INT104_240316_主成分分析(PCA)

在这之前不可不知的统计学知识

如果我们有一组数据X；其中第i个数据=X_i；数据个数=n；其平均数=X_{mean}；期望值=E[X]；

方差（Variance）

那么该如何表示数据集X的离散程度呢？

离散离散，就是看每个数据对于本组数据的平均值的偏差程度有多大。自然地，对数据X_i，作差(X_i-X_{mean})就可以表示偏差程度的大小，但我们并不关心每个数据是偏大还是偏小（因为在和平均值比），故我们为此式开平方取正$(X_i-X_{mean})^2$。对每个数据进行此操作后求和再平均，我们就得到了方差：一组数据中各数据与平均数的差的平方的平均数。

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - X_{mean})^2}{n}$$

总体方差代表着随机变量对数学期望的偏离程度（*当随机事件中各结果的可能性相等时，期望E[X]退化为平均值X_{mean}）

*X的方差亦可写作D(X)；样本方差写作S^2，此时因无偏估计需n-1

标准差（Standard Deviation）

方差固然好，告诉了我们数据偏离程度的大小，但在实际应用中却有局限。假设我加工3根10cm的木棍，但因加工误差导致成品实际长度为{5,10,15}。我们发现样本方差为25cm^2，但这并没有什么意义，因为方差的量纲总是原数据单位的平方。如何解决？聪明的你一定想到了，开根。这就是标准差，由于与原数据单位相同，它更富有实际意义。

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - X_{mean})^2}{n}}$$

对于正态分布的数据，约68%的数据处于（平均值±σ），约95%的数据处于（平均值±2σ）。

*样本标准差写作S，此时因无偏估计需n-1

计算总体方差：$\sigma^2 = \frac{\sum(X_i - \overline{X})^2}{N}$

总体标准差：$\sigma = \sqrt{\frac{\sum(X_i - \overline{X})^2}{N}}$

计算样本方差：$S^2 = \frac{\sum(X_i - \overline{X})^2}{n-1}$

样本标准差：$S = \sqrt{\frac{\sum(X_i - \overline{X})^2}{n-1}}$

式中X_i是数值序列中的单个数值，$\overline{X}$是这组数值的平均值，N是总体数值的个数，n是样本数值的个数。

协方差（Covariance）

我们已经可以描述清楚单个变量的偏离程度了！但如果要统计两个随机变量(X, Y)间的偏离/变化趋势，该怎么做呢？协方差Cov(X, Y)可用来描述随机变量X与Y间相对期望的偏差的关联程度。当两个变量变化的趋势越一致（X>E[X]时Y>E[Y]反之亦然）则Cov(X, Y)>0，且越相关越大；当两个变量变化的趋势越相反（X>E[X]时Y<E[Y]反之亦然）则Cov(X, Y)<0，且越负相关越小；若协方差为0，代表两组变量线性无关。协方差使我们可以计算两组变量间的线性关系，它们有多么的线性相关。

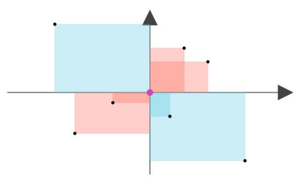
$$Cov(X,Y) = E[(X-E[X])(Y-E[Y])] = E(XY) - E[X]E[Y]$$

$$\text{其中}E(XY) = \begin{cases} \sum_1^n \sum_1^n X_i Y_j P\text{（离散情况）} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} xyf(x,y)\text{（连续情况）} \end{cases}$$

即：

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_1^n (X_i - X_{mean})(Y_i - Y_{mean})}{n}$$

*可以发现，方差就是一种特殊的协方差，只是两个变量均为X，D(X)=Cov(X,X)。



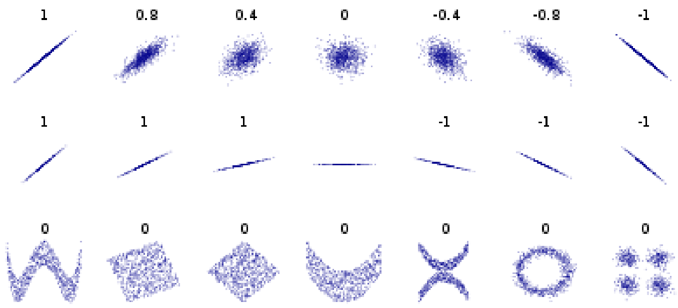
	身高(cm)	体重(kg)	概率
	152	45	0.11
	160	54	0.24
	172	50	0.22
	175	70	0.26
	180	66	0.14
	147.8	77	0.02
	187.8	37	0.01

若**以各样本的重心为原点**，不难发现，处在一三象限的样本（正相关）使协方差变大，二四象限的样本（负相关）使协方差变小。

皮尔森相关系数（Pearson correlation coefficient）

协方差很好，但如同方差一般，他包含原始数据的量纲（原数据单位的平方），取值范围并不确定，并不能方便地比较不同类型数据的相关性大小。如果能归一化，将取值范围约束进[-1,1]就更有可比性了。这里不除以数据个数，而是两个变量的标准差即可。

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sum_1^n (X_i - X_{mean})(Y_i - Y_{mean})}{\sigma_x \sigma_y}$$



*在几何上，相关系数的绝对值等于数据集两条可能的回归线$y=g_x(x)$与$x=g_y(y)$夹角的余弦

在这之前不可不知的线代知识

$$\text{若数据集}D=\begin{bmatrix}X_1 & X_2 & X_3 & X_4\\ Y_1 & Y_2 & Y_3 & Y_4\end{bmatrix}$$

拉伸

对矩阵D，若要将其在X，Y轴方向上拉伸，可构造对角阵S左乘D，对角线上的每个元素就是对应维度的拉伸倍数，很容易扩展到高维。

$$S=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

这里在X方向拉伸为原长的两倍，Y方向不变。

$$SD=\begin{bmatrix}2X_1 & 2X_2 & 2X_3 & 2X_4\\ Y_1 & Y_2 & Y_3 & Y_4\end{bmatrix}$$

旋转

对矩阵D，若要将其对原点处旋转θ角度，可构造旋转矩阵R。（可以试着写出R左乘对基向量的影响）（还有很多其他的方法旋转空间）

$$R=\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}$$

$$RD=\begin{bmatrix}\cos(\theta)X_1-sin(\theta)Y_1 & .. & .. & ..\\ \sin(\theta)X_1+cos(\theta)Y_1 & .. & .. & ..\end{bmatrix}$$

协方差矩阵

可以看到主对角线上分别是两个变量的方差，其余是两个变量的协方差。

$$C=\begin{bmatrix}Cov(x,x) & Cov(x,y)\\ Cov(x,y) & Cov(y,y)\end{bmatrix}$$

$$*\text{对高维情况，}c_{ij}=Cov(F_i,F_j)$$

主成分分析

> 特征向量=新坐标轴方向（若有多个，必正交）
>
> 特征值=对应新坐标轴方向上的方差
>
> 基本步骤：原始数据→数据矩阵→Z-Score（零均值中心化）→每个点与数据集的协方差矩阵（等式）→解方程求得特征向量与对应特征值

1.原始数据

$$\text{假设我们有数据集}F=\begin{bmatrix}2 & 5 & 6 & 8\\ 3 & 5 & 6 & 9\end{bmatrix}$$

$$\text{容易得到}\begin{cases}F_{1mean}=5.25\\ F_{2mean}=5.75\end{cases}\quad\begin{cases}F_{1std}=2.5\\ F_{2std}=2.5\end{cases}(\text{方便计算的假设})$$

2.Z-Score中心化（零均值化）

我们在这一步将坐标原点移动至数据集重心，将平均数归零，简便了协方差的计算

$$X_i'=\frac{X_i-X_{mean}}{X_{std}}$$

$$\begin{aligned}A'&=(\frac{2-5.25}{2.5},\frac{3-5.75}{2.5})=(-1.3,-1.1) &(1)\\ B'&=(-0.1,-0.3) &(2)\\ C'&=(0.3,0.1) &(3)\\ D'&=(1.1,1.3) &(4)\end{aligned}$$

3.协方差矩阵

$$\text{数据集的协方差矩阵}: S = \frac{1}{n}\sum_{1}^{n} X_i \cdot X_i^T$$

我们先求出每组数据的协方差矩阵，仅需自己（列向量）乘以自己的转置

$$A' = \begin{bmatrix} -1.3 \\ -1.1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1.3 & -1.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.69 & 1.43 \\ 1.43 & 1.21 \end{bmatrix} \tag{5}$$

$$B' = \begin{bmatrix} 0.01 & 0.03 \\ 0.03 & 0.09 \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$C' = \begin{bmatrix} 0.09 & 0.03 \\ 0.03 & 0.01 \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$D' = \begin{bmatrix} 1.21 & 1.43 \\ 1.43 & 1.69 \end{bmatrix} \tag{8}$$

然后求出数据集的协方差矩阵S

$$S = \frac{A' + B' + C' + D'}{4} = \begin{bmatrix} 0.75 & 0.73 \\ 0.73 & 0.75 \end{bmatrix}$$

4.求出协方差矩阵的特征值及对应的特征向量

数据集在某方向C_1上投影的方差（我就是特征值！）V_1：

$$V_1 = \frac{1}{n}\sum_{1}^{n}(C_1^T \cdot X_i)^2 \tag{9}$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{1}^{n} C_1^T \cdot X_i \cdot C_1^T \cdot X_i \tag{10}$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{1}^{n} C_1^T \cdot (X_i \cdot X_i^T) \cdot C_1 \tag{11}$$

$$= C_1^T(\frac{1}{n}\sum_{1}^{n} X_i \cdot X_i^T)C_1 \tag{12}$$

$$= C_1^T \cdot S \cdot C_1 = V_1 \tag{13}$$

*注：记最后一行就行

由（13）可得：

$$C_1^T \cdot S \cdot C_1 = V_1 = \lambda\text{（特征值）} \tag{14}$$

$$S \cdot C_1 = \lambda \cdot C_1 \tag{15}$$

$$(S - \lambda I)C_1 = 0 \tag{16}$$

由于方向C1不为零，只可能是括号内部分=0

$$S - \lambda I = \begin{bmatrix} 0.75 - \lambda & 0.73 \\ 0.73 & 0.75 - \lambda \end{bmatrix} = 0 \tag{17}$$

$$\text{即行列式为零}:(0.75 - \lambda)^2 - 0.73^2 = 0 \tag{18}$$

$$\lambda^2 - 1.5\lambda + 0.0296 = 0 \tag{19}$$

$$\text{解得：}\begin{cases} \lambda_1 = 1.48 \\ \lambda_2 = 0.02 \end{cases} \tag{20}$$

我们就求得了特征值，接下来求对应的特征向量

$$\text{由此式}:(S - \lambda I)C_1 = 0 \tag{21}$$

$$\text{特征值}\lambda_1\text{得：}\begin{bmatrix} 0.75 - \lambda_1 & 0.73 \\ 0.73 & 0.75 - \lambda_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \end{bmatrix} = 0 \tag{22}$$

$$\begin{bmatrix} -0.73C_{11} + 0.73C_{12} \\ 0.73C_{11} - 0.73C_{12} \end{bmatrix} = 0 \tag{23}$$

$$\Rightarrow C_{11} = C_{12} \tag{24}$$

$$\text{类似地，特征值}\lambda_2\text{得：}C_{21} = -C_{22} \tag{25}$$

5.归一化特征向量

$$\because C_{11} = C_{12} \tag{26}$$

$$\therefore C_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{27}$$

$$\because |C_1| = \sqrt{2}\text{，我们需要将模长归一} \tag{28}$$

$$\therefore C_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{29}$$

$$\text{类似地，对特征值}\lambda_2\text{：}C_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{30}$$