16 主成分分析进阶

Dive into Principal Component Analysis

区分联系六条基本 PCA 技术路线

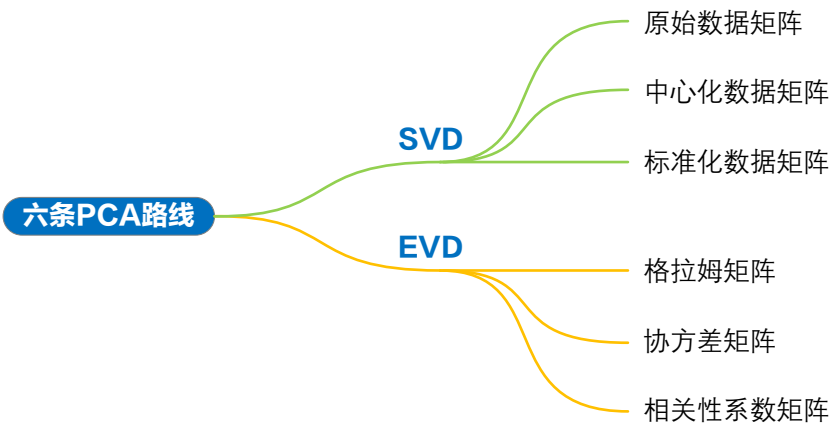
我发现了！

Eureka!

—— 阿基米德 (Archimedes) | 数学家、发明家、物理学家 | 287 ~ 212 BC

- `numpy.cov()` 计算协方差矩阵
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图
- `seaborn.kdeplot()` 绘制 KDE 核概率密度估计曲线
- `seaborn.pairplot()` 绘制成对分析图
- `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

16.1 从“六条技术路线”说起

来自《矩阵力量》的表格

表 1 来自《矩阵力量》第 25 章，本章将讲解表 1 中六条 PCA 技术路线的细节，并比较它们的差异。

表 1. 六条 PCA 技术路线，来自《矩阵分解》第 25 章

对象	方法	结果
原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$	奇异值分解	$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U_X S_X V_X}^{\mathrm{T}}$
格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 本章中用“修正”的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n-1}$	特征值分解	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V_X \Lambda_X V_X}^{\mathrm{T}}$
中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$	奇异值分解	$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{U_c S_c V_c}^{\mathrm{T}}$
协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = \frac{(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))}{n-1}$	特征值分解	$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V_c \Lambda_c V_c}^{\mathrm{T}}$
标准化数据 (z 分数) $\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}} = (\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))\boldsymbol{D}^{-1}$ $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}}$	奇异值分解	$\boldsymbol{Z_X} = \boldsymbol{U_Z S_Z V_Z}^{\mathrm{T}}$
相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{D}^{-1}$ $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}}$	特征值分解	$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V_Z \Lambda_Z V_Z}^{\mathrm{T}}$

比较六个输入矩阵

表 1 中有六个输入矩阵，它们都衍生自原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。如图 1 所示，原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的形状为 $n \times D$。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

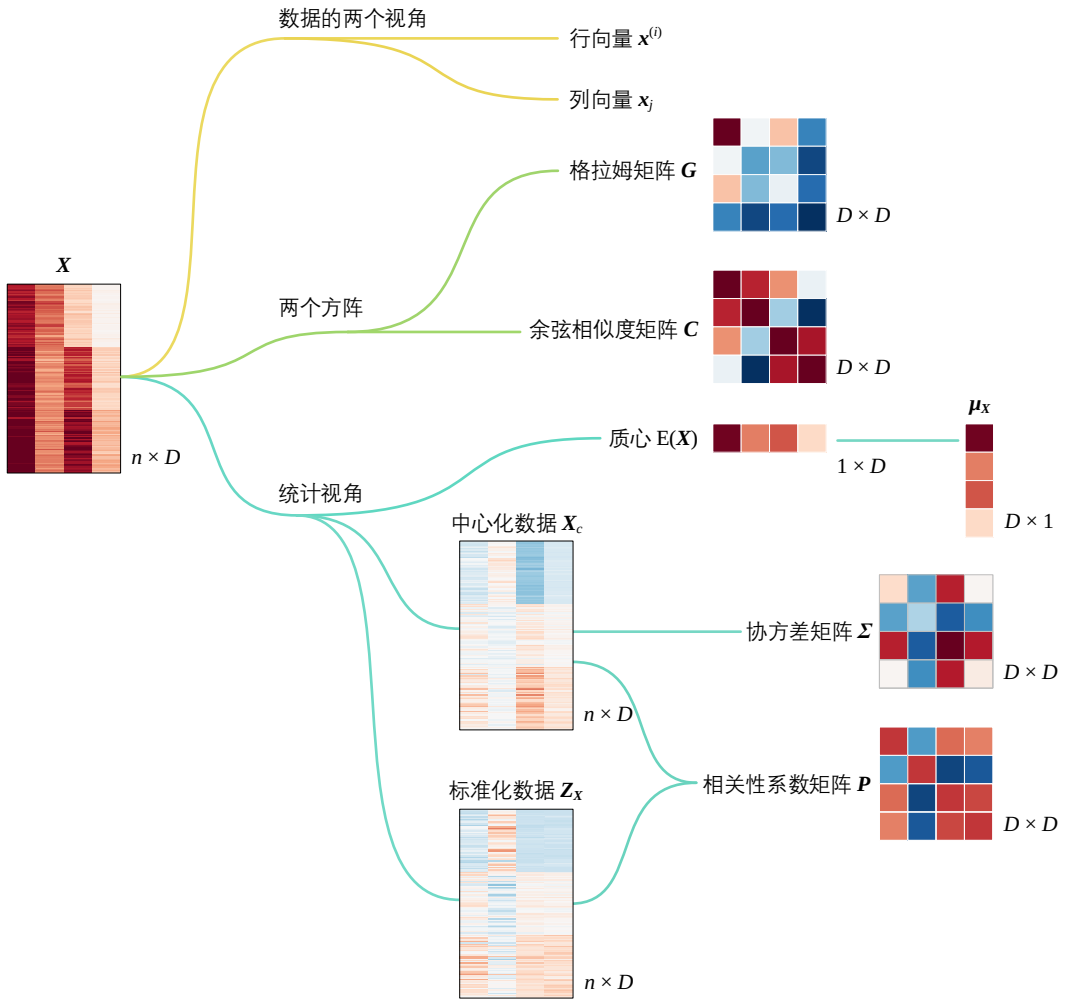


图 1. X 衍生得到的几个矩阵，来自《矩阵力量》

X 的格拉姆矩阵 G 为：

$$G = X^{\mathrm{T}} X \tag{1}$$

格拉姆矩阵 G 形状为 $D \times D$。G 的主对角线元素是 X 的每一列向量 L^2 模的平方。

中心化 (去均值) 矩阵 X_c 为：

$$X_c = X - \mathrm{E}(X) \tag{2}$$

即 X 的每一列分别减去各自的均值得到 X_c。几何角度，X 的质心位于 E(X)，X_c 的质心则位于原点 0。

样本数据矩阵 X 的协方差矩阵 Σ 为：

$$\Sigma = \frac{X_c^{\mathrm{T}} X_c}{n-1} = \frac{\left(X - \mathrm{E}(X)\right)^{\mathrm{T}} \left(X - \mathrm{E}(X)\right)}{n-1} \tag{3}$$

容易发现，协方差相当于特殊的格拉姆矩阵。

请大家特别注意，为了方便和协方差比较，本章中 G 特别定义为：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\boldsymbol{G} = \frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n-1} \tag{4}$$

标准化 (standardization 或 z-score normalization) 数据矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$ 为：

$$\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}} = \left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)\boldsymbol{D}^{-1} \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{D}$ 为：

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}\left(\mathrm{diag}\left(\boldsymbol{\Sigma}\right)\right)^{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_D \end{bmatrix} \tag{6}$$

(5) 中的每一列都是每个特征的 Z 分数。$\boldsymbol{Z_X}$ 的质心也位于原点，不同的是 $\boldsymbol{Z_X}$ 每个特征的标准差都是 1。

线性相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为：

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{D}^{-1} \tag{7}$$

$\boldsymbol{P}$ 实际上是 $\boldsymbol{Z_X}$ 的协方差，即：

$$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}}{n-1} \tag{8}$$

比较 SVD 和 EVD

主成分分析的核心数学工具为**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD) 和**特征值分解** (Eigen Decomposition, EVD)。

《矩阵力量》强调过 SVD 和 EVD 在主成分分析中具有等价性，这也就是为什么表 1 看上去是六种技术路线，实际上可以归纳为三大类技术路线。下面简单说明一下。

对原始矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行经济型 SVD 分解：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{X}}{}^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

其中，$\boldsymbol{S_X}$ 为对角方阵。

将 (9) 代入 (1)：

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}{}^{2}\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{X}}{}^{\mathrm{T}} \tag{10}$$

上式便是格拉姆 $\boldsymbol{G}$ 的特征值分解。

对中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 经济型 SVD 分解：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{U}_c\boldsymbol{S}_c\boldsymbol{V}_c{}^{\mathrm{T}} \tag{11}$$

而协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 则可以写成：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c \frac{\boldsymbol{S}_c^2}{n-1} \boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

相信大家在上式中能够看到协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值分解。请大家注意 (11) 中奇异值和 (12) 中特征值关系：

$$\lambda_{c\_j} = \frac{s_{c\_j}^2}{n-1} \tag{13}$$

同样，对标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$ 进行经济型 SVD 分解：

$$\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{U}_{\boldsymbol{Z}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{Z}} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{Z}}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$

相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 则可以写成：

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{Z}} \frac{\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{Z}}^2}{n-1} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{Z}}^{\mathrm{T}} \tag{15}$$

上式相当于对 $\boldsymbol{P}$ 特征值分解。

本章下面将分别讲解特征值分解 1) 协方差矩阵、2）格拉姆矩阵、3) 相关性系数矩阵，来完成主成分分析。并利用诸如热图、饼图、直方图、陡坡图、双标图、椭圆等可视化工具分析三种路线。本章以下三节将采用完全相似的结构，方便大家比较三大类不同 PCA 技术路线的异同。

16.2 协方差矩阵

本节讲解利用特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 完成主成分分析。

特征值分解

图 2 所示为特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。$\boldsymbol{\Sigma}$ 的对角线元素为方差，其他元素为协方差。$\boldsymbol{\Sigma}$ 的迹代表方差之和：

$$\mathrm{trace}\left(\boldsymbol{\Sigma}\right) = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_D^2 = \sum_{j=1}^{D} \sigma_j^2 \tag{16}$$

图 2 中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为对称矩阵，因此对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值分解实际上是谱分解。

$\boldsymbol{\Lambda}_c$ 为对角矩阵，对角线元素为特征值，特征值从大到小排列。$\boldsymbol{X}_c$ 投影到规范正交基 $\boldsymbol{V}_c$ 中得到 $\boldsymbol{Y}_c$，即 $\boldsymbol{Y}_c = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{V}_c$。$\boldsymbol{\Lambda}_c$ 主对角线上的特征值实际上是 $\boldsymbol{Y}_c$ 的方差，也就是说 $\boldsymbol{\Lambda}_c$ 是 $\boldsymbol{Y}_c$ 的协方差矩阵。因此，在主成分分析中，特征值也叫主成分方差。

$\boldsymbol{Y}_c$ 的方差 (即 $\boldsymbol{\Lambda}_c$ 中特征值) 之和为：

$$\mathrm{trace}\left(\boldsymbol{\Lambda}_c\right) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots \lambda_D = \sum_{j=1}^{D} \lambda_j \tag{17}$$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

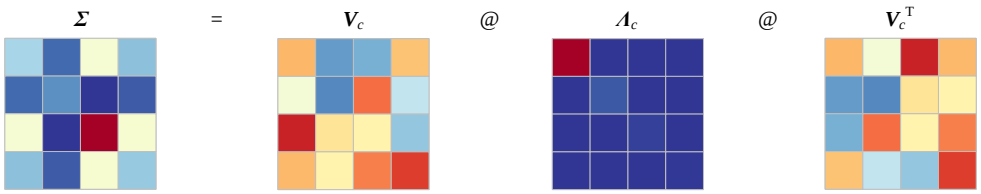


图 2. 特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

图 3 对比协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}_c$。

下面，我们进一步分析这两个矩阵。

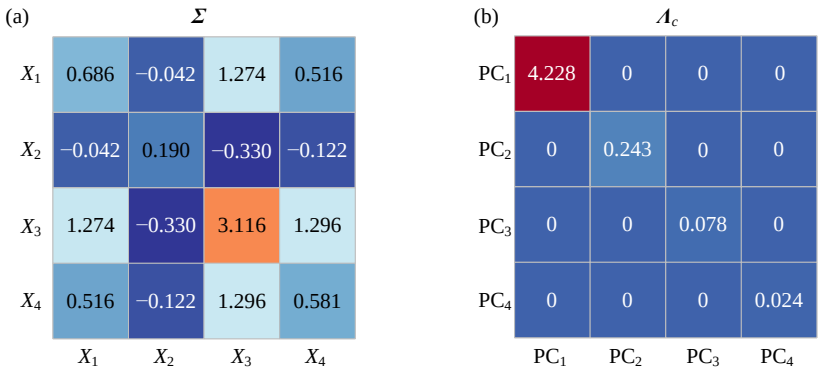


图 3. 对比协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}_c$ 热图

分解前后

大家在本书第 12 章已经见过图 4 和图 5。

如图 4 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中第三列 (即 X_3) 的方差最大，X_3 对方差和 trace($\boldsymbol{\Sigma}$) 贡献超过 68%。

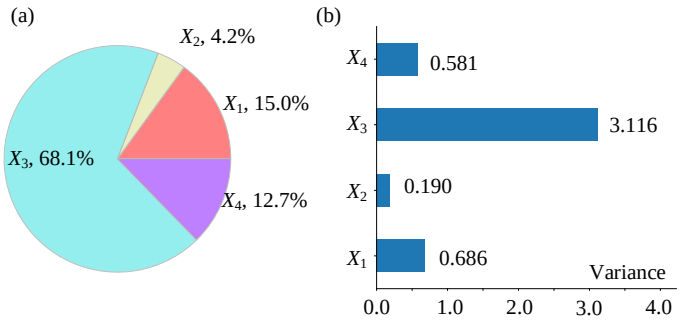


图 4. 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的主对角线成分，即方差

我们在《矩阵力量》第 13 章提过，特征值分解前后矩阵的迹不变，也就是说协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的迹 trace($\boldsymbol{\Sigma}$) 等于的特征值方阵 $\boldsymbol{\Lambda}_c$ 迹 trace($\boldsymbol{\Lambda}_c$)：

$$\operatorname{trace}(\boldsymbol{\Sigma}) = \operatorname{trace}(\boldsymbol{\Lambda}_c) \tag{18}$$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

即：

$$\sum_{j=1}^{D}\sigma_j^2=\sum_{j=1}^{D}\lambda_j \tag{19}$$

也就是说，PCA 不改变数据各个特征方差总和。

而第 j 个特征值 λ_j 对 trace($\boldsymbol{\Lambda}_c$) 的贡献百分比为：

$$\frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^{D}\lambda_i}\times 100\% \tag{20}$$

如图 5 所示，第一主成分的贡献超过 92%，解释了数据中大部分“方差”。数据分析中，如果原始数据特征很多，彼此之间又具有复杂的相关性，那么我们就可以考虑利用主成分分析对数据进行“降维”，减少特征的数量。而这个过程又保留了原始数据主要的信息。

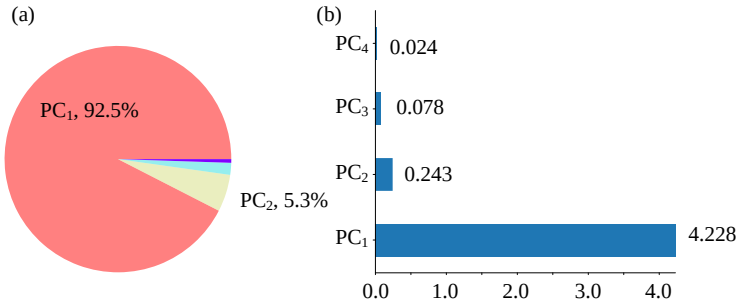


图 5. $\boldsymbol{\Lambda}_c$ 的主对角线成分，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值

陡坡图

上一章介绍过我们经常用陡坡图可视化前 p 个主成分解释总方差的百分比，即累积贡献率：

$$\frac{\sum_{j=1}^{p}\lambda_j}{\sum_{i=1}^{D}\lambda_i}\times 100\% \tag{21}$$

图 6 所示为特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 获得的陡坡图。观察陡坡图，可以帮助我们确定选取多少个主成分。

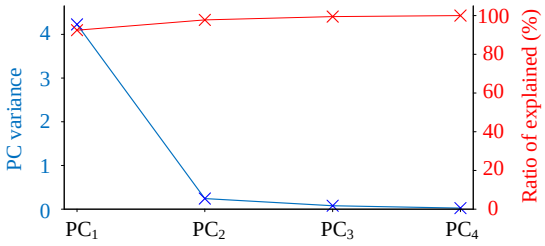


图 6. 陡坡图，特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

特征向量矩阵

图 7 所示为特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}_c$ 热图。$\boldsymbol{V}_c$ 的每一列便代表一个主成分的方向，即 $\boldsymbol{V}_c=[\boldsymbol{v}_{c\_1},\boldsymbol{v}_{c\_2},\boldsymbol{v}_{c\_3},\boldsymbol{v}_{c\_4}]$ 从左到右分别是第一、二、三、四主成分。这些主成分方向两两正交。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

在主成分分析中，$\boldsymbol{V}_c$ 叫主成分系数，也称为载荷 (loading)。注意，有一些参考文献中，载荷还要乘上特征值的平方根，即 $\boldsymbol{v}_j\sqrt{\lambda_j}$ 。

$\boldsymbol{V}_c$ 也可以通过经济型 SVD 分解中心化矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 得到。

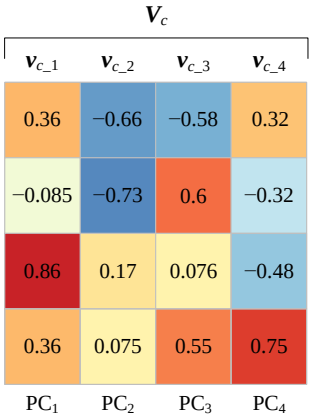


图 7. 特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}_c$ 热图

投影

由于 $\boldsymbol{V}_c$ 为正交矩阵，满足 $\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_c = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$，因此 $\boldsymbol{V}_c$ 本身也是规范正交基。如图 8 所示，将中心化矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 投影到 $\boldsymbol{V}_c$ 这个规范正交基中得到数据矩阵 $\boldsymbol{Y}_c$，即 $\boldsymbol{Y}_c = \boldsymbol{X}_c\boldsymbol{V}_c$。通过图 8 中的 $\boldsymbol{Y}_c$ 每一列的色差，我们就可以看出来不同的次序主成分对数据总体方差的解释力度。

《矩阵力量》第 18 章介绍过 SVD 分解的优化视角。

利用 L^2 范数，$\boldsymbol{V}_c$ 的第一列列向量实际上是如下优化问题的解：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_{c\_1} &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \ \left\|\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}\right\| \\ &\text{subject to: } \left\|\boldsymbol{v}\right\| = 1 \end{aligned} \tag{22}$$

前文提过，$\boldsymbol{\Lambda_X}$ 本身是 $\boldsymbol{Y}_c$ 的协方差矩阵。$\boldsymbol{\Lambda_X}$ 为对角方阵，因此 $\boldsymbol{Y}_c$ 的任意两列之间线性相关系数为 0。也就是说，$\boldsymbol{V}_c$ 完成了 $\boldsymbol{X}_c$ 的正交化，注意不是原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的正交化。

请大家思考 $\boldsymbol{Y}_c$ 的每一列的均值是多少？$\boldsymbol{Y}_c$ 的质心位置是什么？为什么？

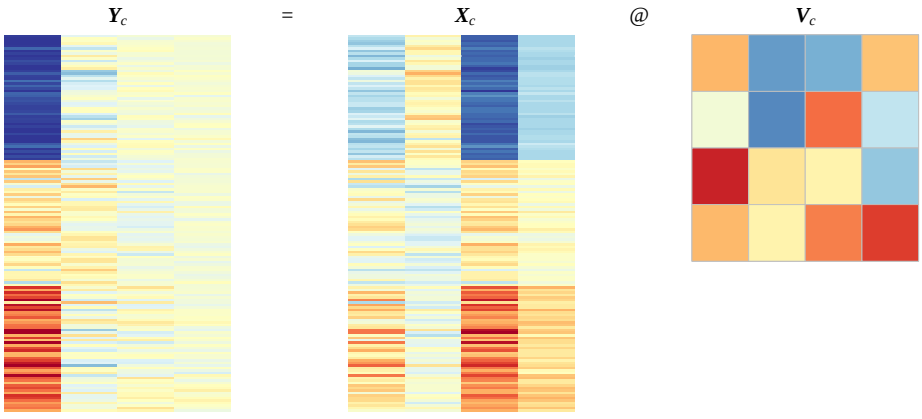


图 8. 将中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 投影到 $\boldsymbol{V}_c$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

双标图

如图 9 所示，双标图是可视化特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}_c$ 的重要方法。

以图 9 中蓝色背景的双标图为例，中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 投影到第一、二主成分平面内的结果如四个箭头所示。比如，X_1、X_2、X_3、X_4 在 PC1 上贡献的分量分别为 0.36、−0.085、0.86、0.36，这正是如图 7 所示的 $\boldsymbol{V}_c$ 第一列 $\boldsymbol{v}_{c\_1}$。

我们还可以把投影数据的散点图也画在双标图上，大家已经在上一章看到很多例子，本章不再重复。

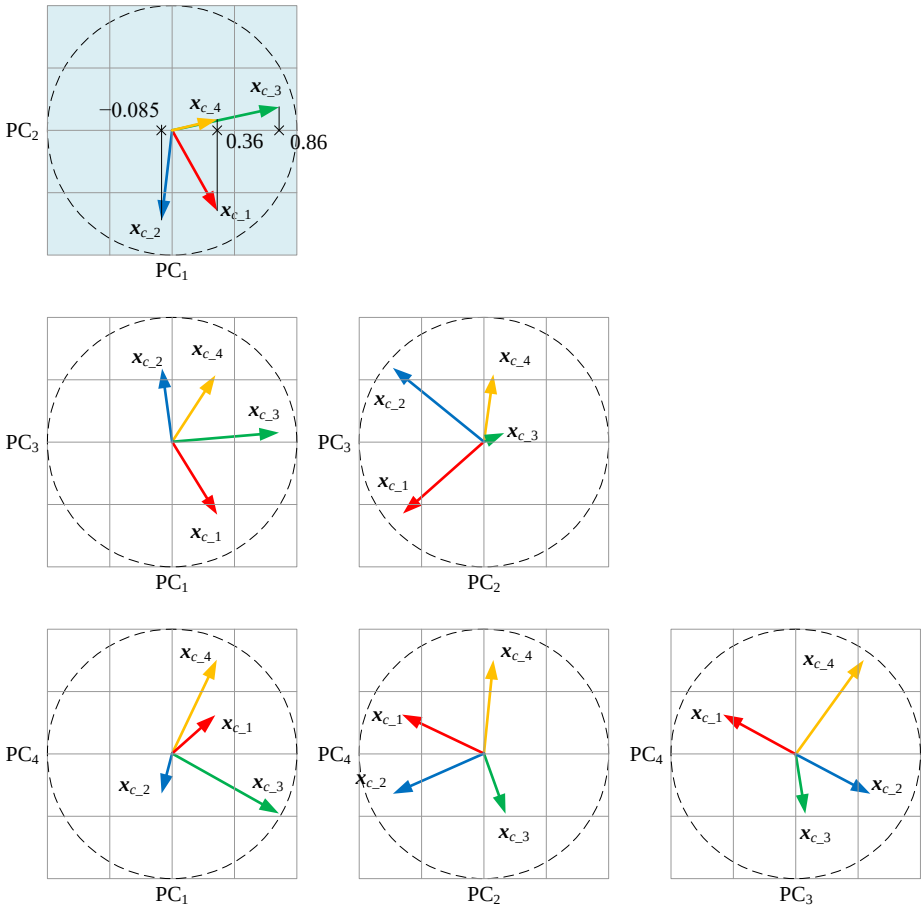


图 9. $\boldsymbol{V}_c$ 双标图，特征值分解协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

数据还原、误差

将 (11) 展开写成：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\boldsymbol{X}_c = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_{c\_1} & \boldsymbol{u}_{c\_2} & \cdots & \boldsymbol{u}_{c\_D} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} s_{c\_1} & & & \\ & s_{c\_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_{c\_D} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_{c\_2}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_{c\_D}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}} \tag{23}$$

$$= s_{c\_1}\boldsymbol{u}_{c\_1}\boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} + s_{c\_2}\boldsymbol{u}_{c\_2}\boldsymbol{v}_{c\_2}^{\mathrm{T}} + \cdots + s_{c\_D}\boldsymbol{u}_{c\_D}\boldsymbol{v}_{c\_D}^{\mathrm{T}} = \sum_{j=1}^{D} s_{c\_j}\boldsymbol{u}_{c\_j}\boldsymbol{v}_{c\_j}^{\mathrm{T}}$$

图 10 所示为用第一主成分逼近估计 $\boldsymbol{X}_c$，即：

$$\hat{\boldsymbol{X}}_c = \underbrace{s_{c\_1}\boldsymbol{u}_{c\_1}\boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}}}_{\text{First principal}} \tag{24}$$

图中可以看到，$\hat{\boldsymbol{X}}_c$ 和 $\boldsymbol{X}_c$ 非常相似；虽然 $\hat{\boldsymbol{X}}_c$ 是个 150 × 4 矩阵，$\hat{\boldsymbol{X}}_c$ 的秩还是 1。请大家回顾如何用张量积计算 $\hat{\boldsymbol{X}}_c$。图 10 中的 $\boldsymbol{E}$ 为误差，即 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{X}_c - \hat{\boldsymbol{X}}_c$。

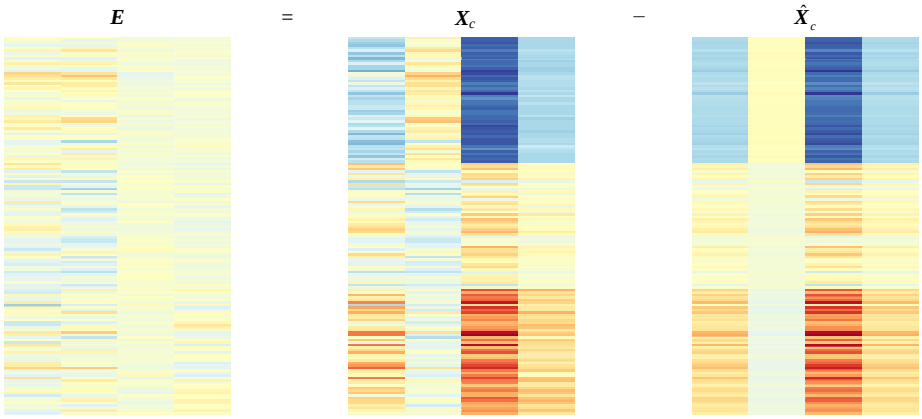


图 10. 第一主成分估计 $\boldsymbol{X}_c$

要想还原原始数据 $\boldsymbol{X}$，我们还需要考虑 (2) 这个等式关系，即：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_c + \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) = \sum_{j=1}^{D} s_{c\_j}\boldsymbol{u}_{c\_j}\boldsymbol{v}_{c\_j}^{\mathrm{T}} + \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{25}$$

如果利用第一主成分估计原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的话，可以利用：

$$\boldsymbol{X} \approx s_{c\_1}\boldsymbol{u}_{c\_1}\boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} + \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{26}$$

上式中，$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量，计算用到了广播原则。

大家可能会问，图 2 中特征值分解仅仅获得了 $\boldsymbol{V}_c$，没有 $\boldsymbol{U}_c$。难道我们还需要再对 $\boldsymbol{X}_c$ 做 SVD 分解？答案是不需要。

《矩阵力量》第 10 章介绍过“二次投影”，也就是说 $\boldsymbol{X}_c$ 可以写成：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X}_c\boldsymbol{I} = \boldsymbol{X}_c\boldsymbol{V}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}} \tag{27}$$

将 $\boldsymbol{V}_c$ 展开，上式可以写成：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X}_c \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{c\_1} & \boldsymbol{v}_{c\_2} & \cdots & \boldsymbol{v}_{c\_D} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_{c\_2}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_{c\_D}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_1} \boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_2} \boldsymbol{v}_{c\_2}^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_D} \boldsymbol{v}_{c\_D}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}_c \sum_{j=1}^{D} \boldsymbol{v}_{c\_j} \boldsymbol{v}_{c\_j}^{\mathrm{T}} \tag{28}$$

所以，(24) 可以写成：

$$\hat{\boldsymbol{X}}_c = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_1} \boldsymbol{v}_{c\_1}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_1} \otimes \boldsymbol{v}_{c\_1} \tag{29}$$

(26) 则可以写成：

$$\boldsymbol{X} \approx \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_1} \otimes \boldsymbol{v}_{c\_1} + \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{30}$$

如果用第一、二主成分还原 $\boldsymbol{X}$，上式需要再加一项：

$$\boldsymbol{X} \approx \underbrace{\boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_1} \otimes \boldsymbol{v}_{c\_1}}_{\text{First principal}} + \underbrace{\boldsymbol{X}_c \boldsymbol{v}_{c\_2} \otimes \boldsymbol{v}_{c\_2}}_{\text{Second principal}} + \underbrace{\mathrm{E}(\boldsymbol{X})}_{\text{Centroid}} \tag{31}$$

鸢尾花书在不同位置反复强调数据单位，也就是量纲。如果原始数据的每列数据的量纲不一致，比如高度、质量、时间、温度、密度、百分比、股价、收益率、GDP 等等。利用特征值分解协方差矩阵完成 PCA 就会有麻烦，因为大家通过图 9 可以看到每一个主成分是若干特征的“线性融合”。哪怕每一列数据的量纲一致，比如鸢尾花前四列的单位都是厘米 cm，这种 PCA 技术路线还会受到不同特征方差大小影响。解决这些问题的方法是特征值分解线性相关系数矩阵，这是本章后文要讨论的话题。

椭圆：投影之前

如图 11 所示，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 椭球 (马氏距离为 1) 在六个平面上的投影。

通过旋转椭圆的形状、位置、旋转角度，我们可以读出标准差、相关性系数等重要信息。

图 12 比较数据 $\boldsymbol{X}$ 的分类和合并协方差矩阵对应的椭圆。

对椭圆、合并方差这些概念感到陌生的话，请回顾《统计至简》第 13 章。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

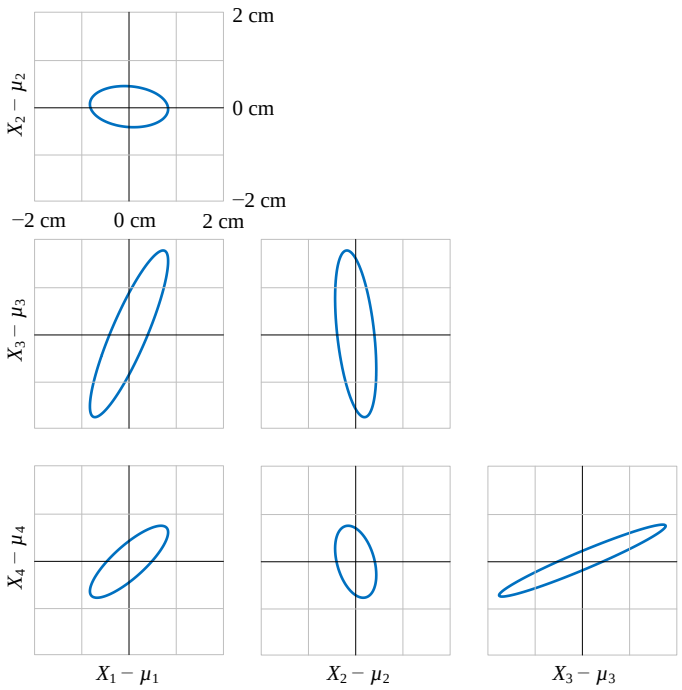


图 11. 马氏距离 1 椭圆，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

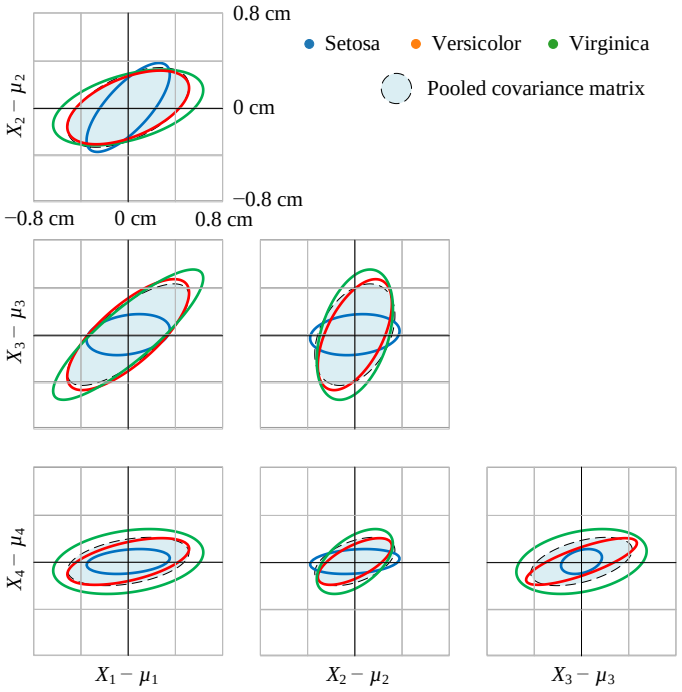


图 12. 马氏距离 1 椭圆，数据 $\boldsymbol{X}$ 的分类、合并协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

椭圆：投影之后

将中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 投影到 $\boldsymbol{V}_c$ 得到的结果为 $\boldsymbol{Y}_c$：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\boldsymbol{Y}_c = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{V}_c \tag{32}$$

$\boldsymbol{Y}_c$的协方差矩阵就是 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵的特征值矩阵。

图 13 所示为 $\boldsymbol{Y}_c$的协方差矩阵在六个平面上的投影，这些椭圆都是正椭圆。$\boldsymbol{Y}_c$的协方差矩阵实际上就是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值矩阵。

图 14 比较数据 $\boldsymbol{Y}_c$的分类和合并协方差矩阵对应的椭圆。

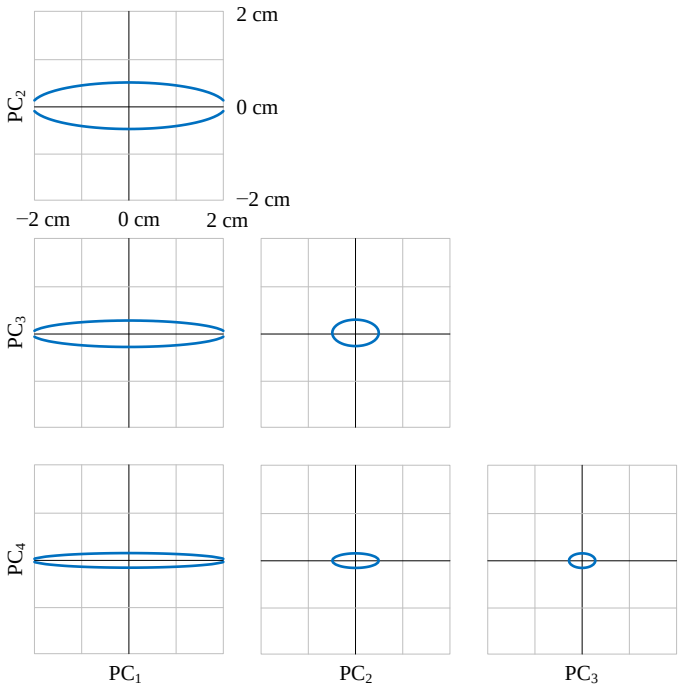


图 13. 马氏距离 1 椭圆，$\boldsymbol{Y}_c$的协方差矩阵

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

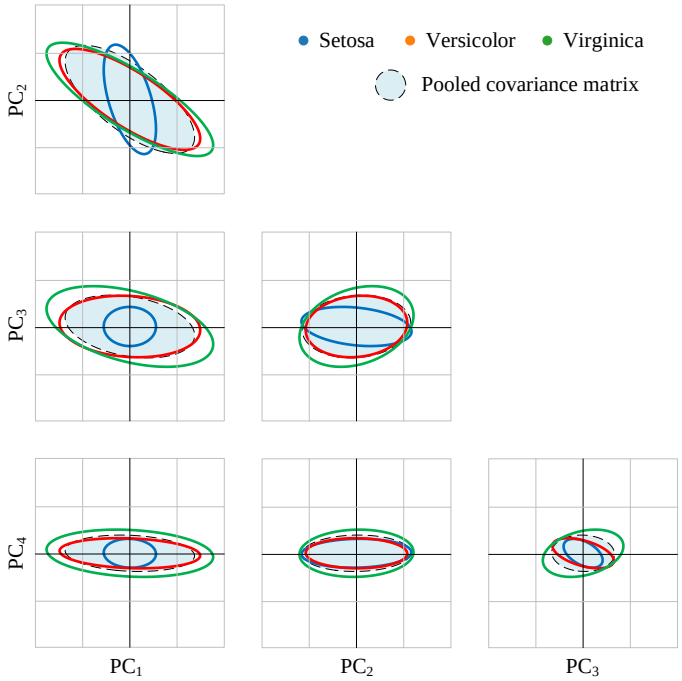


图 14. 马氏距离 1 椭圆，数据 $\boldsymbol{Y}_c$ 的分类、合并协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

16.3 格拉姆矩阵

特征值分解

图 15 所示为特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$。

注意，前文提过为了便于和协方差矩阵比较，本章中用的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 实际上是 $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}/(n-1)$。

图 15 中的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵，因此这个特征值分解同样是谱分解。

$\boldsymbol{V}_X$ 为正交矩阵，满足 $\boldsymbol{V}_X^T\boldsymbol{V}_X = \boldsymbol{V}_X\boldsymbol{V}_X^T = \boldsymbol{I}$。$\boldsymbol{\Lambda}_X$ 为对角矩阵，对角线元素为特征值，特征值从大到小排列。图 16 对比格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}_X$。下面，我们进一步分析这两个矩阵。

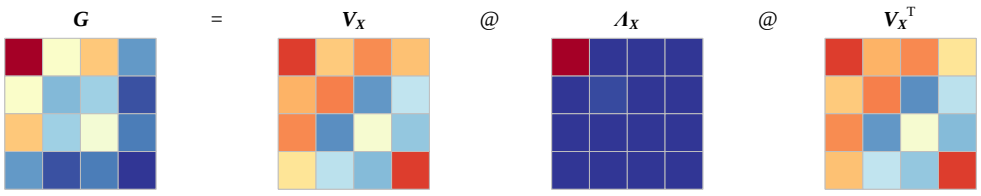


图 15. 特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

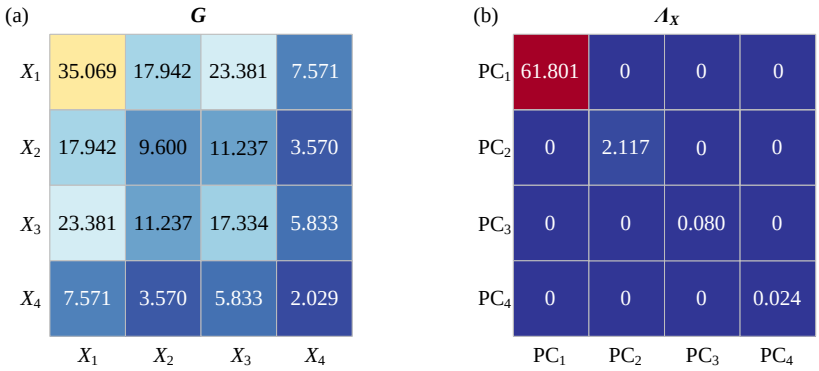


图 16. 对比 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda_X}$ 热图

分解前后

$\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda_X}$ 的主对角线之和相同，即 trace($\boldsymbol{G}$) = trace($\boldsymbol{\Lambda_X}$)。如图 17 所示，矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的主对角成分为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一列向量的模除以 $n-1$，代表某个特征相对于原点的分散情况，即“不去均值”的方差。

而 trace($\boldsymbol{G}$) 相当于数据整体相对于原点的分散度量。如图 17 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第一列和第三列贡献最大。经过特征值分解之后，如图 18 所示，第一主成分解释了大部分数据分散情况，占比高达 96.3%。

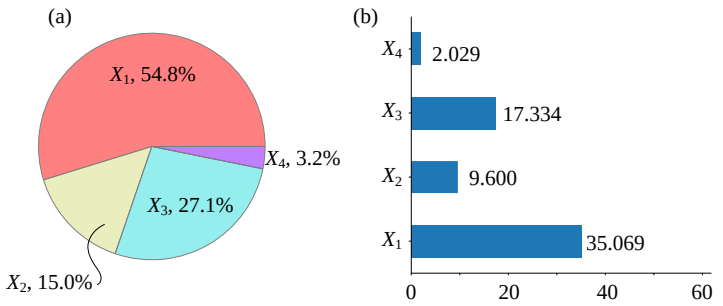


图 17. $\boldsymbol{G}$ 的主对角线成分

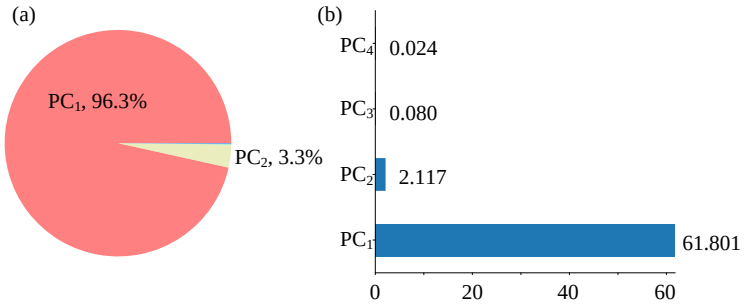


图 18. $\boldsymbol{\Lambda_X}$ 的主对角线成分，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的特征值

陡坡图

图 19 所示为在特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 主成分分析的陡坡图。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

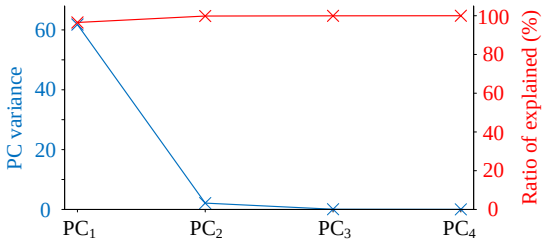


图 19. 陡坡图，特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$

特征向量矩阵

图 20 所示为特征向量矩阵 $\boldsymbol{V_X}$ 热图。显然，图 20 不同于图 7。

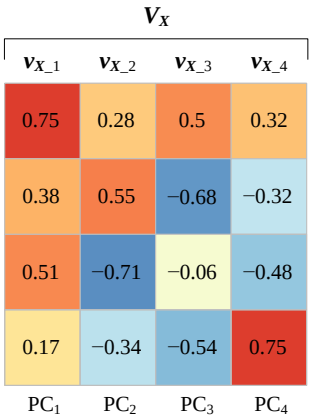


图 20. 特征向量矩阵 $\boldsymbol{V_X}$ 热图

投影

图 21 是将原始数据 $\boldsymbol{X}$ 投影到 $\boldsymbol{V_X}$，即 $\boldsymbol{Y_X} = \boldsymbol{XV_X}$。$\boldsymbol{Y_X}$ 的特点是其格拉姆矩阵为对角方阵，也就是说 $\boldsymbol{Y_X}$ 的列向量两两正交。

注意，两两正交不代表线性无关。

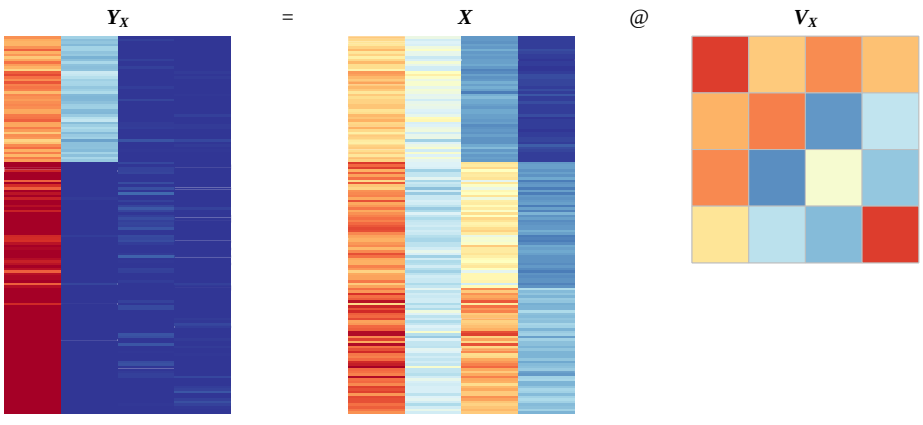


图 21. 将原始数据 $\boldsymbol{X}$ 投影到 $\boldsymbol{V_X}$

正交矩阵 $\boldsymbol{V_X}$ 也是一个规范正交基，$\boldsymbol{V_X}$ 是因原始数据 $\boldsymbol{X}$ 而生。前文提到，$\boldsymbol{V_c}$ 同样是一个规范正交基，但是 $\boldsymbol{V_c}$ 是因中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X_c}$ 而生。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

我们当然可以将 $\boldsymbol{X}$ 投影到 $\boldsymbol{V}_c$ 这个规范正交基中，大家可以自行验证 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_c$ 的协方差和 $\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{V}_c$ 相同，都是对角方阵。也就是说，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_c$ 的列向量也是线性无关。但是，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}_c$ 的质心不再是原点。

双标图

图 22 所示为 $\boldsymbol{V}_X$ 的双标图。请大家自行比较图 9 和图 22。

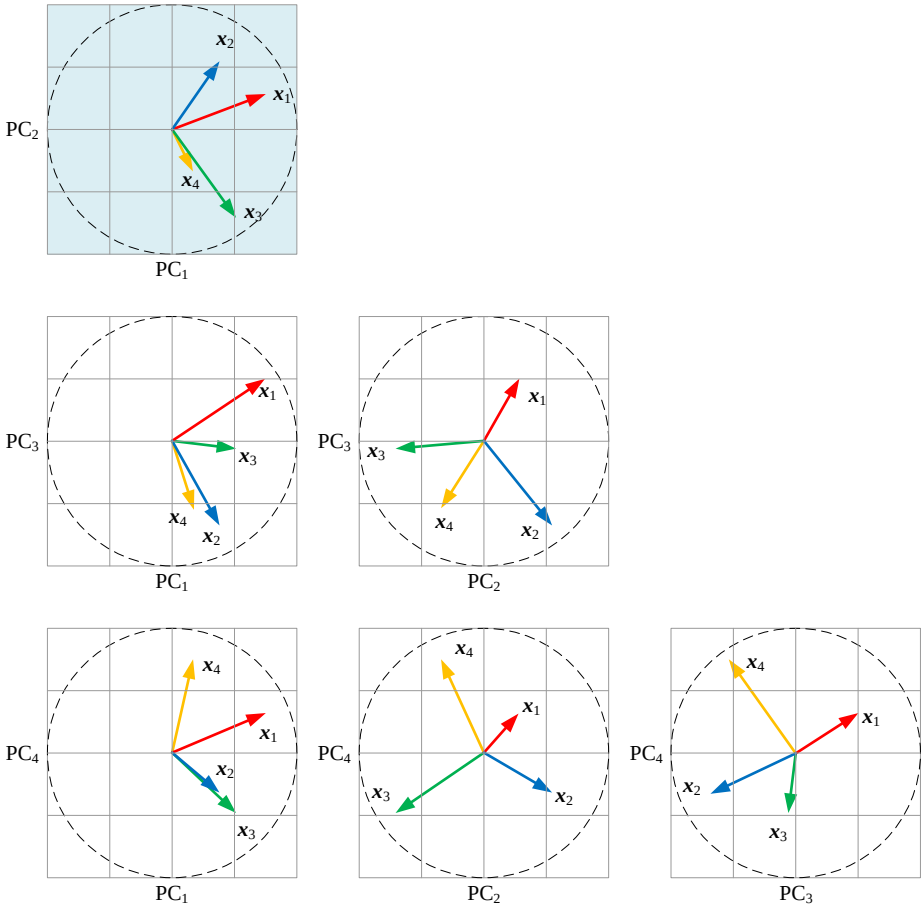


图 22. $\boldsymbol{V}_X$ 双标图，特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$

数据还原、误差

由于本节中 PCA 分析直接采用特征值分解格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$，根据 (1)，利用第一主成分还原原始数据 $\boldsymbol{X}$ 时我们不需要加入质心成分：

$$\boldsymbol{X} \approx \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_1} \otimes \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_1} \tag{33}$$

如果用第一、二主成分还原 $\boldsymbol{X}$，上式也需要再加一项：

$$\boldsymbol{X} \approx \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_1} \otimes \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_1}}_{\text{First principal}} + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_2} \otimes \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{X}\_2}}_{\text{Second principal}} \tag{34}$$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

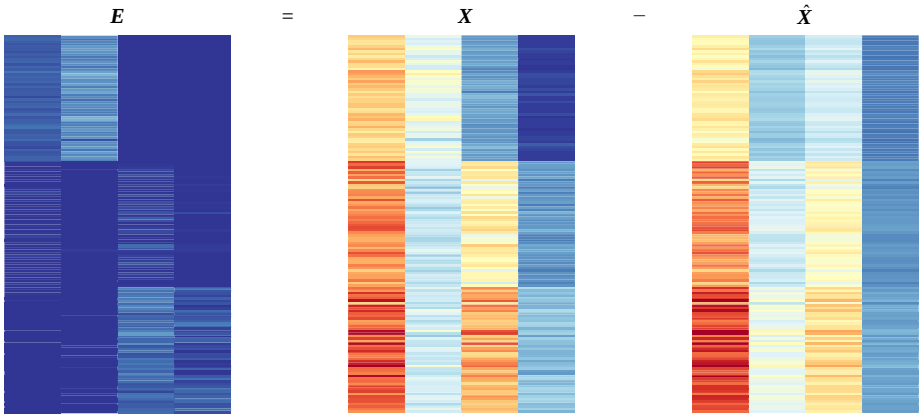


图 23. 第一主成分估计 $\boldsymbol{X}$

椭圆：投影之前

图 24 所示为格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 对应的旋转椭圆。$\boldsymbol{G}$ 相当于“不去均值”的协方差矩阵。观察图 24，我们发现椭圆的朝向都是一三象限，而且椭圆都细长。比较图 11 和图 24，大家应该理解为什么需要去均值。

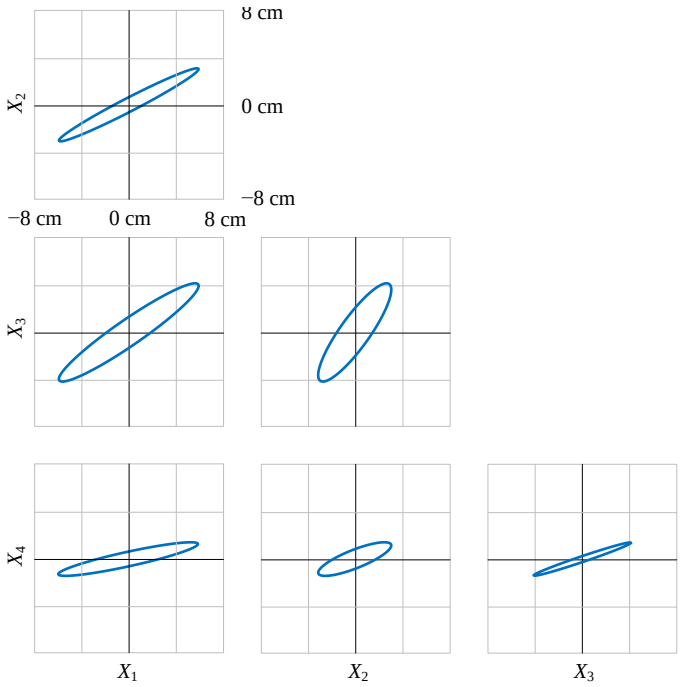


图 24. 马氏距离 1 椭圆，“不去均值”的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$

椭圆：投影之后

经过 $\boldsymbol{Y_X} = \boldsymbol{XV_X}$ 投影之后，图 25 所示 $\boldsymbol{Y_X}$ 协方差矩阵对应的椭圆。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

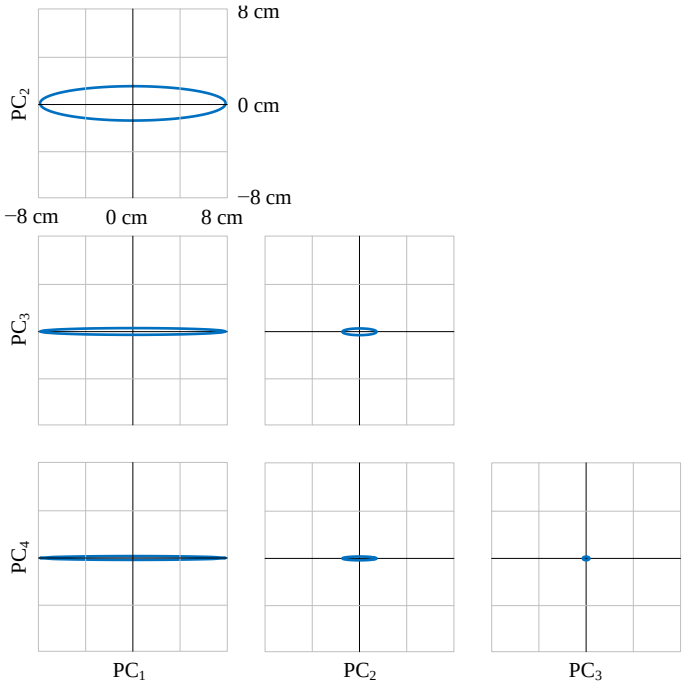


图 25. 马氏距离 1 椭圆，$\boldsymbol{Y_X}$ 的协方差矩阵

16.4 相关性系数矩阵

标准化数据 $\boldsymbol{Z_X}$ 相当于是 Z 分数，因此消除了特征量纲影响。因此，特征值分解相关系数矩阵不再受量纲影响。此外，标准化数据每一列特征数据均值均为 0，方差为 1。这也消除了较大方差特征的影响。

特征值分解

图 26 所示为特征值分解相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{P}$ 的主对角线都是 1，$\boldsymbol{P}$ 对角线之外的元素都是线性相关系数。图 27 对比相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda_Z}$ 热图。同样地，$\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda_Z}$ 主对角线之和相同，即 $\text{trace}(\boldsymbol{P}) = \text{trace}(\boldsymbol{\Lambda_Z})$。

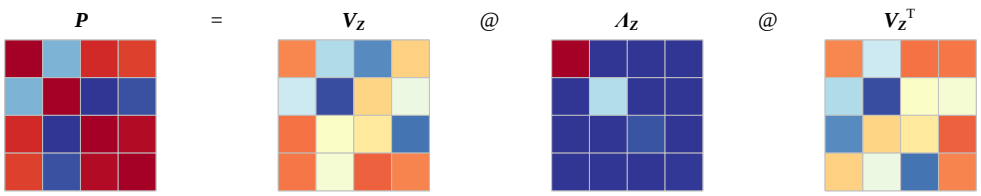


图 26. 特征值分解相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

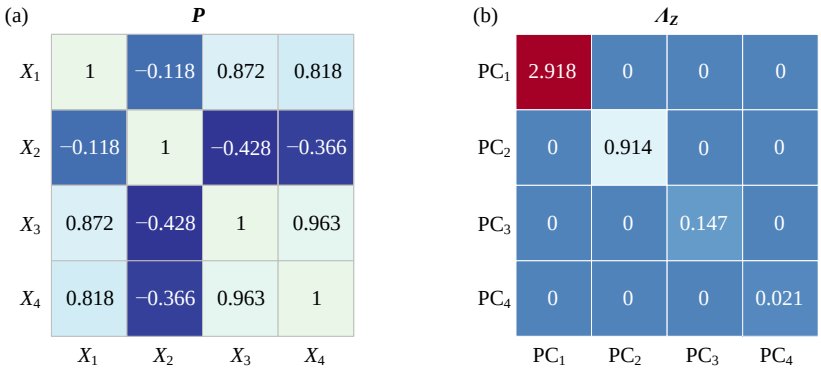


图 27. 对比相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda_Z}$ 热图

分解前后

图 4 中，X_3 对方差和 trace($\boldsymbol{\Sigma}$) 贡献超过 68%，而 X_2 的贡献小于 5%。而图 28 中每个特征经过标准化之后，贡献率完全相同。方差小特征也可能含有重要的信息，利用特征值分解相关性系数完成 PCA，可以消除这种顾虑。

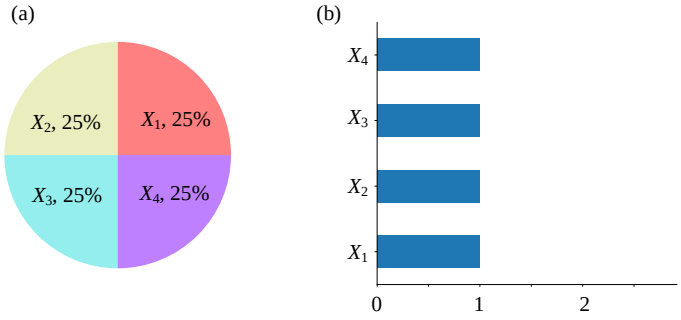


图 28. 相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 主对角线成分

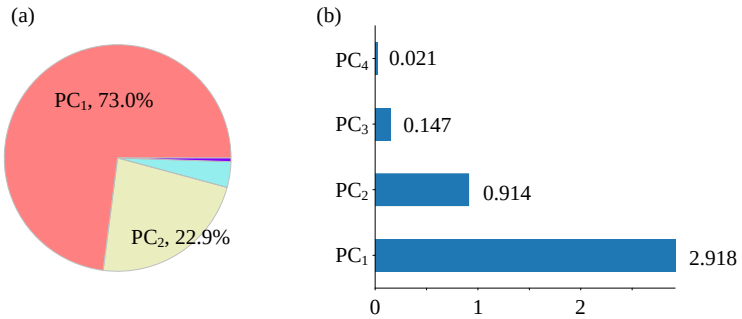


图 29. $\boldsymbol{\Lambda_Z}$ 的主对角线成分，相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 特征值

陡坡图

图 30 所示为特征值分解相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 主成分分析结果陡坡图。第一主成分贡献小于 80%。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

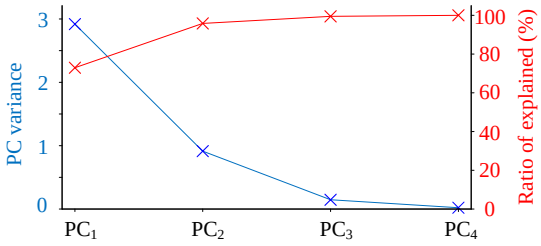


图 30. 陡坡图，特征值分解相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$

特征向量矩阵

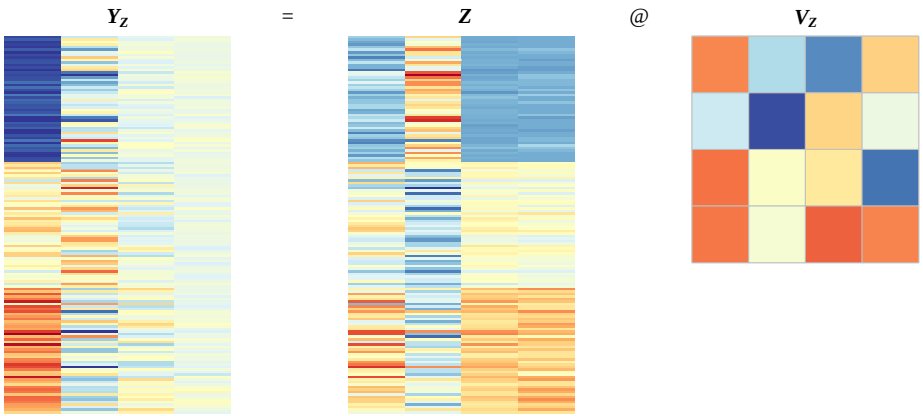
图 31 所示为特征向量矩阵 $\boldsymbol{V_Z}$ 热图。这幅图和图 7、图 20 均不同。

图 31. 特征向量矩阵 $\boldsymbol{V_Z}$ 热图

投影

图 32 所示为标准化数据 $\boldsymbol{Z}$ 投影到 $\boldsymbol{V_Z}$ 得到数据矩阵 $\boldsymbol{Y_Z}$。同样地，正交矩阵 $\boldsymbol{V_Z}$ 也是一个规范正交基，而 $\boldsymbol{V_Z}$ 是因中心化数据 $\boldsymbol{Z_X}$ 而生。

请大家将原数据 $\boldsymbol{X}$、中心化 $\boldsymbol{X_C}$ 也投影到 $\boldsymbol{V_Z}$ 中，并检验结果的协方差矩阵和质心。



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

图 32. 中心化数据 $\boldsymbol{Z}$ 投影到 $\boldsymbol{V_Z}$

双标图

图 33 所示为 $\boldsymbol{V_Z}$ 双标图，请大家比较本章三幅双标图。

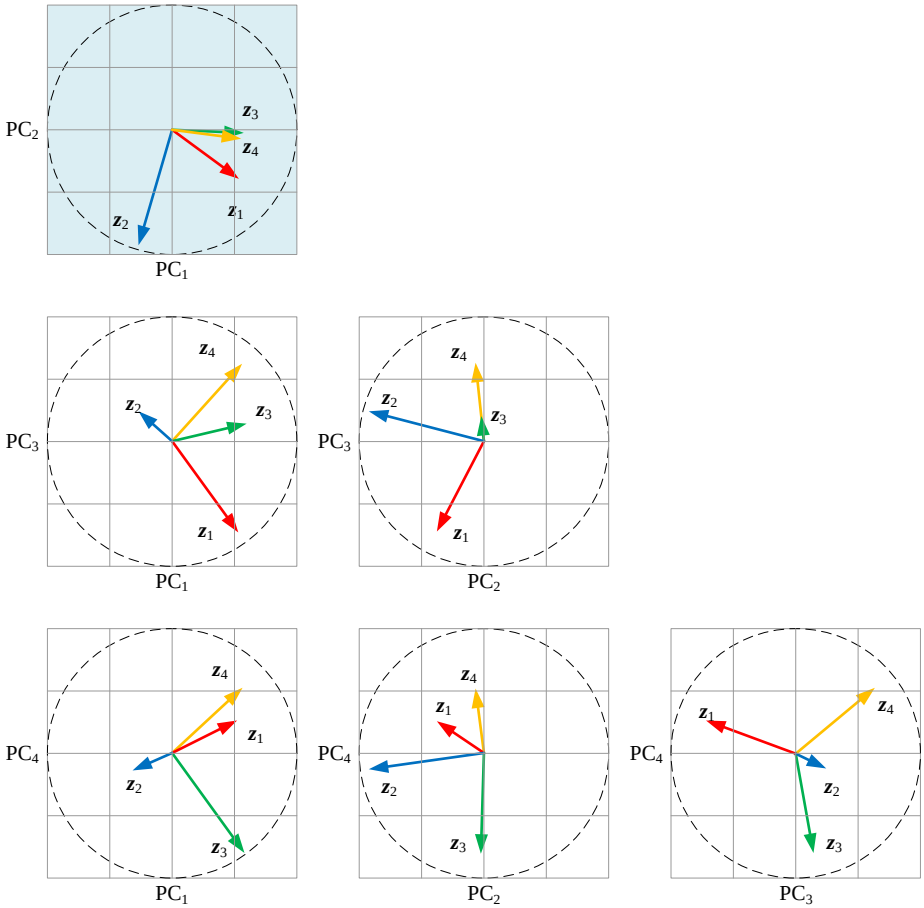


图 33. $\boldsymbol{V_Z}$ 双标图，特征值分解相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$

数据还原、误差

图 34 所示为第一主成分估计 $\boldsymbol{Z_X}$:

$$\boldsymbol{Z_X} \approx \boldsymbol{Z_X v_{X\_1}} \otimes \boldsymbol{v_{X\_1}} \tag{35}$$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

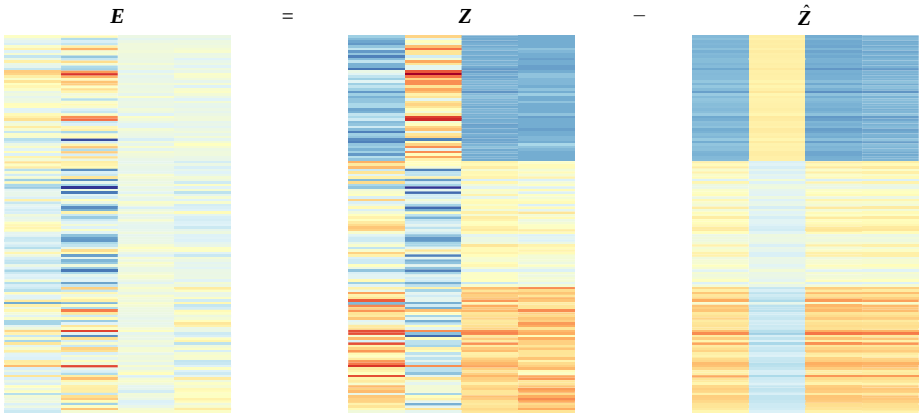


图 34. 第一主成分还原 Z_X

Z_X 可以写成：

$$Z_X = \left(X - \mathrm{E}(X)\right) D^{-1} = \sum_{j=1}^{D} Z_X v_{X\_j} \otimes v_{X\_j} \tag{36}$$

用 V_Z 还原 X：

$$X = \left(\sum_{j=1}^{D} Z_X v_{X\_j} \otimes v_{X\_j} \right) D + \mathrm{E}(X) \tag{37}$$

用 V_Z 第一主成分估计 X：

$$X \approx \underbrace{\left(Z_X v_{X\_1} \otimes v_{X\_1} \right)}_{\text{First principal}} D + \mathrm{E}(X) \tag{38}$$

其中，D 起到缩放的作用，$\mathrm{E}(X)$ 是平移的作用。

椭圆：投影之前

图 35 所示为投影之前相关性系数矩阵 P 对应的椭圆。请大家特别和前文协方差矩阵对应椭圆进行比较。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

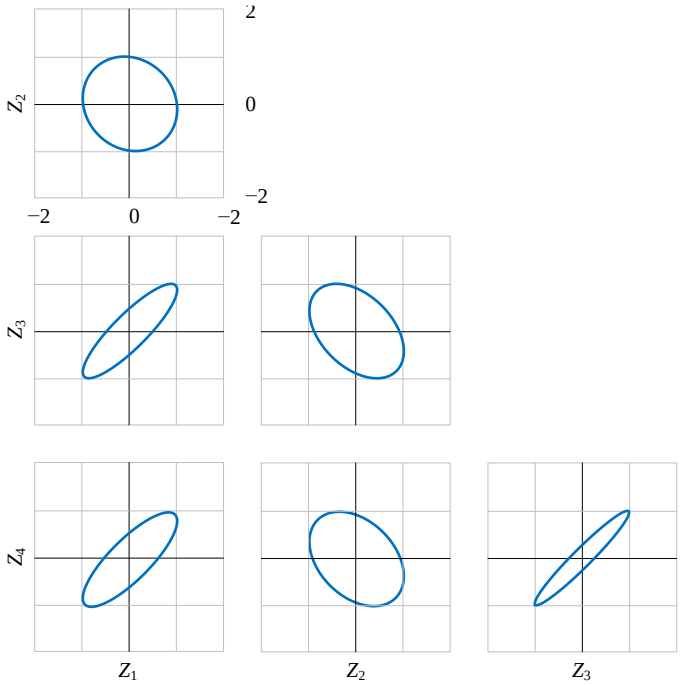


图 35. 马氏距离 1 椭圆，相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$

椭圆：投影之后

图 36 所示为投影之后正椭圆的位置和形状。

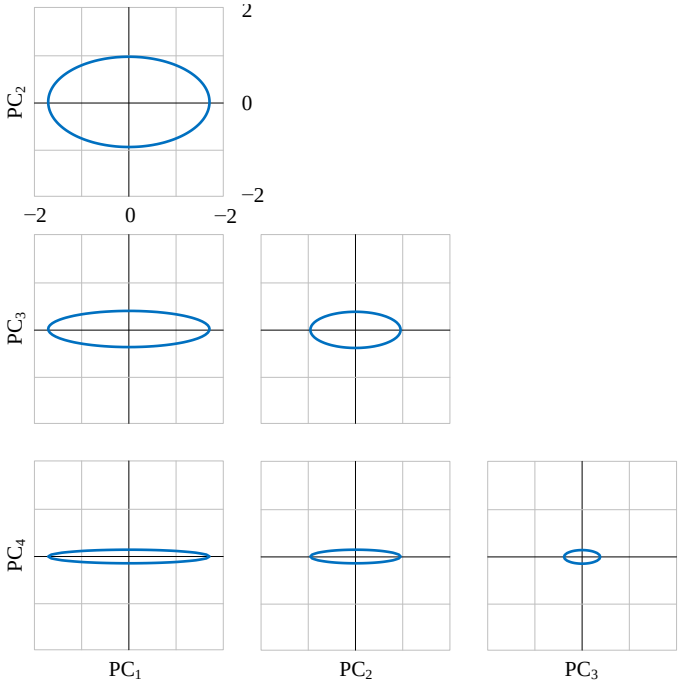
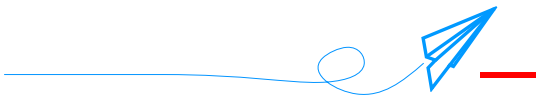


图 36. 马氏距离 1 椭圆，$\boldsymbol{Y_Z}$ 的协方差矩阵

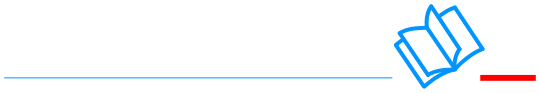
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

Bk7_Ch16_01.ipynb 绘制本章大部分图片。



主成分分析是鸢尾花书的“常客”，我们用椭圆、数据、格拉姆矩阵、协方差矩阵、特征值分解、奇异值分解、线性组合、优化、随机变量的线性函数等等视角探讨过主成分分析。换句话来说，机器学习常用的数学工具在主成分分析处达到了一种融合，大家也看到了数学板块实际上不是一个个孤立的个体，它们有其内在联系和网络。

下两章我们将主要介绍和主成分分析相关的回归算法。此外，本书后续还要介绍核主成分分析。



在用椭圆理解数据、解释主成分分析方面，以下论文给本章很多启发，欢迎大家阅读：

https://arxiv.org/pdf/1302.4881.pdf

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com