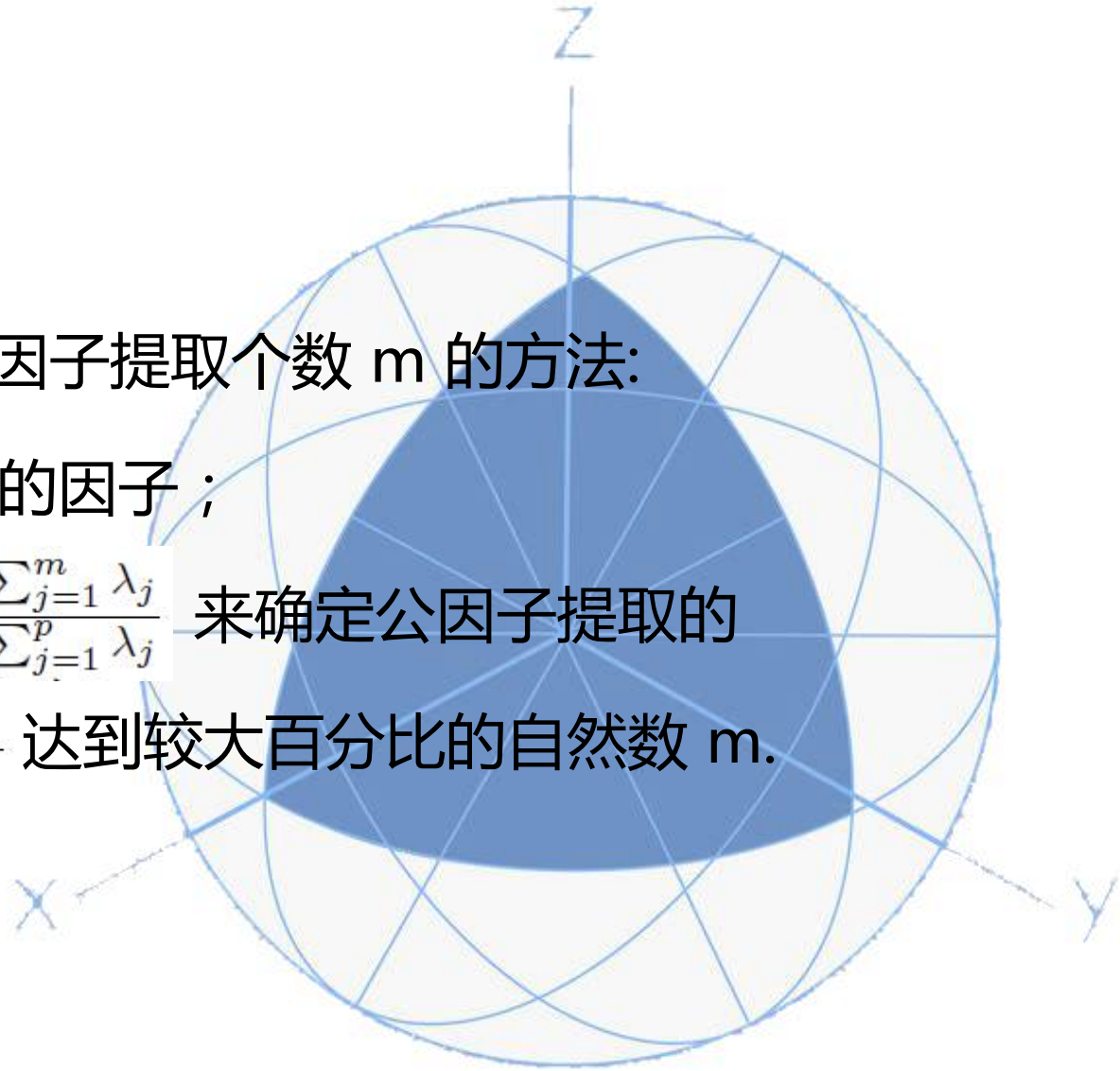
这说明，第 j 个公因子的方差贡献 g_j^2 就等于样本协差阵的第 j 大特征根.

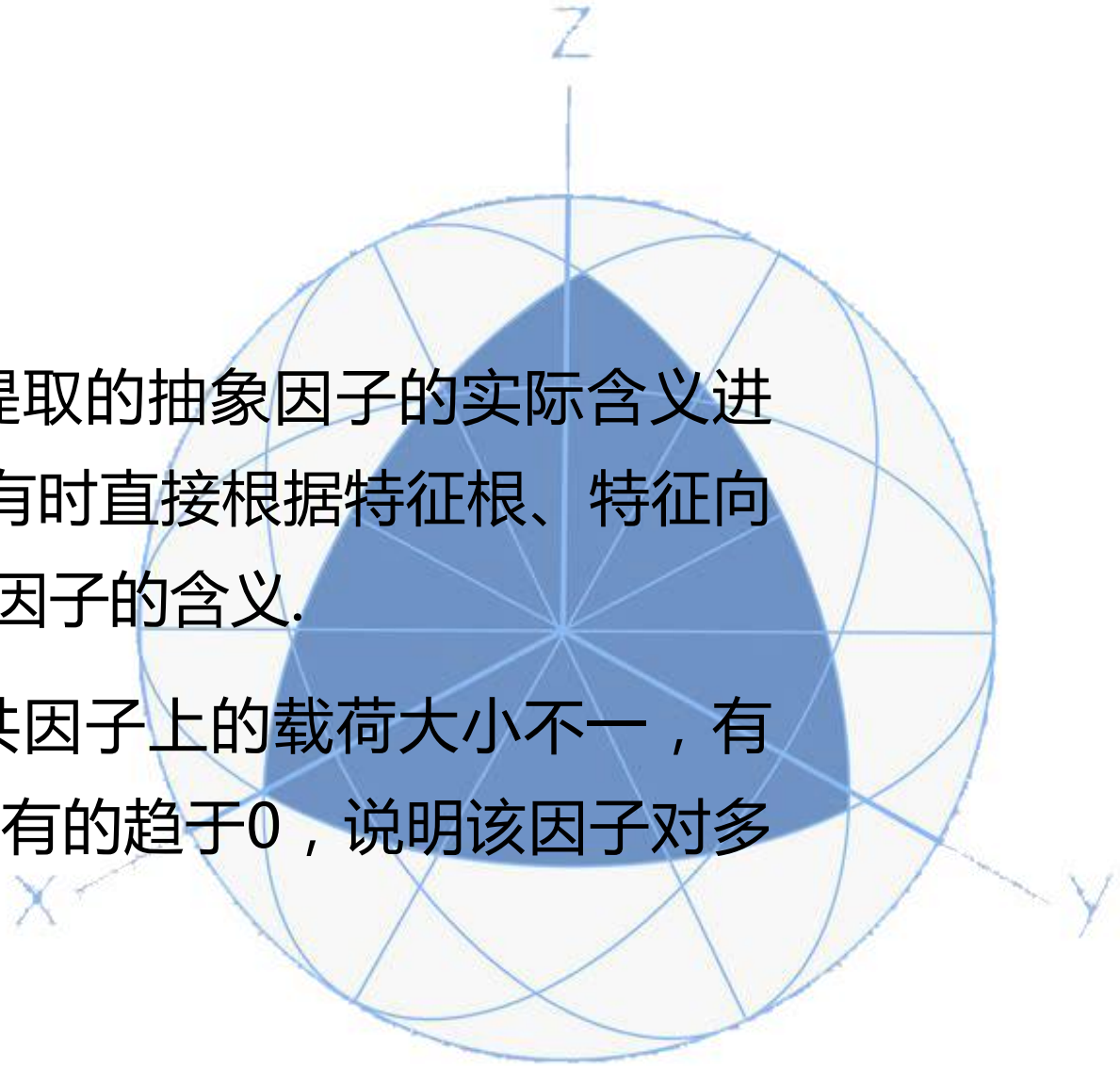


在实际应用中，有两种常用的确定因子提取个数 m 的方法:

一是仅提取方差贡献 $g_j^2(\lambda_j)$ 大于 1的因子；

二是利用因子的累积方差贡献率. $\frac{\sum_{j=1}^{m}\lambda_j}{\sum_{j=1}^{p}\lambda_j}$ 来确定公因子提取的个数，也就是寻找一个使得 $\frac{\sum_{j=1}^{m}\lambda_j}{\sum_{j=1}^{p}\lambda_j}$ 达到较大百分比的自然数 m.





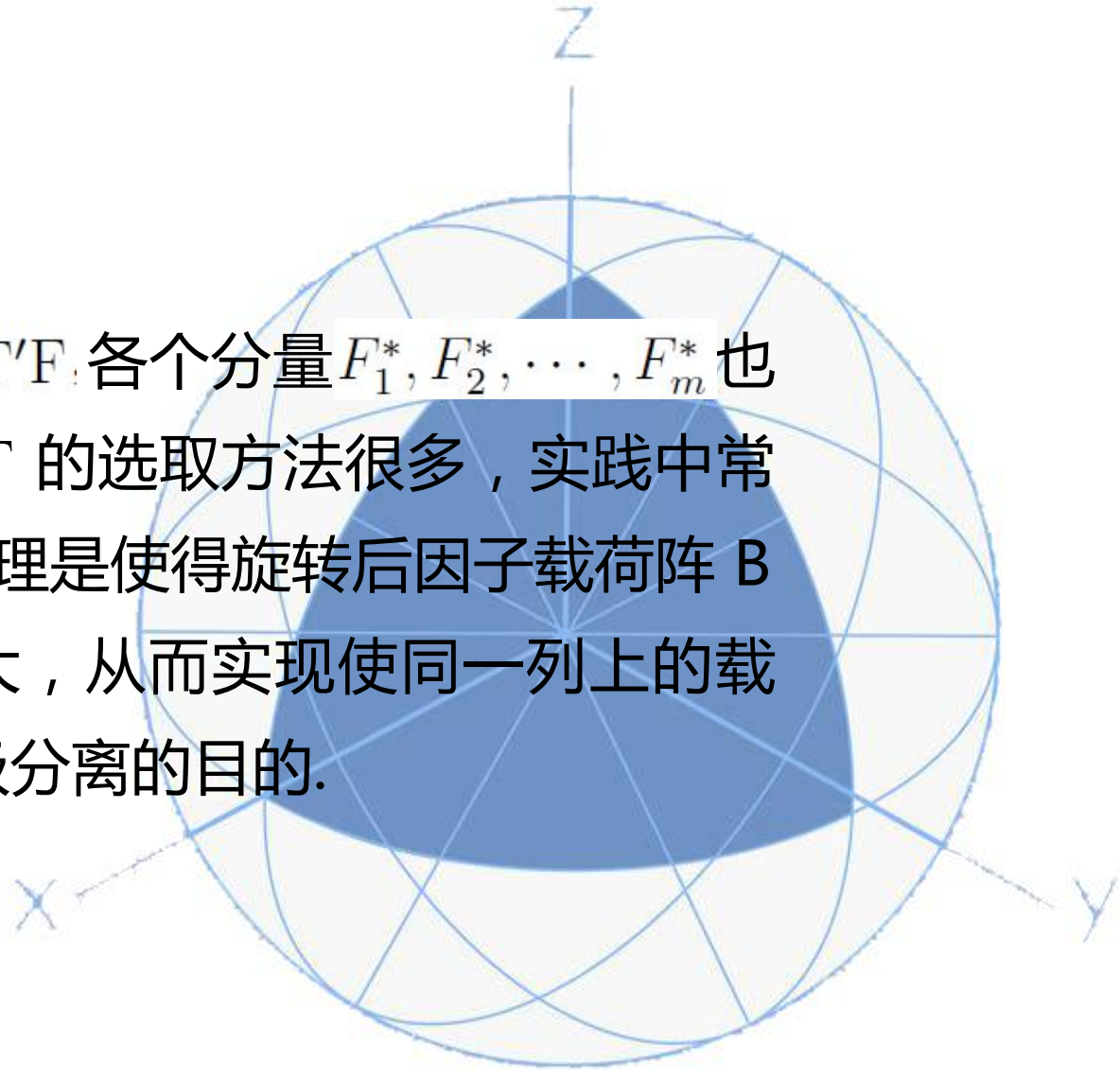
五、因子命名与因子旋转

因子分析的目标之一就是要对所提取的抽象因子的实际含义进行合理解释，即对因子进行命名. 有时直接根据特征根、特征向量求得的因子载荷阵难以看出公共因子的含义.

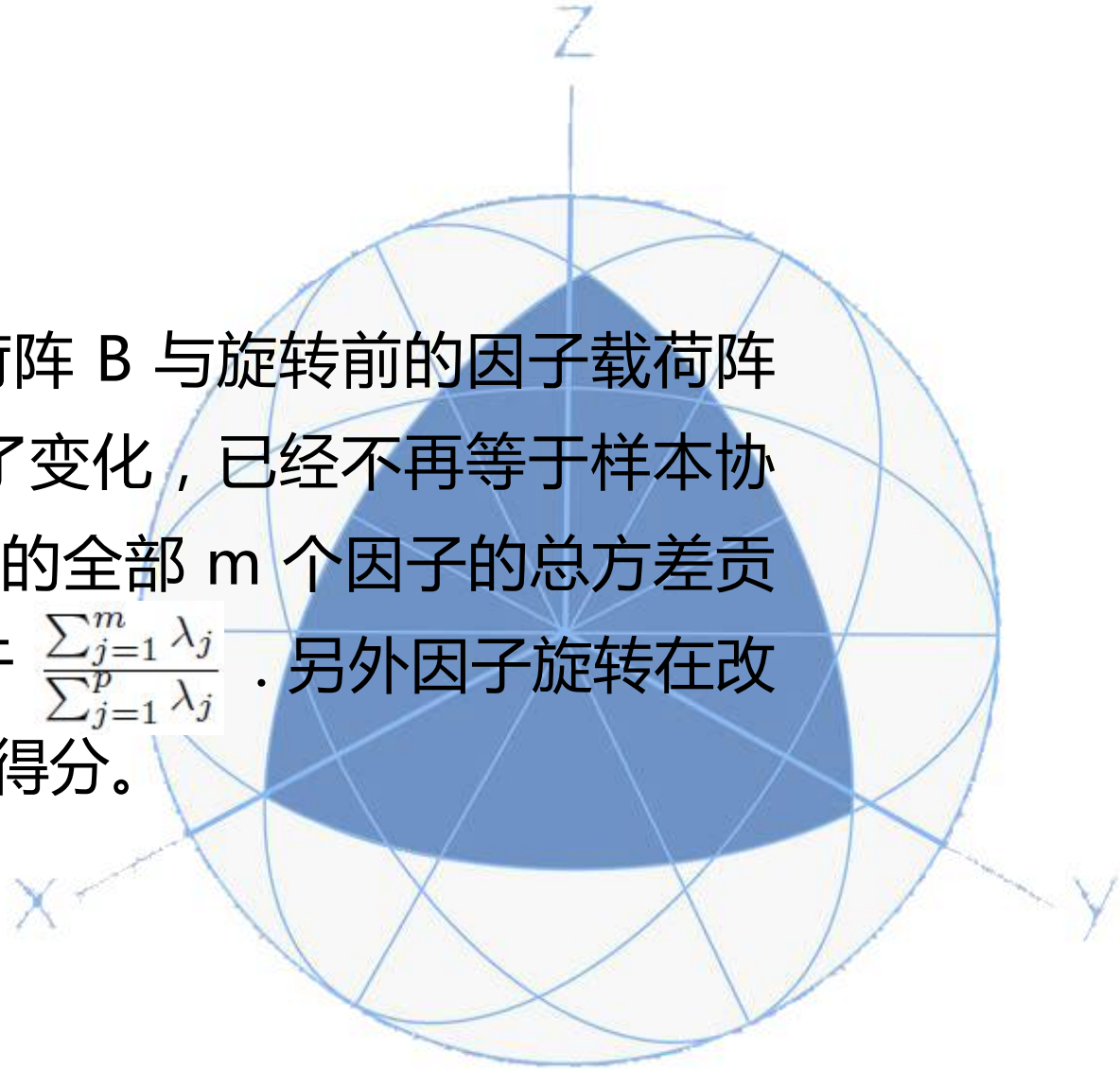
例如，可能多个变量在同一个公共因子上的载荷大小不一，有的趋近 1，有的在 0.5 之间徘徊，有的趋于0，说明该因子对多个变量的影响程度大小不同.

这种因子模型反而很难对因子的实际背景进行合理的解释. 这时需要通过**因子旋转**的方法，使每个因子仅在几个变量上的载荷趋于 1，在其余变量的载荷比较小趋于 0.

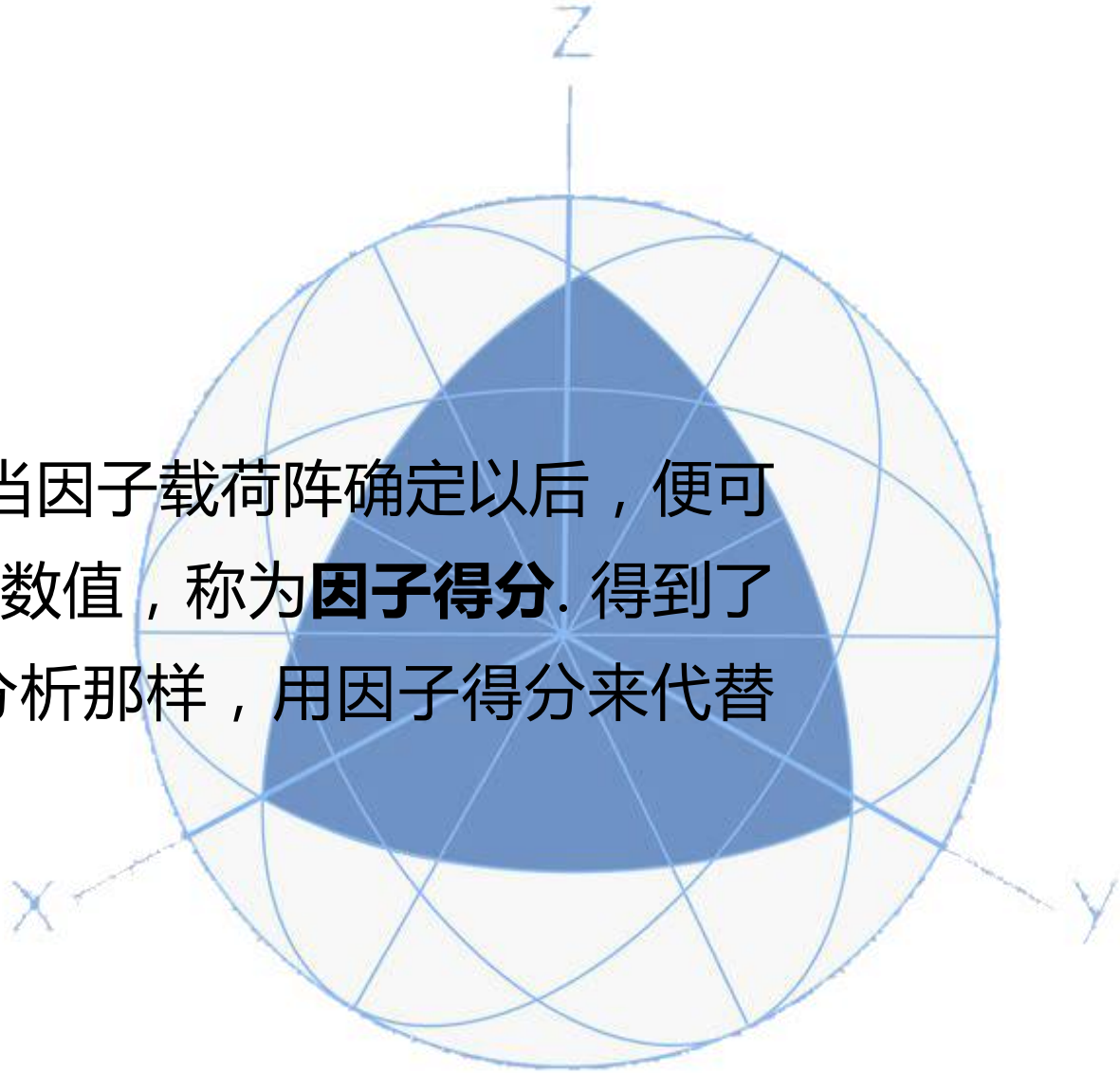
为了达到上述因子的要求引出了因子旋转方法，即正交旋转和斜交旋转两类，这里我们重点介绍**正交旋转**. 对公共因子作正交旋转就是对载荷矩阵 A 作一正交变换，右乘正交矩阵 Γ ，使得旋转后的因子载荷阵 $B = A\Gamma$ 有更鲜明的实际意义.



旋转以后的公共因子向量为$F^* = \Gamma' F$，各个分量$F_1^*, F_2^*, \cdots, F_m^*$也是互不相关的公共因子.正交矩阵 Γ 的选取方法很多，实践中常用的方法是**最大方差旋转法**，其原理是使得旋转后因子载荷阵 B 的每一列元素的方差之和达到最大，从而实现使同一列上的载荷尽可能地向靠近 1 和靠近 0 两极分离的目的.



值得说明的是，旋转后的因子载荷阵 B 与旋转前的因子载荷阵相比，各因子的方差贡献 g_j^2 发生了变化，已经不再等于样本协方差的第 j 大特征根，但提取出来的全部 m 个因子的总方差贡献率 $\frac{\sum_{j=1}^{m} g_j}{\sum_{j=1}^{p} g_j}$ 却不会改变，仍然等于 $\frac{\sum_{j=1}^{m} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j}$ ．另外因子旋转在改变因子载荷阵的同时也改变了因子得分。



六、因子得分

因子得分是因子分析的最终体现. 当因子载荷阵确定以后，便可以计算各因子在每个样本上的具体数值，称为**因子得分**. 得到了因子得分之后，就可以像主成分分析那样，用因子得分来代替原始变量，从而达到降维的效果.

综上我们可以得出因子分析的一般**步骤**：

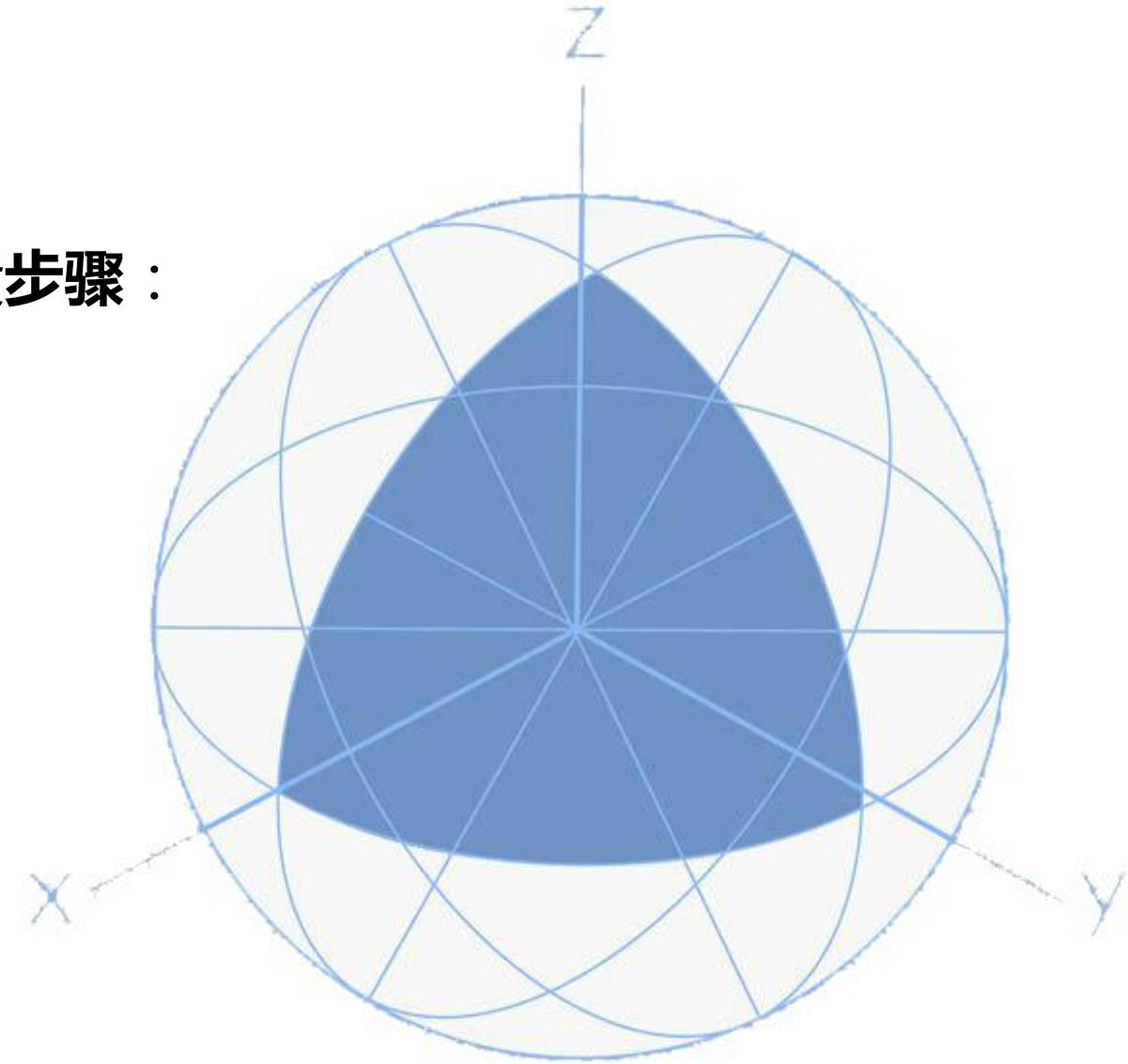
（1）求指标之间的相关阵R；

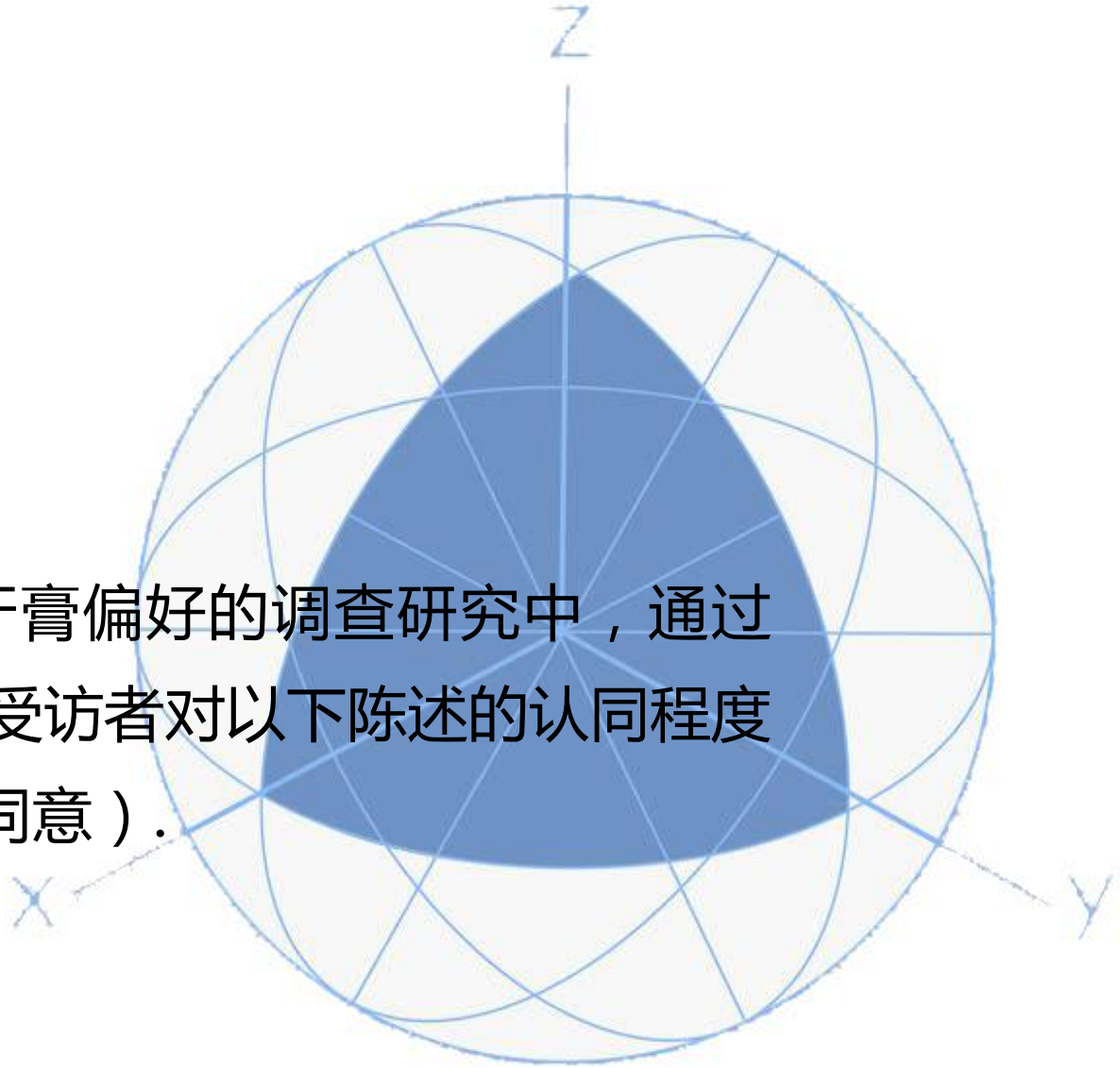
（2）确定因子的个数；

（3）因子旋转；

（4）因子命名；

（5）因子得分。





七、案例分析

案例一、购买牙膏偏好的研究

问题背景：在一项对消费者购买牙膏偏好的调查研究中，通过市场的拦截访问，用 7级量表询问受访者对以下陈述的认同程度（1 表示非常不同意，7 表示非常同意）.

V1：购买预防蛀牙的牙膏是重要的 (预防蛀牙)；

V2：我喜欢使牙齿亮泽的牙膏（牙齿亮泽）；

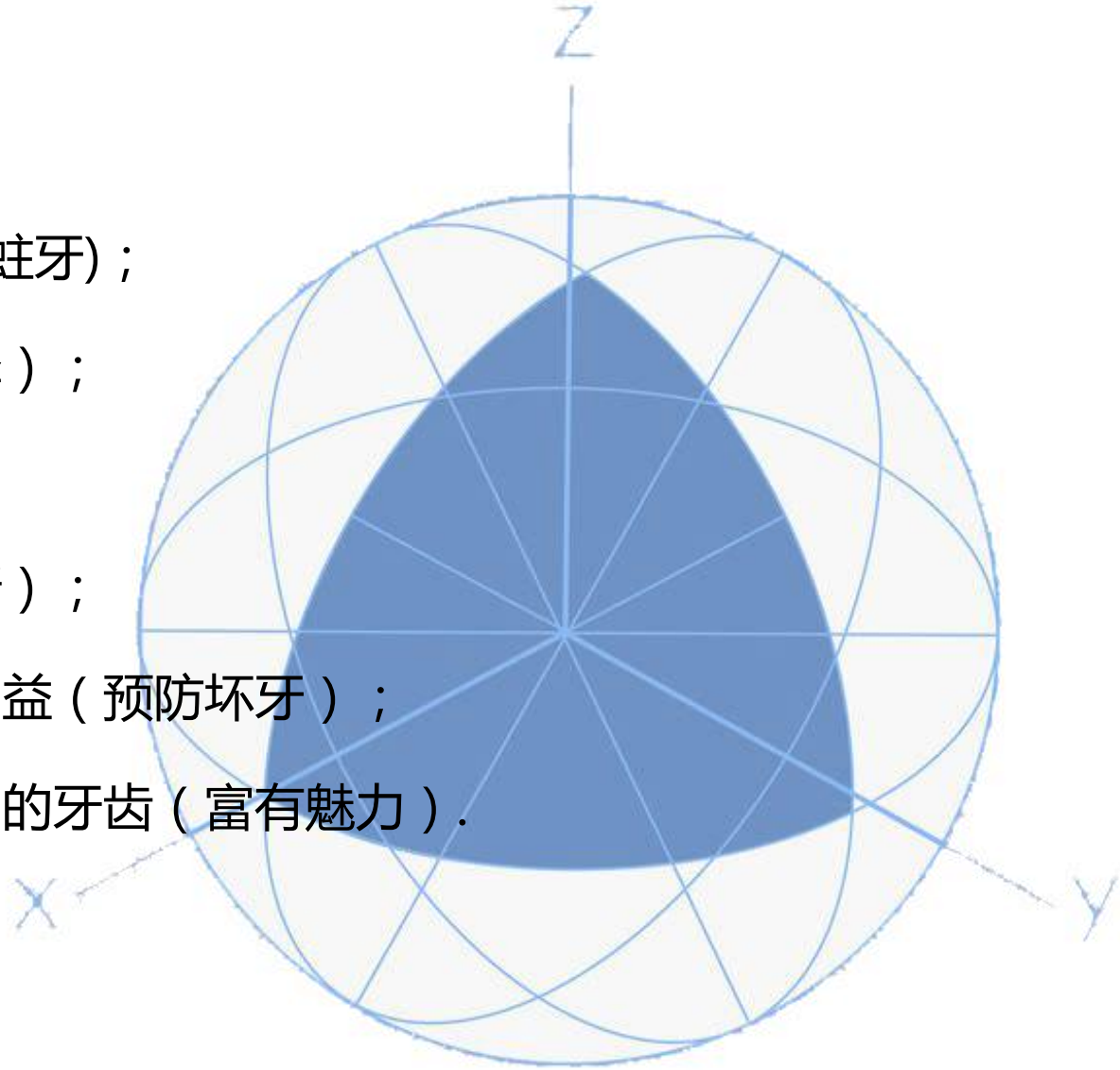
V3：牙膏应当保护牙龈（保护牙龈）；

V4：我喜欢使口气清新的牙膏（口气清新）；

V5：预防坏牙不是牙膏提供的一项重要利益（预防坏牙）；

V6：购买牙膏时最重要的考虑是富有魅力的牙齿（富有魅力）.

调查数据如下：



序号	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	序号	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6
1	7	3	6	4	2	4	16	6	4	6	3	3	4
2	1	3	2	4	5	4	17	5	3	6	3	3	4
3	6	2	7	4	1	3	18	7	3	7	4	1	4
4	4	5	4	6	2	5	19	2	4	3	3	6	3
5	1	2	2	3	6	2	20	3	5	3	6	4	6
6	6	3	6	4	2	4	21	1	3	2	3	5	3
7	5	3	6	3	4	3	22	5	4	5	4	2	4
8	6	4	7	4	1	4	23	2	2	1	5	4	4
9	3	4	2	3	6	3	24	4	6	4	6	4	7
10	2	6	2	6	7	6	25	6	5	4	2	1	4
11	6	4	7	3	2	3	26	3	5	4	6	4	7
12	2	3	1	4	5	4	27	4	4	7	2	2	5
13	7	2	6	4	1	3	28	3	7	2	6	4	3
14	4	6	4	5	3	6	29	4	6	3	7	2	7
15	1	3	2	2	6	4	30	2	3	2	4	7	2

解：用 r 软件进行因子分析：

把 Excel 数据载入 R 软件，存储在“yagao”变量中.

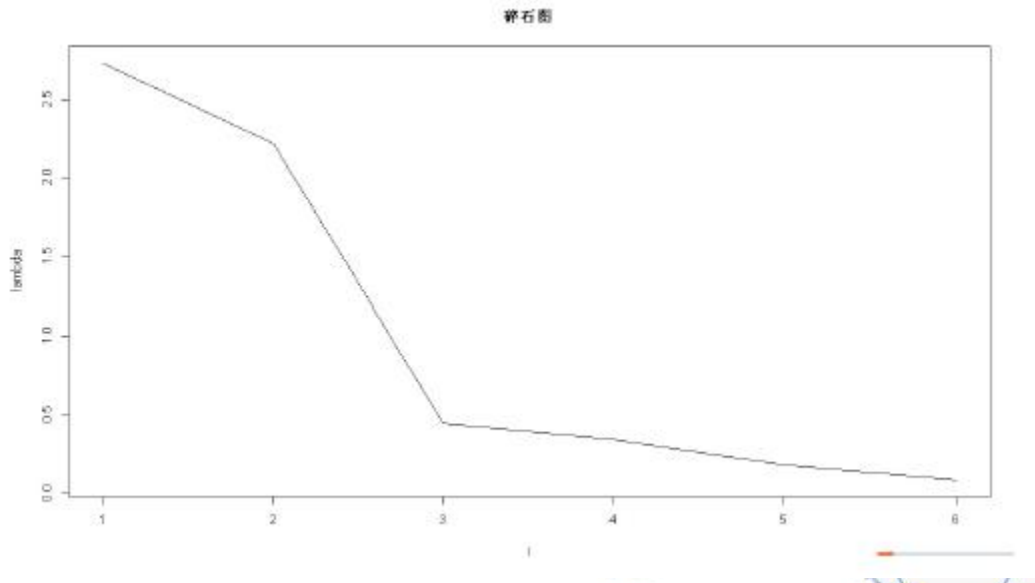
(1)计算相关系数矩阵：

利用 cor()函数计算相关系数矩阵，如下

```
> cory1
             v1          v2          v3          v4          v5          v6
v1  1.000000000 -0.05321785  0.87309020 -0.086162233 -0.857636627  0.004168129
v2 -0.053217850  1.00000000 -0.15502002  0.572212066  0.019745647  0.640464946
v3  0.873090198 -0.15502002  1.00000000 -0.247787899 -0.777848036 -0.018068814
v4 -0.086162233  0.57221207 -0.24778790  1.000000000 -0.006581882  0.640464946
v5 -0.857636627  0.01974565 -0.77784804 -0.006581882  1.000000000 -0.136402944
v6  0.004168129  0.64046495 -0.01806881  0.640464946 -0.136402944  1.000000000
```

(2)提取公因子

做出碎石图，如下：



分析碎石图可以发现，应该提取两个因子.

现在我们确定提取两个因子，接下来便是求解因子载荷阵. R 软件中利用函数

$$fa.(r, nfactors =, n.obs =, rotate =, scores =, fm =)$$

r 是相关系数矩阵或者原始数据矩阵；

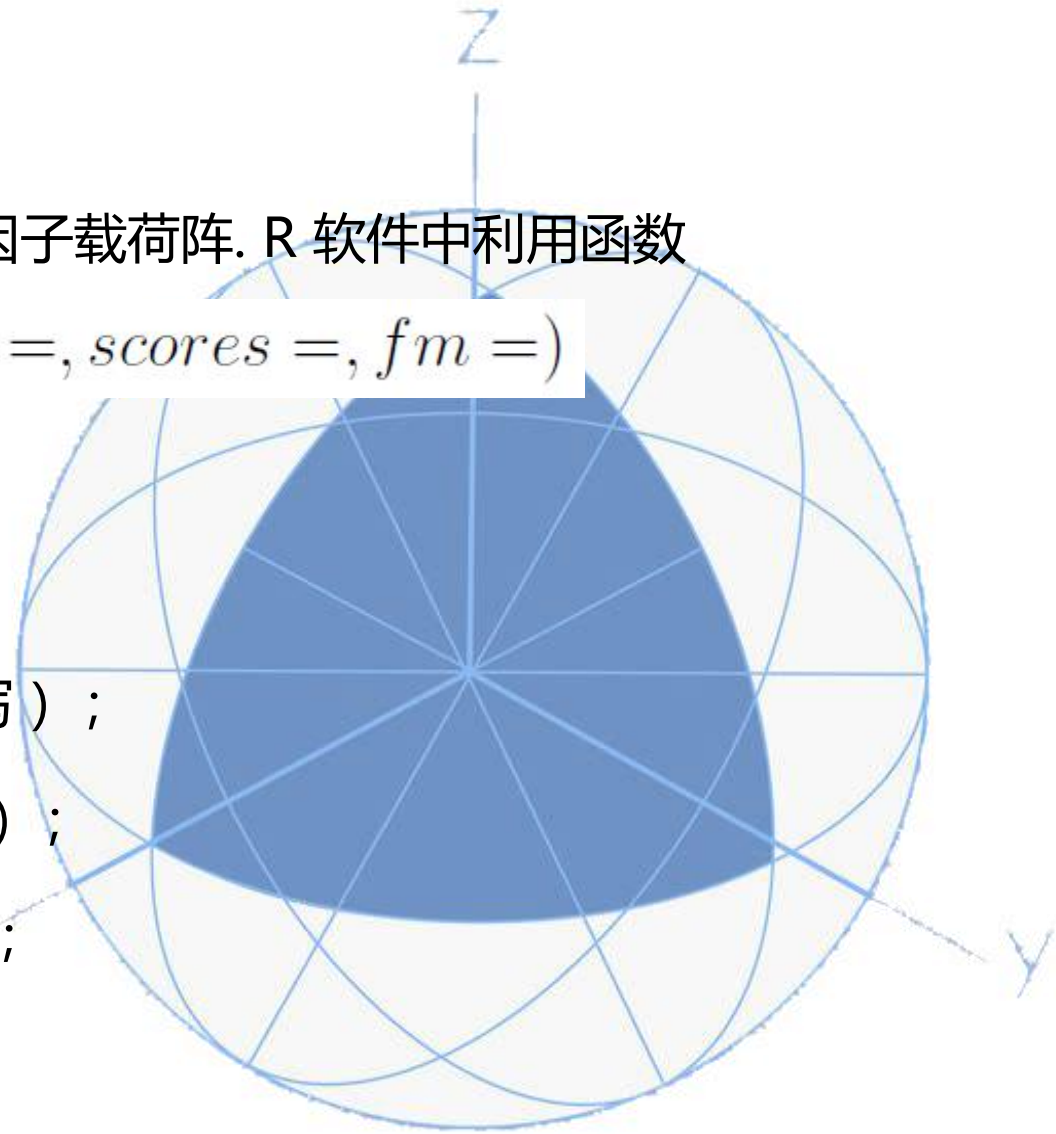
nfactors 设定提取的因子数（默认为 1）；

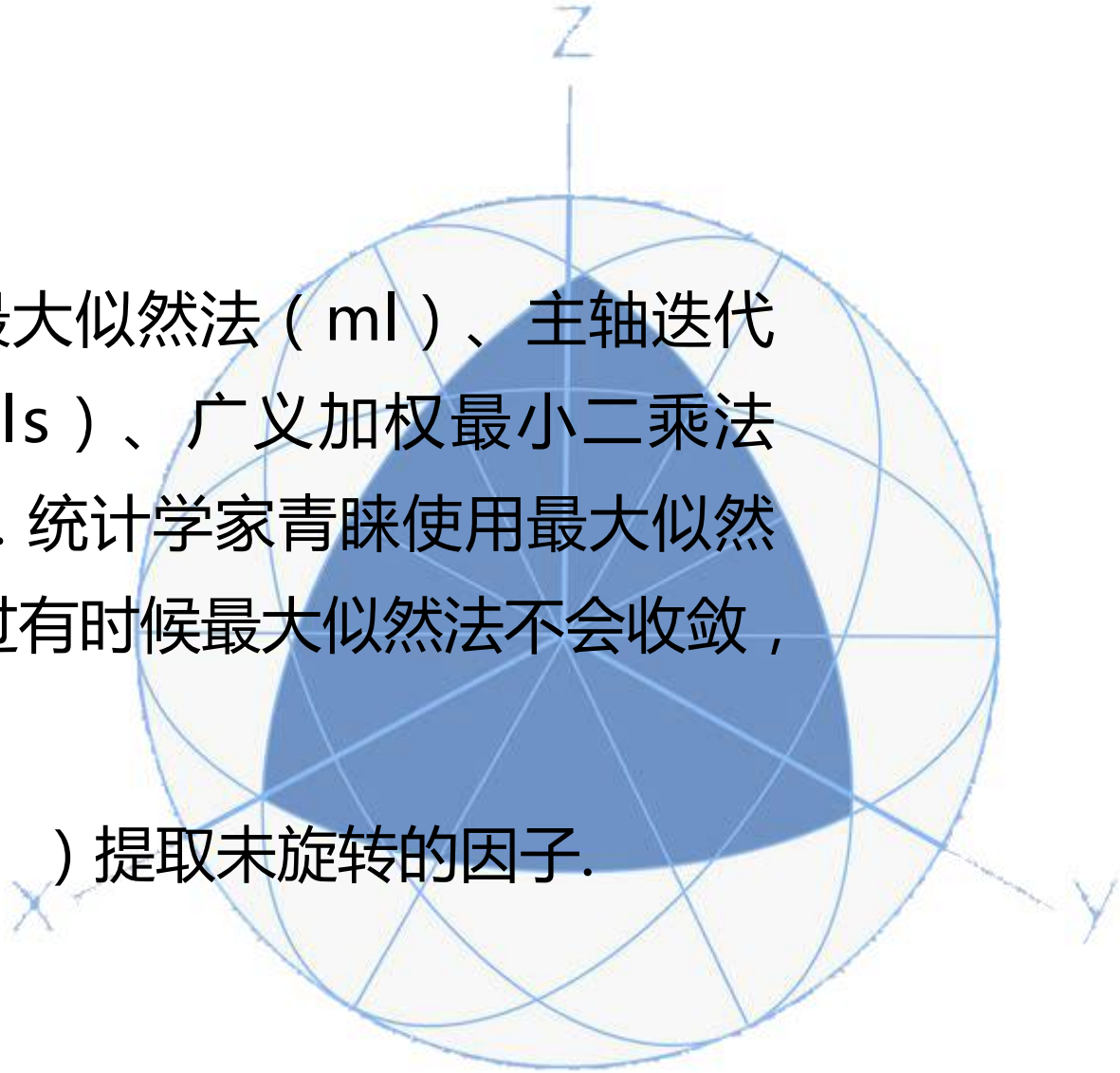
n.obs 是观测数（输入相关系数矩阵时需要填写）；

rotate 设定旋转的方法（默认互变异数最小法）；

scores 设定是否计算因子得分（默认不计算）；

fm 设定因子化方法（默认极小残差法）.



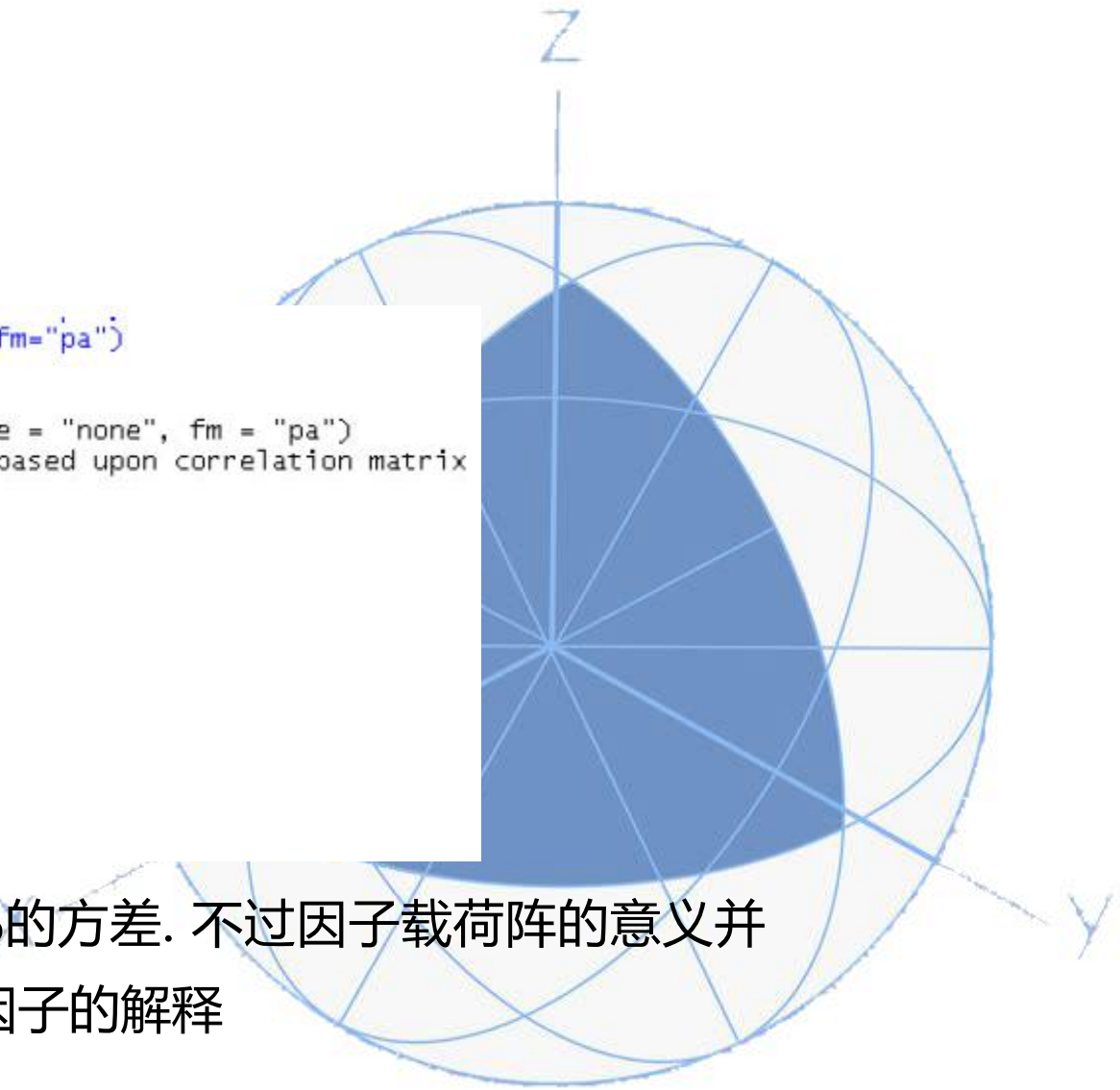


提取公共因子的方法很多，包括最大似然法（ml）、主轴迭代法（pa）、加权最小二乘法（wls）、广义加权最小二乘法（gls）和最小残差法（minres）. 统计学家青睐使用最大似然法，因为它有良好的统计性质. 不过有时候最大似然法不会收敛，此时使用主轴迭代法效果会很好.

本例使用主轴迭代法（fm =“ pa”）提取未旋转的因子.

未旋转的主轴迭代因子法：

```
> fa=fa(cory1,nfactors=2,rotate="none",fm="pa")
> fa
Factor Analysis using method =  pa
Call: fa(r = cory1, nfactors = 2, rotate = "none", fm = "pa")
Standardized loadings (pattern matrix) based upon correlation matrix
     PA1   PA2   h2    u2 com
v1  0.95  0.17 0.93 0.073 1.1
v2 -0.21  0.72 0.56 0.437 1.2
v3  0.91  0.04 0.84 0.163 1.0
v4 -0.25  0.74 0.60 0.398 1.2
v5 -0.85 -0.26 0.79 0.210 1.2
v6 -0.10  0.84 0.72 0.281 1.0

                       PA1  PA2
SS loadings           2.57 1.87
Proportion Var        0.43 0.31
Cumulative Var        0.43 0.74
```



可以看到，两个因子解释了六个问题 74%的方差. 不过因子载荷阵的意义并不太好解释，此时使用因子旋转将有助于因子的解释

(3)因子旋转

用正交旋转中的最大方差法进行因子旋转，得到结果如下

```
> fa.varimax=fa(cory1,nfactors=2,rotate="varimax",fm="pa",score=T)
> fa.varimax
Factor Analysis using method =  pa
Call: fa(r = cory1, nfactors = 2, rotate = "varimax", scores = T, fm = "pa")
Standardized loadings (pattern matrix) based upon correlation matrix
     PA1   PA2   h2    u2 com
v1  0.96 -0.04 0.93 0.073 1.0
v2 -0.05  0.75 0.56 0.437 1.0
v3  0.90 -0.15 0.84 0.163 1.1
v4 -0.09  0.77 0.60 0.398 1.0
v5 -0.89 -0.08 0.79 0.210 1.0
v6  0.08  0.84 0.72 0.281 1.0

                       PA1  PA2
SS loadings           2.54 1.90
Proportion Var        0.42 0.32
Cumulative Var        0.42 0.74
```

从上图中可以看出，经过旋转后的载荷系数已出现明显的两极分化了.

(4)因子命名

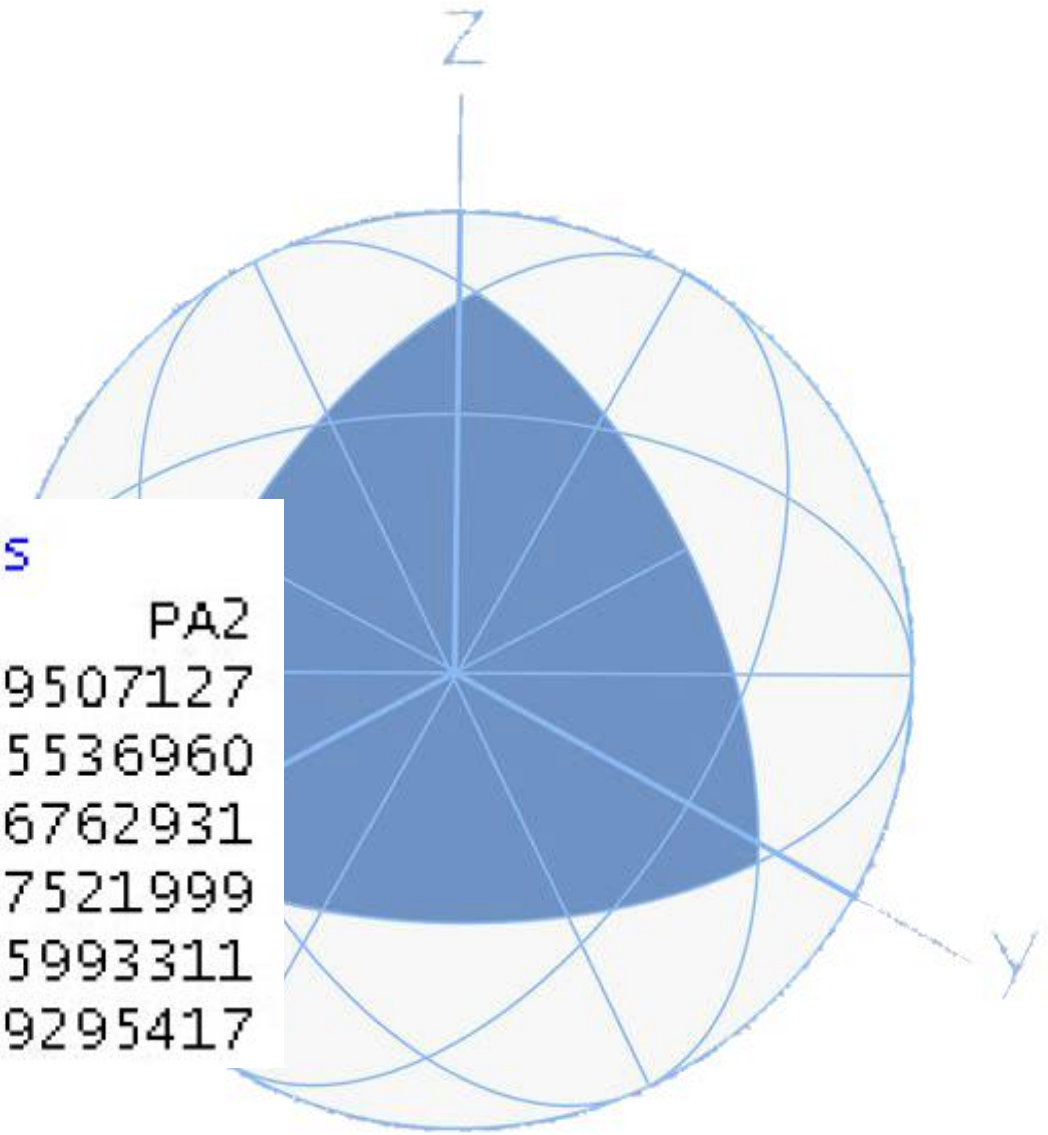
从因子载荷阵可以看出：因子 1 与 V1（预防蛀牙），V3（保护牙龈），V5（预防坏牙）相关性强，其中 V5 的载荷是负数，是由于这个陈述是反向询问的；因子 2 与 V2（牙齿亮泽），V4（口气清新），V6（富有魅力）的相关系数相对较高.

因此，我们命名因子 1 为“护牙因子”，是人们对牙齿的保健态度；命名因子 2 为“美牙因子”，说明人们“‘通过牙膏美化牙齿’影响社交活动”的重视. 从这两方面分析，对牙膏生产企业开发新产品都富有启发意义.

(5)因子得分

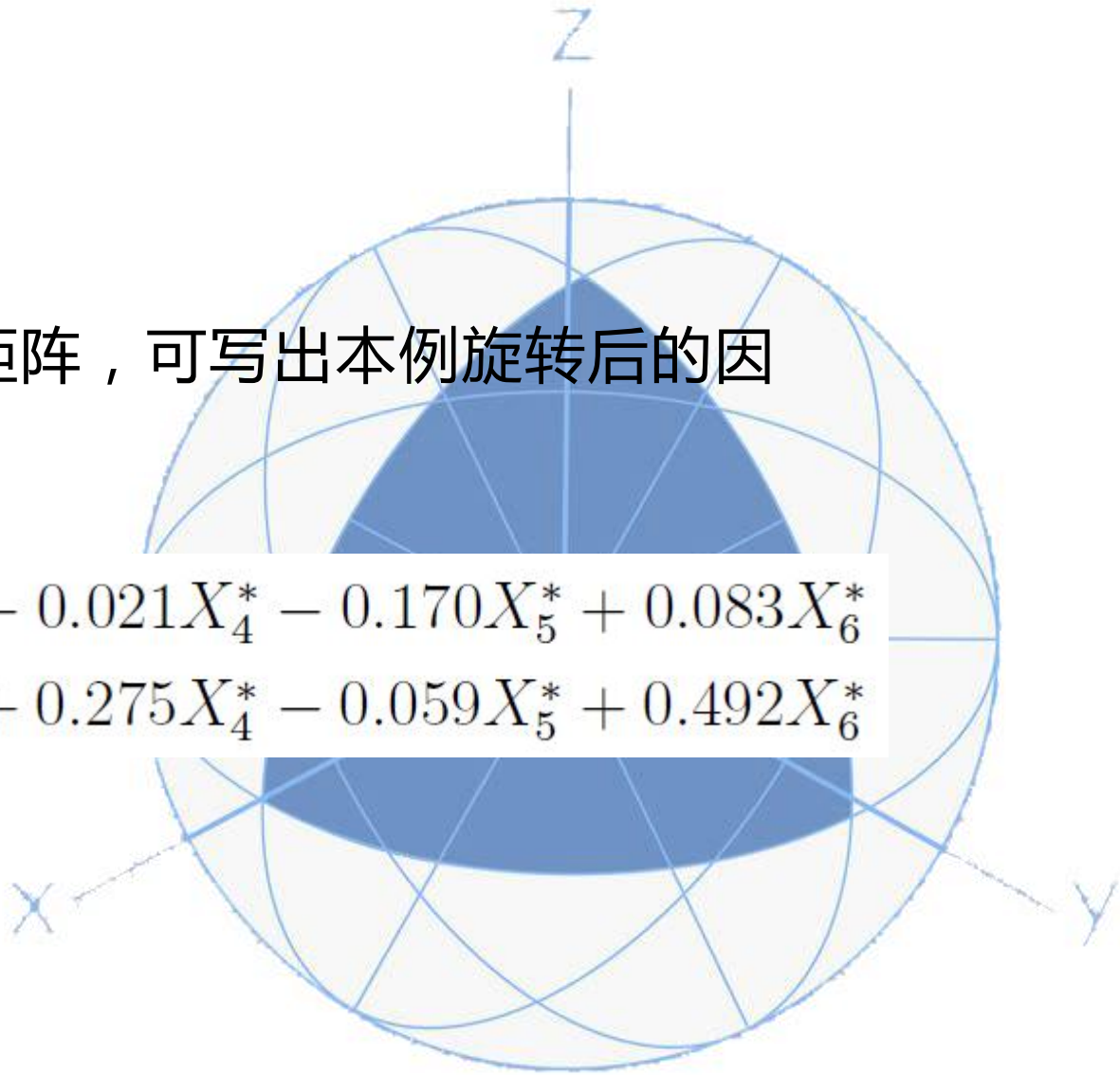
用 R 代码得出因子得分系数矩阵如下：

```
> fa.varimax$weights
          PA1         PA2
v1  0.61839641  0.09507127
v2 -0.02126217  0.25536960
v3  0.22210786 -0.16762931
v4 -0.02057383  0.27521999
v5 -0.17074427 -0.05993311
v6  0.08350008  0.49295417
```



根据上图给出的因子的得分系数矩阵，可写出本例旋转后的因子得分表达式：

$$F_1 = 0.618X_1^* - 0.021X_2^* + 0.222X_3^* - 0.021X_4^* - 0.170X_5^* + 0.083X_6^*$$
$$F_2 = 0.095X_1^* + 0.255X_2^* - 0.167X_3^* + 0.275X_4^* - 0.059X_5^* + 0.492X_6^*$$



对因子 1(护牙因子)进行得分排序，结果如下

```
> nyg1=arrange(nyg,desc(y1))
> head(nyg1)
  num       v1         v2        v3         v4         v5         v6       y1         y2
1  18 1.547630 -0.6553116 1.4098559 -0.0728124 -1.3107286 -0.1197591 1.399974 -0.2570637
2  13 1.547630 -1.3834356 0.9236987 -0.0728124 -1.3107286 -0.8383135 1.307476 -0.7157247
3   1 1.547630 -0.6553116 0.9236987 -0.0728124 -0.7864372 -0.1197591 1.246253 -0.2069920
4   3 1.042968 -1.3834356 1.4098559 -0.0728124 -1.3107286 -0.8383135 1.103374 -0.8451978
5   8 1.042968  0.0728124 1.4098559 -0.0728124 -1.3107286 -0.1197591 1.072411 -0.1191019
6  11 1.042968  0.0728124 1.4098559 -0.8009364 -0.7864372 -0.8383135 1.041650 -0.7051330
```

从结果可以分析得出，调查者 18、13、1、3、8 对牙齿健康比较关注.

厦门大学
XIAMEN UNIVERSITY

THANK YOU