

# 16

Dive into Principal Component Analysis

## 主成分分析进阶

区分联系六条基本 PCA 技术路线



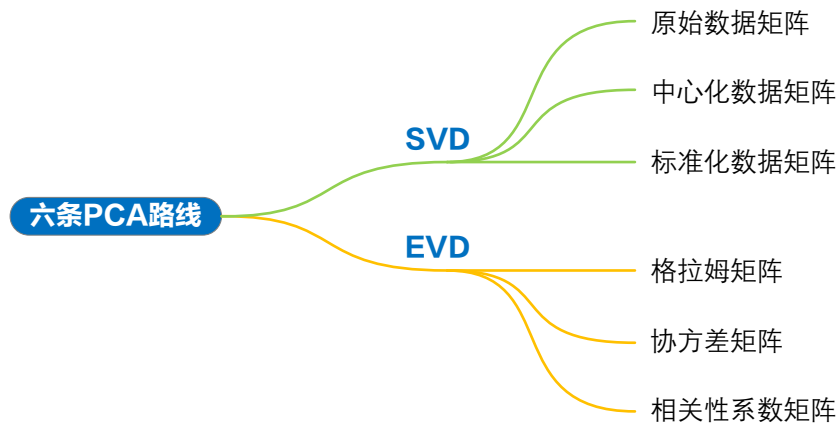
我发现了！

**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](mailto: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

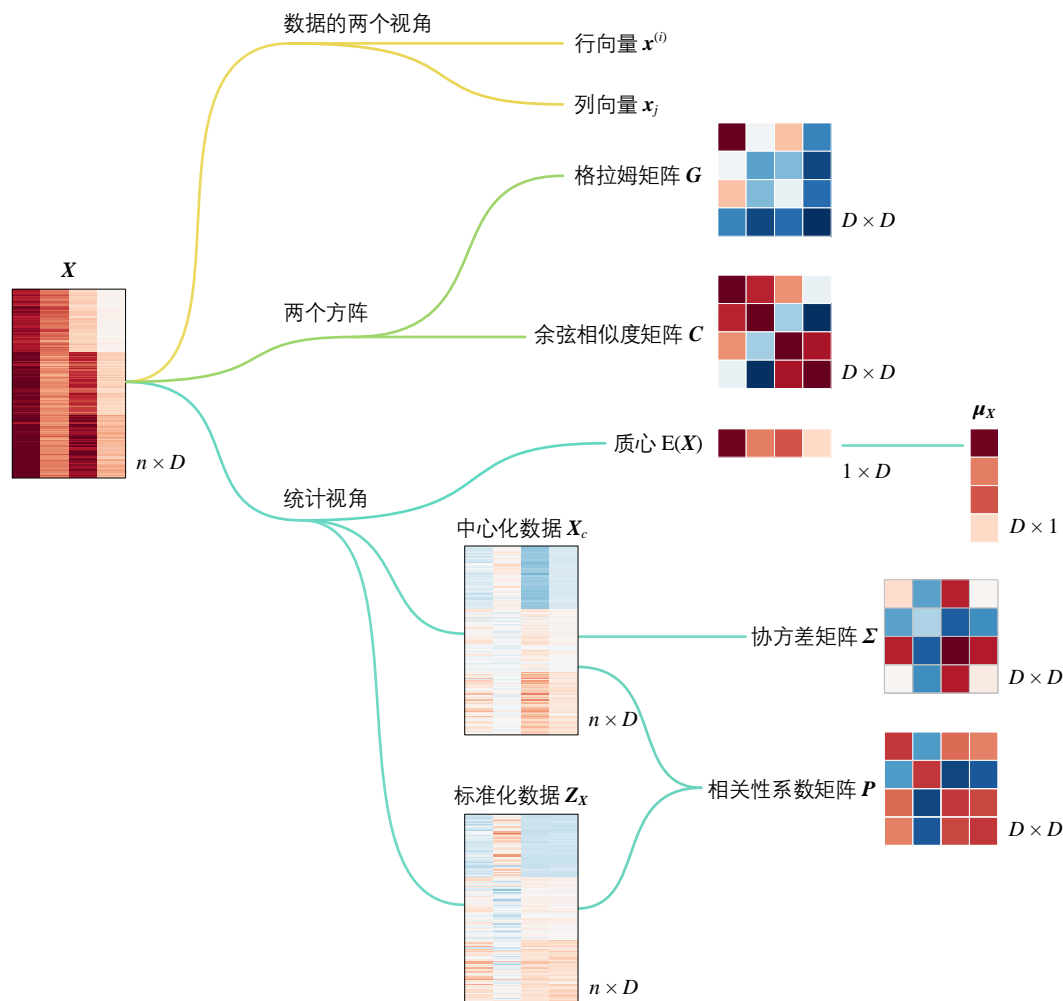
表 1 来自《矩阵力量》第 25 章，本章将讲解表 1 中六条 PCA 技术路线的细节，并比较它们的差异。

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 $X$	奇异值分解	$X = U_X S_X V_X^T$
格拉姆矩阵 $G = X^T X$ 本章中用“修正”的格拉姆矩阵 $G = \frac{X^T X}{n-1}$	特征值分解	$G = V_X A_X V_X^T$
中心化数据矩阵 $X_c = X - E(X)$	奇异值分解	$X_c = U_c S_c V_c^T$
协方差矩阵 $\Sigma = \frac{(X - E(X))^T (X - E(X))}{n-1}$	特征值分解	$\Sigma = V_c A_c V_c^T$
标准化数据 (z 分数) $Z_X = (X - E(X)) D^{-1}$ $D = \text{diag}(\text{diag}(\Sigma))^{\frac{1}{2}}$	奇异值分解	$Z_X = U_Z S_Z V_Z^T$
相关性系数矩阵 $P = D^{-1} \Sigma D^{-1}$ $D = \text{diag}(\text{diag}(\Sigma))^{\frac{1}{2}}$	特征值分解	$P = V_Z A_Z V_Z^T$

## 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  $X$ 。如图 1 所示，原始数据矩阵  $X$  的形状为  $n \times D$ 。

图 1.  $\mathbf{X}$  衍生得到的几个矩阵，来自《矩阵力量》

$\mathbf{X}$  的格拉姆矩阵  $\mathbf{G}$  为：

$$\mathbf{G} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \quad (1)$$

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

中心化 (去均值) 矩阵  $\mathbf{X}_c$  为：

$$\mathbf{X}_c = \mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}) \quad (2)$$

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

样本数据矩阵  $\mathbf{X}$  的协方差矩阵  $\mathbf{\Sigma}$  为：

$$\mathbf{\Sigma} = \frac{\mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c}{n-1} = \frac{(\mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}))^T (\mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}))}{n-1} \quad (3)$$

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  $\mathbf{G}$  特别定义为：

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{n-1} \quad (4)$$

**标准化** (standardization 或 z-score normalization) 数据矩阵  $\mathbf{Z}_X$  为：

$$\mathbf{Z}_X = (\mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X})) \mathbf{D}^{-1} \quad (5)$$

其中  $\mathbf{D}$  为对角方阵：

$$\mathbf{D} = \text{diag}(\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_D \end{bmatrix} \quad (6)$$

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

线性相关性系数矩阵  $\mathbf{P}$  为：

$$\mathbf{P} = \mathbf{D}^{-1} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{D}^{-1} \quad (7)$$

$\mathbf{P}$  实际上是  $\mathbf{Z}_X$  的协方差，即：

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{Z}_X^T \mathbf{Z}_X}{n-1} \quad (8)$$

## 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  $\mathbf{X}$  进行经济型 SVD 分解：

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}_X \mathbf{S}_X \mathbf{V}_X^T \quad (9)$$

其中， $\mathbf{S}_X$  为对角方阵。

将 (9) 代入 (1)：

$$\mathbf{G} = \mathbf{V}_X \mathbf{S}_X^2 \mathbf{V}_X^T \quad (10)$$

上式便是格拉姆  $\mathbf{G}$  的特征值分解。

对中心化数据矩阵  $\mathbf{X}_c$  经济型 SVD 分解：

$$\mathbf{X}_c = \mathbf{U}_c \mathbf{S}_c \mathbf{V}_c^T \quad (11)$$

而协方差矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}$  则可以写成：

$$\Sigma = V_c \frac{S_c^2}{n-1} V_c^T \quad (12)$$

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

$$\lambda_{c-j} = \frac{s_{c-j}^2}{n-1} \quad (13)$$

同样，对标准化数据矩阵  $Z_X$  进行经济型 SVD 分解：

$$Z_X = U_Z S_Z V_Z^T \quad (14)$$

相关性系数矩阵  $P$  则可以写成：

$$P = V_Z \frac{S_Z^2}{n-1} V_Z^T \quad (15)$$

上式相当于对  $P$  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：中心化数据

本节讲解利用特征值分解协方差矩阵  $\Sigma$  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  $\Sigma$ 。 $\Sigma$  的对角线元素为方差，其他元素为协方差。 $\Sigma$  的迹代表方差之和：

$$\text{trace}(\Sigma) = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_D^2 = \sum_{j=1}^D \sigma_j^2 \quad (16)$$

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

$A_c$  为对角矩阵，对角线元素为特征值，特征值从大到小排列。 $X_c$  投影到规范正交基  $V_c$  中得到  $Y_c$ ，即  $Y_c = X_c V_c$ 。 $A_c$  主对角线上的特征值实际上是  $Y_c$  的方差，也就是说  $A_c$  是  $Y_c$  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。

$Y_c$  的方差 (即  $A_c$  中特征值) 之和为：

$$\text{trace}(A_c) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_D = \sum_{j=1}^D \lambda_j \quad (17)$$

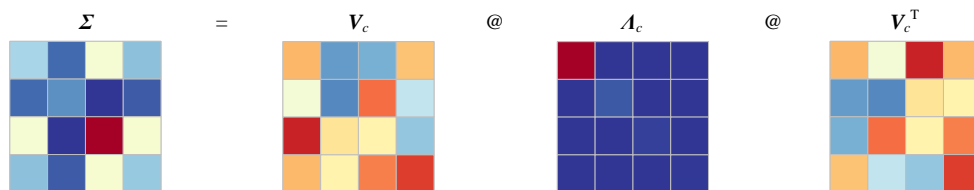
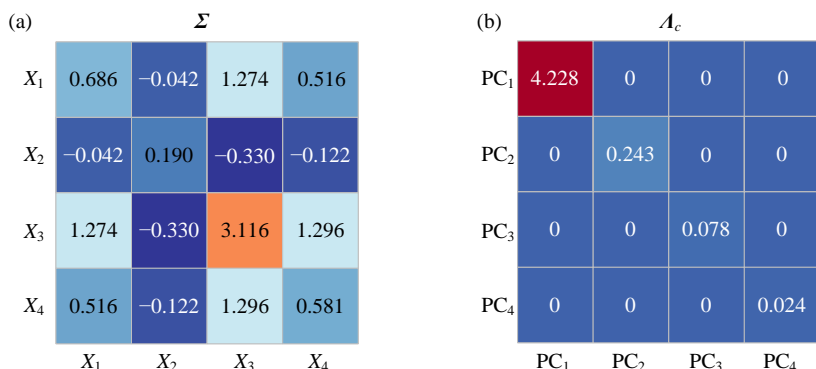
图 2. 特征值分解协方差矩阵  $\Sigma$ 

图 3 对比协方差矩阵  $\Sigma$  和  $\Lambda_c$ 。

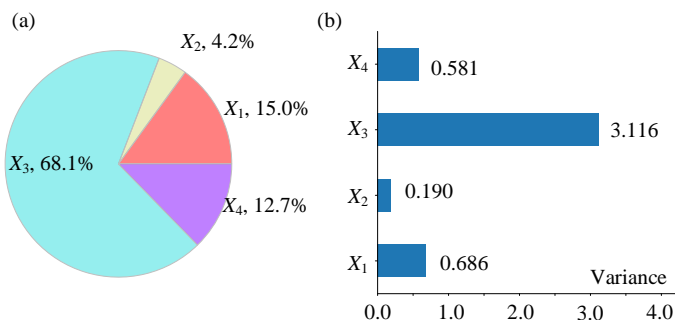
下面，我们进一步分析这两个矩阵。

图 3. 对比协方差矩阵  $\Sigma$  和  $\Lambda_c$  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  $\mathbf{X}$  中第三列（即  $X_3$ ）的方差最大， $X_3$  对方差和  $\text{trace}(\Sigma)$  贡献超过 68%。

图 4. 协方差矩阵  $\Sigma$  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  $\Sigma$  的迹  $\text{trace}(\Sigma)$  等于的特征值方阵  $\Lambda_c$  迹  $\text{trace}(\Lambda_c)$ ：

$$\text{trace}(\Sigma) = \text{trace}(\Lambda_c) \quad (18)$$

即：

$$\sum_{j=1}^D \sigma_j^2 = \sum_{j=1}^D \lambda_j \quad (19)$$

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  $\lambda_j$  对  $\text{trace}(\mathbf{A}_c)$  的贡献百分比为：

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

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。

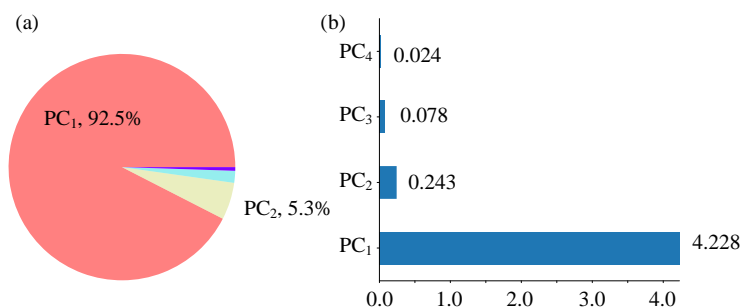


图 5.  $\mathbf{A}_c$  的主对角线成分，协方差矩阵  $\Sigma$  的特征值

## 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：

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

图 6 所示为特征值分解协方差矩阵  $\Sigma$  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。

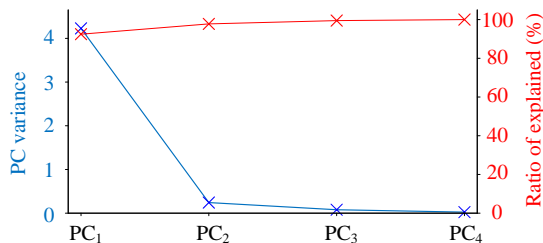


图 6. 陡坡图，特征值分解协方差矩阵  $\Sigma$

## 特征向量矩阵

图 7 所示为特征向量矩阵  $\mathbf{V}_c$  热图。 $\mathbf{V}_c$  的每一列便代表一个主成分的方向，即  $\mathbf{V}_c = [\mathbf{v}_{c_1}, \mathbf{v}_{c_2}, \mathbf{v}_{c_3}, \mathbf{v}_{c_4}]$  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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)



在主成分分析中， $V_c$  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  $v_j \sqrt{\lambda_j}$ 。

$V_c$  也可以通过经济型 SVD 分解中心化矩阵  $X_c$  得到。

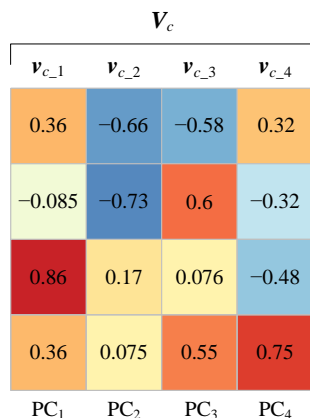


图 7. 特征向量矩阵  $V_c$  热图

## 投影

由于  $V_c$  为正交矩阵，满足  $V_c^T V_c = V_c V_c^T = I$ ，因此  $V_c$  本身也是规范正交基。如图 8 所示，将中心化矩阵  $X_c$  投影到  $V_c$  这个规范正交基中得到数据矩阵  $Y_c$ ，即  $Y_c = X_c V_c$ 。通过图 8 中的  $Y_c$  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， $V_c$  的第一列列向量实际上是如下优化问题的解：

$$\begin{aligned} v_{c,1} &= \arg \max_v \|X_c v\| \\ \text{subject to: } &\|v\| = 1 \end{aligned} \quad (22)$$

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

请大家思考  $Y_c$  的每一列的均值是多少？ $Y_c$  的质心位置是什么？为什么？

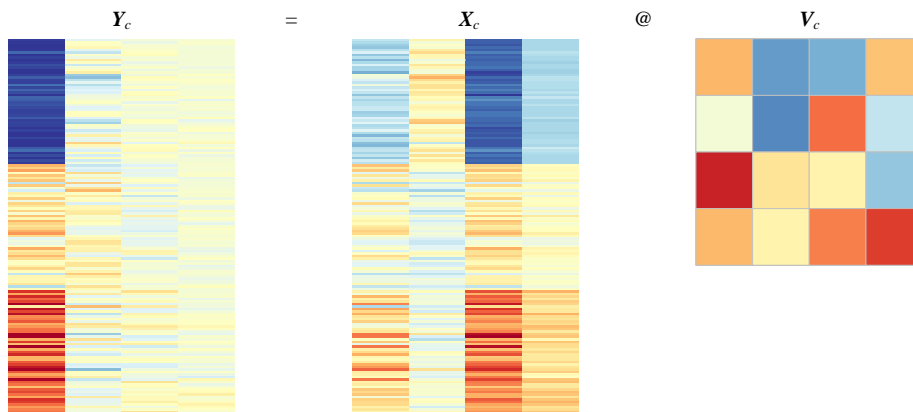


图 8. 将中心化数据  $X_c$  投影到  $V_c$

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](mailto: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  $V_c$  的重要方法。

以图 9 中蓝色背景的双标图为例，中心化数据  $\mathbf{X}_c$  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  $PC_1$  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  $V_c$  第一列  $\mathbf{v}_{c_1}$ 。

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。

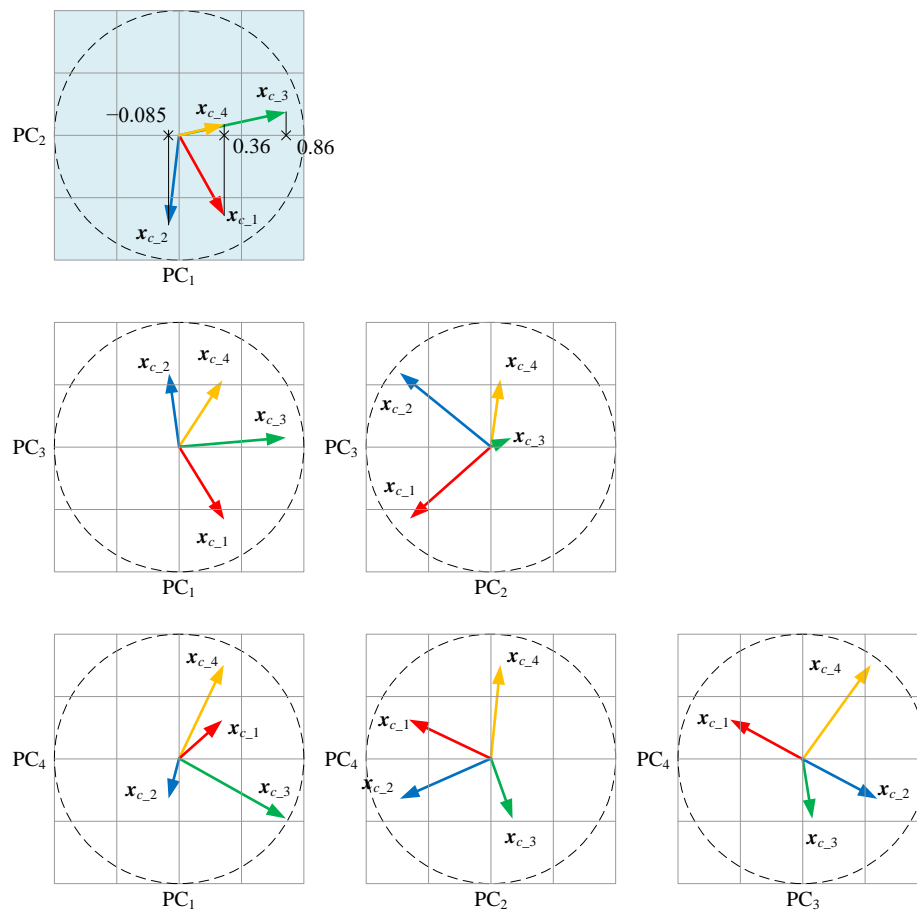


图 9.  $V_c$  双标图，特征值分解协方差矩阵  $\Sigma$

## 数据还原、误差

将 (11) 展开写成：

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_c &= \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{u}_{c-1} & \mathbf{u}_{c-2} & \cdots & \mathbf{u}_{c-D} \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} s_{c-1} & & & \\ & s_{c-2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_{c-D} \end{bmatrix}}_{\mathbf{S}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{v}_{c-1}^T \\ \mathbf{v}_{c-2}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{c-D}^T \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}_c^T} \\
 &= s_{c-1} \mathbf{u}_{c-1} \mathbf{v}_{c-1}^T + s_{c-2} \mathbf{u}_{c-2} \mathbf{v}_{c-2}^T + \cdots + s_{c-D} \mathbf{u}_{c-D} \mathbf{v}_{c-D}^T = \sum_{j=1}^D s_{c-j} \mathbf{u}_{c-j} \mathbf{v}_{c-j}^T
 \end{aligned} \tag{23}$$

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

$$\hat{\mathbf{X}}_c = \underbrace{s_{c-1} \mathbf{u}_{c-1} \mathbf{v}_{c-1}^T}_{\text{First principal}} \tag{24}$$

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

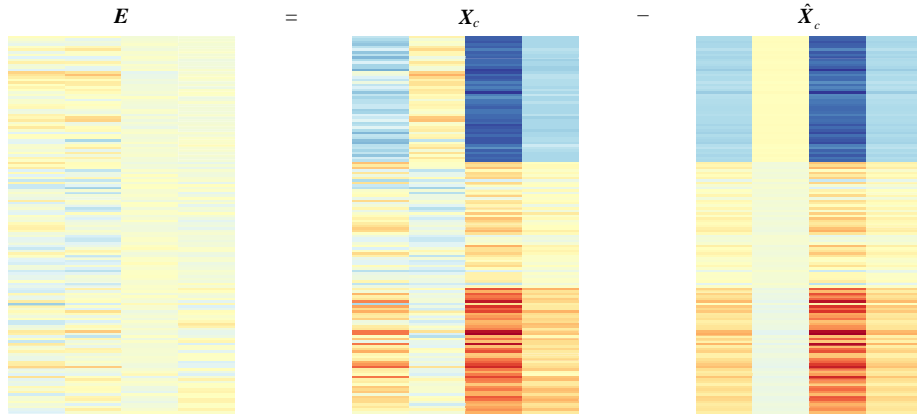


图 10. 第一主成分估计  $\mathbf{X}_c$

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

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

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

$$\mathbf{X} \approx s_{c-1} \mathbf{u}_{c-1} \mathbf{v}_{c-1}^T + \mathbf{E}(\mathbf{X}) \tag{26}$$

上式中， $\mathbf{E}(\mathbf{X})$  为行向量，计算时用到了广播原则。

大家可能会问，图 2 中特征值分解仅仅获得了  $\mathbf{V}_c$ ，没有  $\mathbf{U}_c$ 。难道我们还需要再对  $\mathbf{X}_c$  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  $\mathbf{X}_c$  可以写成：

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

将  $\mathbf{V}_c$  展开，上式可以写成：

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_c &= \mathbf{X}_c \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{v}_{c-1} & \mathbf{v}_{c-2} & \cdots & \mathbf{v}_{c-D} \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}_c} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{v}_{c-1}^T \\ \mathbf{v}_{c-2}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{c-D}^T \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}_c^T} \\ &= \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1} \mathbf{v}_{c-1}^T + \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-2} \mathbf{v}_{c-2}^T + \cdots + \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-D} \mathbf{v}_{c-D}^T = \mathbf{X}_c \sum_{j=1}^D \mathbf{v}_{c-j} \mathbf{v}_{c-j}^T \end{aligned} \quad (28)$$

所以, (24) 可以写成:

$$\hat{\mathbf{X}}_c = \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1} \mathbf{v}_{c-1}^T = \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1} \otimes \mathbf{v}_{c-1} \quad (29)$$

(26) 则可以写成:

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1} \otimes \mathbf{v}_{c-1} + \mathbf{E}(\mathbf{X}) \quad (30)$$

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

$$\mathbf{X} \approx \underbrace{\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1} \otimes \mathbf{v}_{c-1}}_{\text{First principal}} + \underbrace{\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-2} \otimes \mathbf{v}_{c-2}}_{\text{Second principal}} + \underbrace{\mathbf{E}(\mathbf{X})}_{\text{Centroid}} \quad (31)$$

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

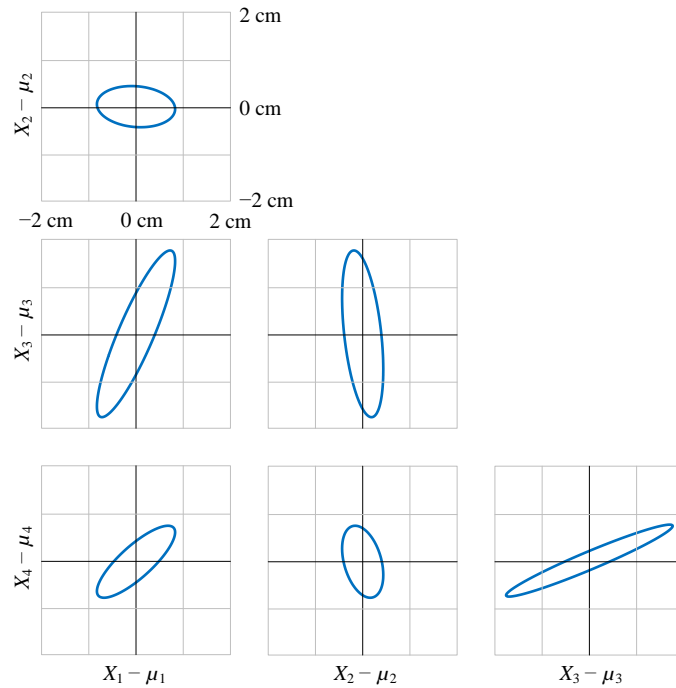
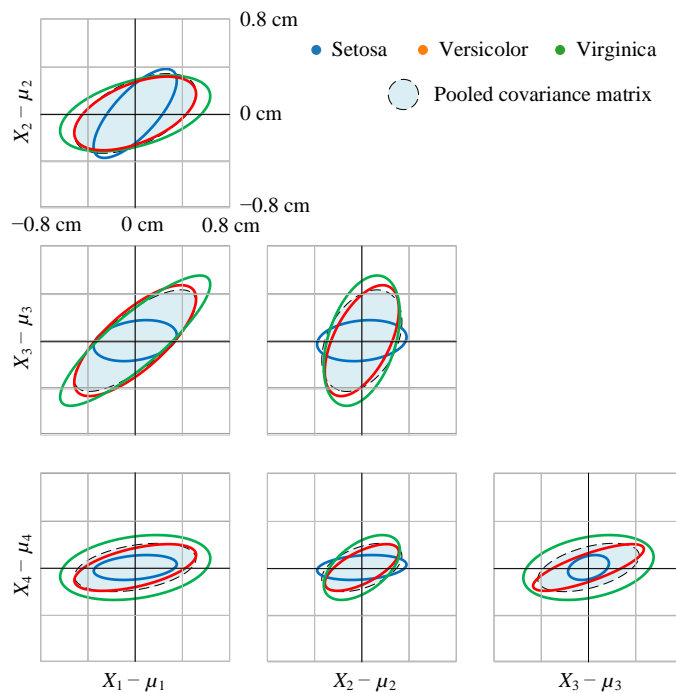
如图 11 所示, 协方差矩阵  $\Sigma$  椭球 (马氏距离为 1) 在六个平面上的投影。

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  $\mathbf{X}$  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。

图 11. 马氏距离 1 椭圆，协方差矩阵  $\Sigma$ 图 12. 马氏距离 1 椭圆，数据  $X$  的分类、合并协方差矩阵  $\Sigma$ 

## 椭圆：投影之后

将中心化数据  $X_c$  投影到  $V_c$  得到的结果为  $Y_c$ :

$$\mathbf{Y}_c = \mathbf{X}_c \mathbf{V}_c$$

(32)

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

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

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

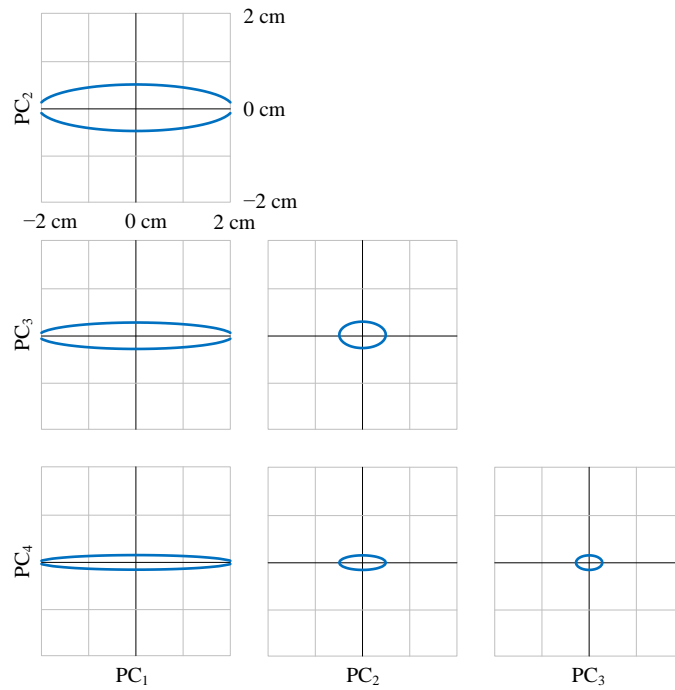
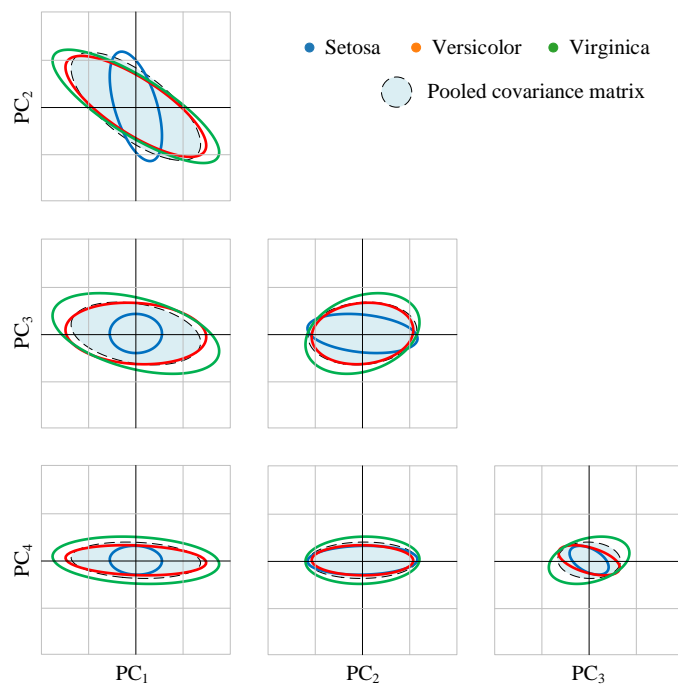


图 13. 马氏距离 1 椭圆， $\mathbf{Y}_c$  的协方差矩阵

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

## 16.3 格拉姆矩阵：原始数据

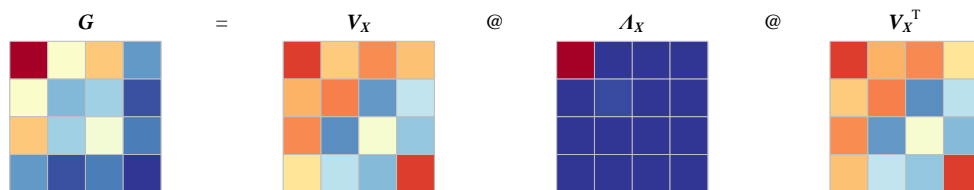
### 特征值分解

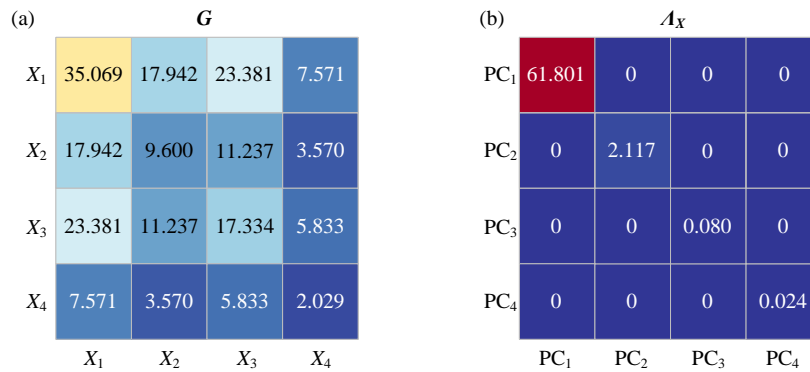
图 15 所示为特征值分解格拉姆矩阵  $\mathbf{G}$ 。

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  $\mathbf{G}$  实际上是  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} / (n - 1)$ 。

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

$\mathbf{V}_X$  为正交矩阵，满足  $\mathbf{V}_X^T \mathbf{V}_X = \mathbf{V}_X \mathbf{V}_X^T = \mathbf{I}$ 。 $\mathbf{A}_X$  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  $\mathbf{G}$  和  $\mathbf{A}_X$ 。下面，我们进一步分析这两个矩阵。

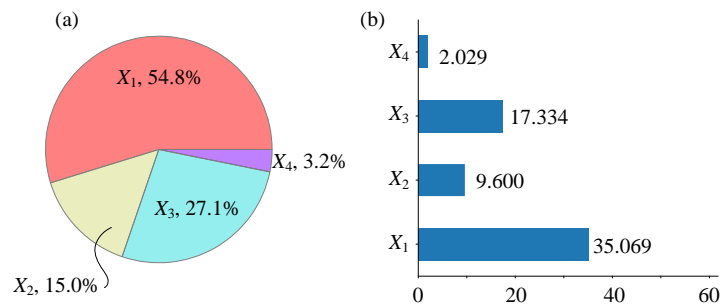
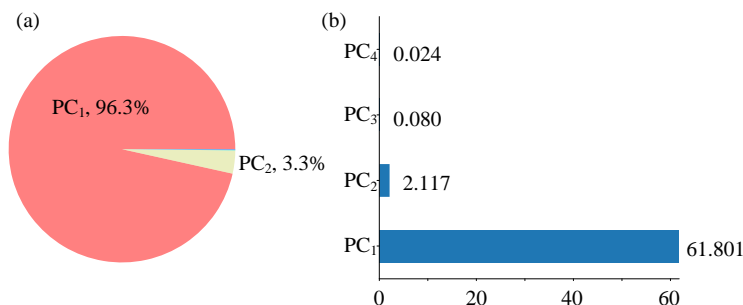
图 15. 特征值分解格拉姆矩阵  $\mathbf{G}$

图 16. 对比  $G$  和  $A_X$  热图

## 分解前后

$G$  和  $A_X$  的主对角线之和相同，即  $\text{trace}(G) = \text{trace}(A_X)$ 。如图 17 所示，矩阵  $G$  的主对角成分为矩阵  $X$  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。

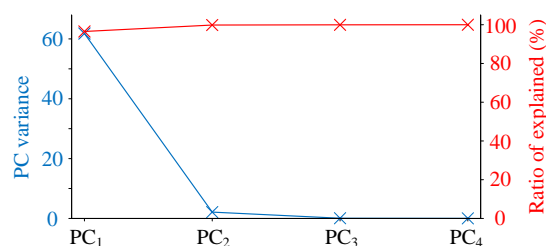
而  $\text{trace}(G)$  相当于数据整体相对于原点的分散度量。如图 17 所示，矩阵  $X$  的第一列和第三列贡献最大。经过特征值分解之后，如图 18 所示，第一主成分解释了大部分数据分散情况，占比高达 96.3%。

图 17.  $G$  的主对角线成分图 18.  $A_X$  的主对角线成分，格拉姆矩阵  $G$  的特征值

## 陡坡图

图 19 所示为在特征值分解格拉姆矩阵  $G$  主成分分析的陡坡图。



图 19. 陡坡图，特征值分解格拉姆矩阵  $G$ 

## 特征向量矩阵

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

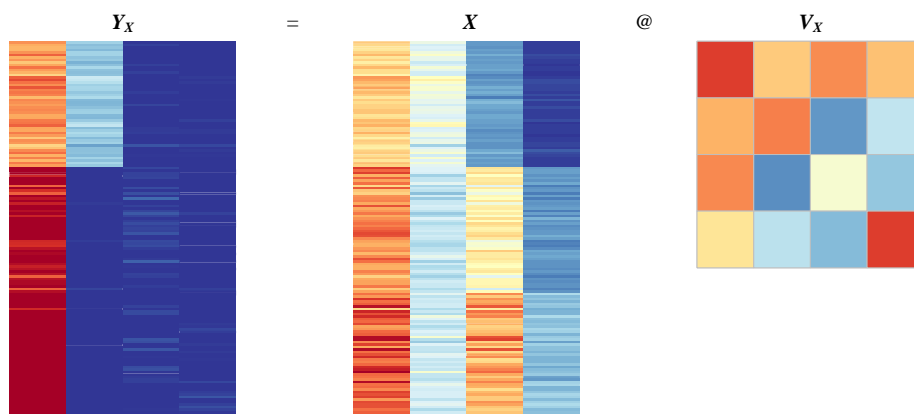
$V_X$			
$v_{X_1}$	$v_{X_2}$	$v_{X_3}$	$v_{X_4}$
0.75	0.28	0.5	0.32
0.38	0.55	-0.68	-0.32
0.51	-0.71	-0.06	-0.48
0.17	-0.34	-0.54	0.75
PC <sub>1</sub>	PC <sub>2</sub>	PC <sub>3</sub>	PC <sub>4</sub>

图 20. 特征向量矩阵  $V_X$  热图

## 投影

图 21 是将原始数据  $X$  投影到  $V_X$ ，即  $Y_X = XV_X$ 。 $Y_X$  的特点是其格拉姆矩阵为对角方阵，也就是说  $Y_X$  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  $X$  投影到  $V_X$ 

正交矩阵  $V_X$  也是一个规范正交基， $V_X$  是因原始数据  $X$  而生。前文提到， $V_c$  同样是一个规范正交基，但是  $V_c$  是因中心化数据矩阵  $X_c$  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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

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

## 双标图

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

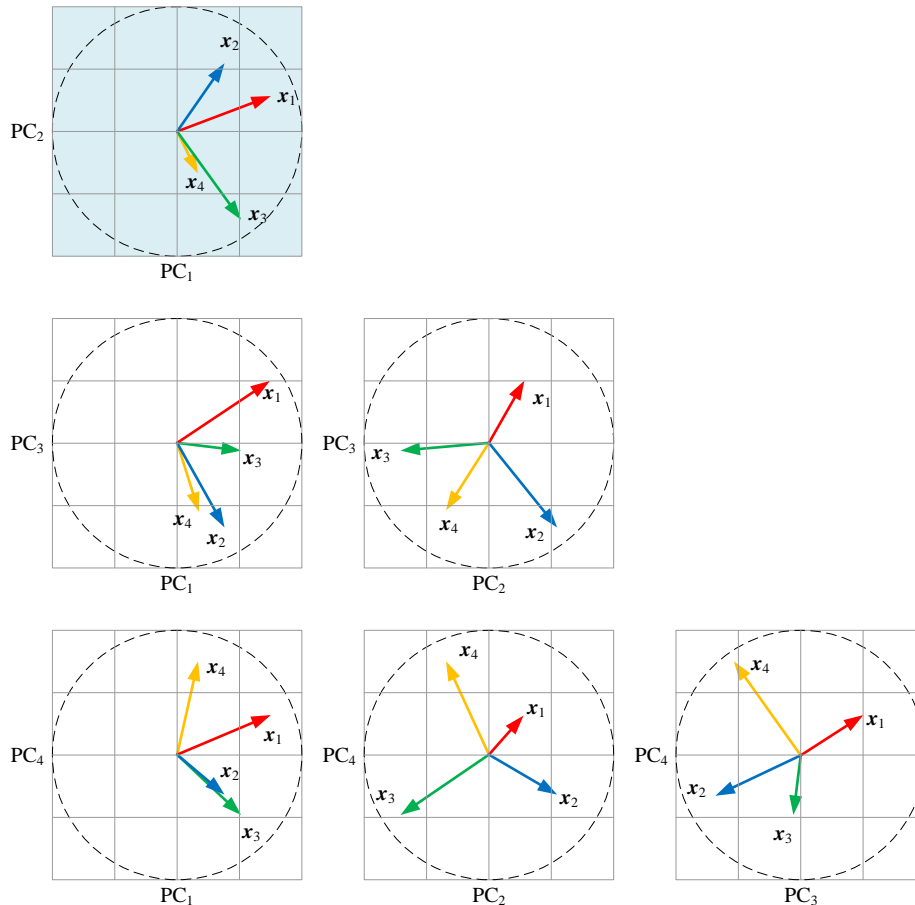


图 22.  $\mathbf{V}_x$  双标图，特征值分解格拉姆矩阵  $\mathbf{G}$

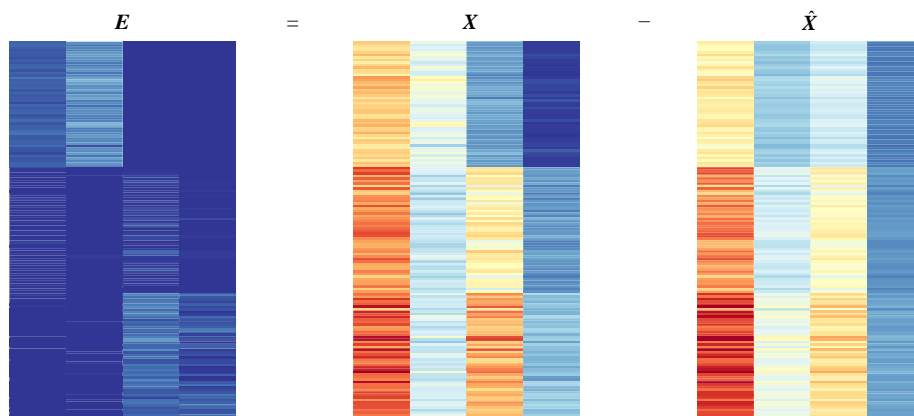
## 数据还原、误差

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

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{X}\mathbf{v}_{x_{-1}} \otimes \mathbf{v}_{x_{-1}} \quad (33)$$

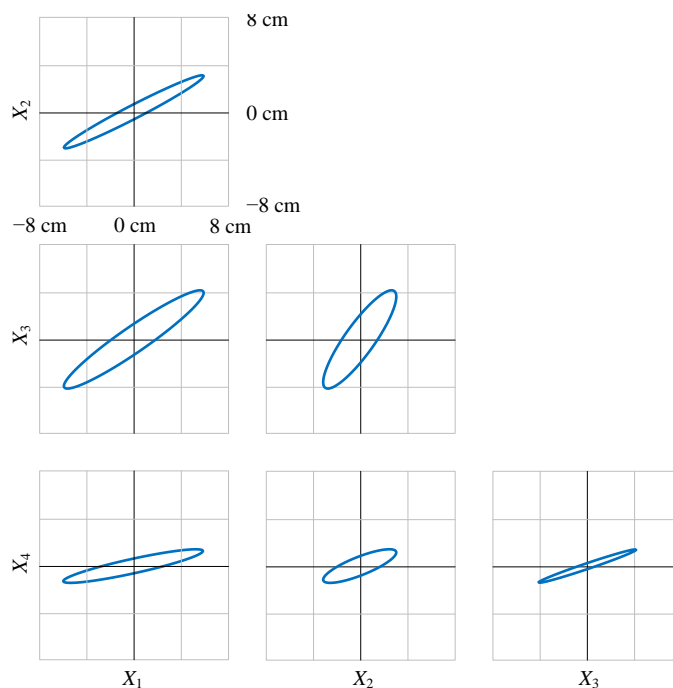
如果用第一、二主成分还原  $\mathbf{X}$ ，上式也需要再加一项：

$$\mathbf{X} \approx \underbrace{\mathbf{X}\mathbf{v}_{x_{-1}} \otimes \mathbf{v}_{x_{-1}}}_{\text{First principal}} + \underbrace{\mathbf{X}\mathbf{v}_{x_{-2}} \otimes \mathbf{v}_{x_{-2}}}_{\text{Second principal}} \quad (34)$$

图 23. 第一主成分估计  $\hat{X}$ 

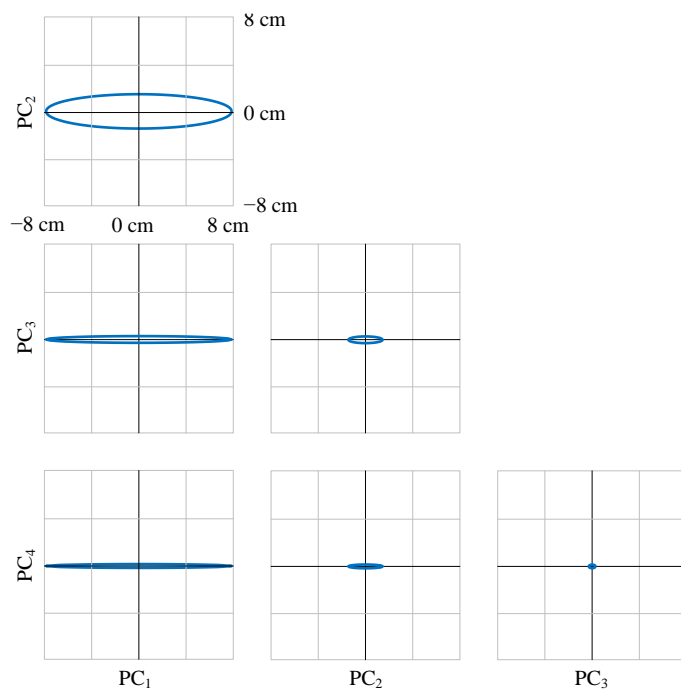
### 椭圆：投影之前

图 24 所示为格拉姆矩阵  $G$  对应的旋转椭圆。 $G$  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  $\Sigma$ 

### 椭圆：投影之后

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

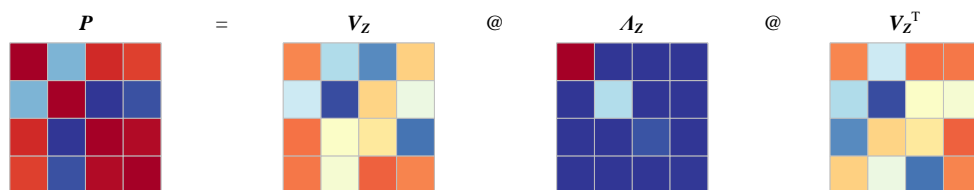
图 25. 马氏距离 1 椭圆,  $Y_X$  的协方差矩阵

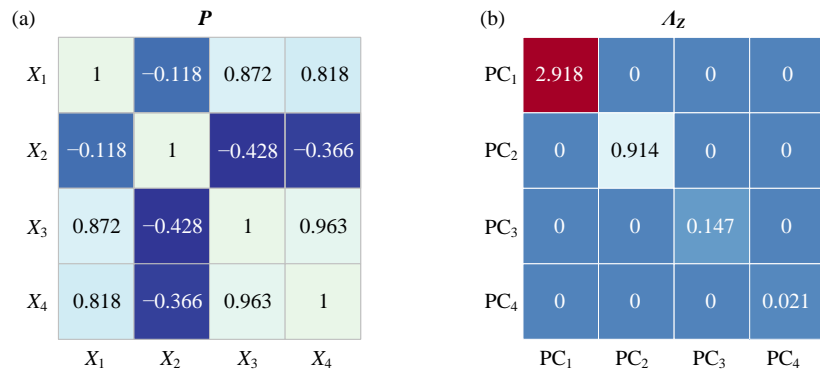
## 16.4 相关性系数矩阵：标准化数据

标准化数据  $Z_X$  相当于 Z 分数，因此消除了特征量纲影响。因此，特征值分解相关性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

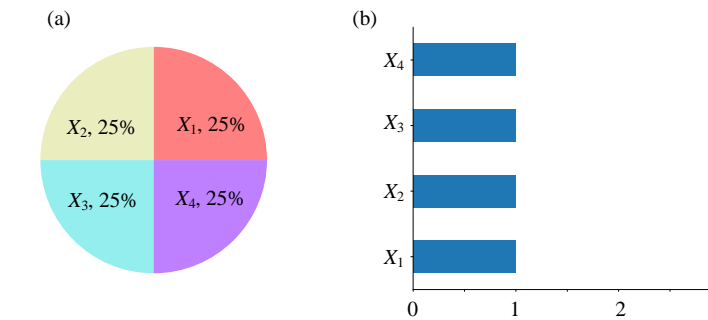
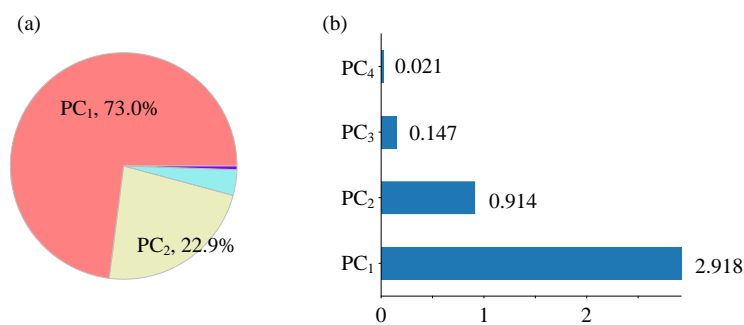
图 26 所示为特征值分解相关性系数矩阵  $P$ ， $P$  的主对角线都是 1， $P$  对角线之外的元素都是线性相关系数。图 27 对比相关性系数矩阵  $P$  和  $A_Z$  热图。同样地， $P$  和  $A_Z$  主对角线之和相同，即  $\text{trace}(P) = \text{trace}(A_Z)$ 。

图 26. 特征值分解相关性系数矩阵  $P$

图 27. 对比相关性系数矩阵  $P$  和  $A_z$  热图

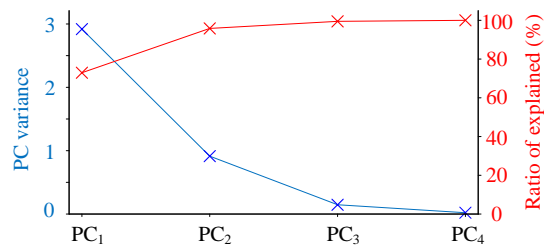
## 分解前后

图 4 中， $X_3$  对方差和  $\text{trace}(\Sigma)$  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  $P$  主对角线成分图 29.  $A_z$  的主对角线成分，相关性系数矩阵  $P$  特征值

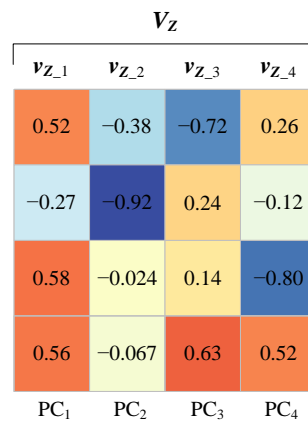
## 陡坡图

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

图 30. 陡坡图，特征值分解相关性系数矩阵  $P$ 

## 特征向量矩阵

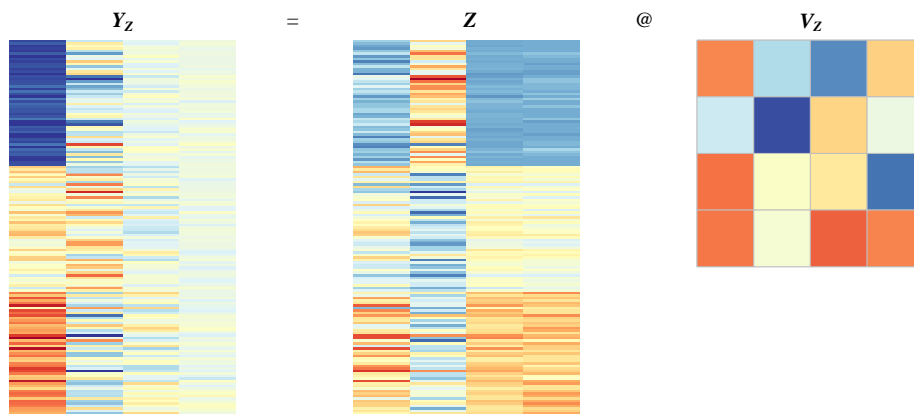
图 31 所示为特征向量矩阵  $V_Z$  热图。这幅图和图 7、图 20 均不同。

图 31. 特征向量矩阵  $V_Z$  热图

## 投影

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

请大家将原数据  $X$ 、中心化  $X_c$  也投影到  $V_Z$  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>

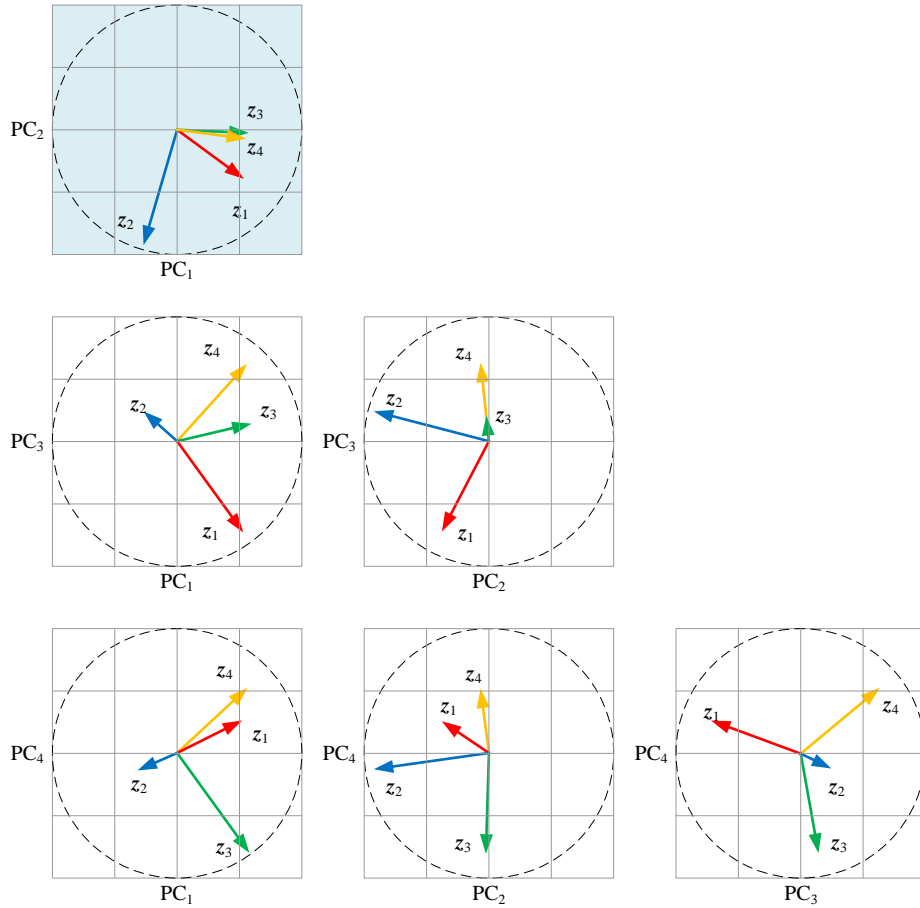
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

图 32. 中心化数据  $Z$  投影到  $V_Z$ 

## 双标图

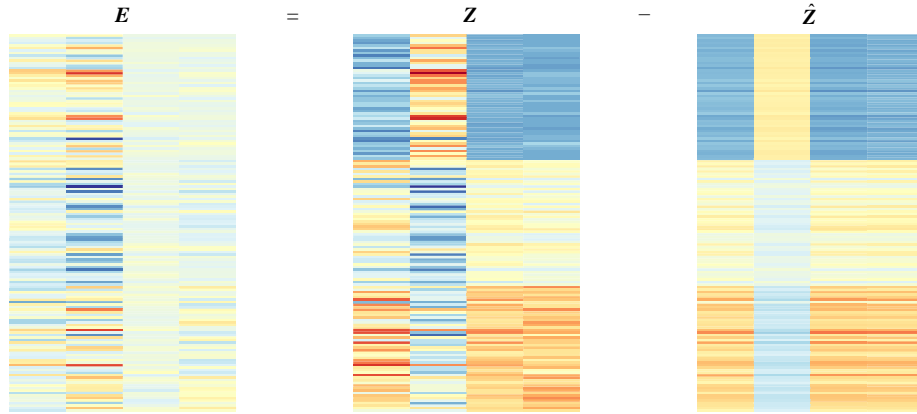
图 33 所示为  $V_Z$  双标图，请大家比较本章三幅双标图。

图 33.  $V_Z$  双标图，特征值分解相关性系数矩阵  $P$ 

## 数据还原、误差

图 34 所示为第一主成分估计  $Z_X$ ：

$$Z_X \approx Z_X v_{X-1} \otimes v_{X-1} \quad (35)$$

图 34. 第一主成分还原  $Z_X$ 

$Z_X$  可以写成：

$$Z_X = (X - E(X))D^{-1} = \sum_{j=1}^D Z_X v_{X-j} \otimes v_{X-j} \quad (36)$$

用  $V_Z$  还原  $X$ ：

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

用  $V_Z$  第一主成分估计  $X$ ：

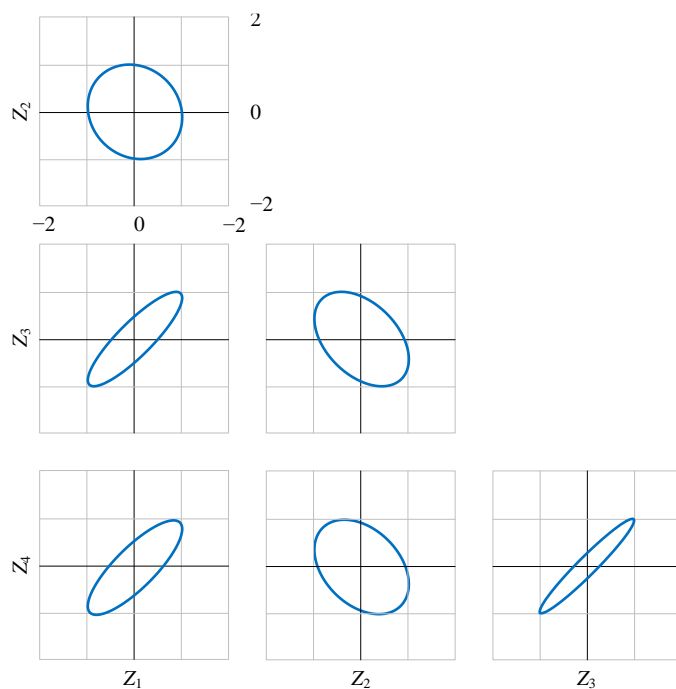
$$X \approx \underbrace{(Z_X v_{X-1} \otimes v_{X-1})}_{\text{First principal}} D + E(X) \quad (38)$$

其中， $D$  起到缩放的作用， $E(X)$  是平移的作用。

### 椭圆：投影之前

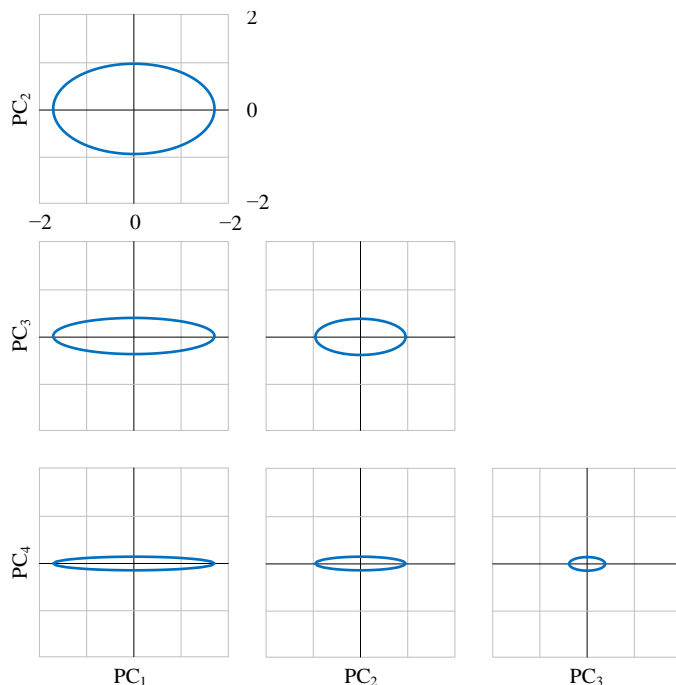
图 35 所示为投影之前相关性系数矩阵  $P$  对应的椭圆。请大家特别和前文协方差矩阵对应椭圆进行比较。



图 35. 马氏距离 1 椭圆，相关性系数矩阵  $P$ 

## 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， $Y_Z$  的协方差矩阵

## 自定义函数

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

Bk7\_Ch16\_01.ipynb 绘制本章大部分图片。这段代码文件自定了很多函数，下面聊聊代码 1。这段代码为自定义函数用来完成 PCA。

**a** 计算原始数据的格拉姆矩阵。为了在数值上和其他方法具有可比性，这个格拉姆矩阵每个元素除以  $(n - 1)$ ；其中， $n$  为样本数。

**b** 对数据去均值。

**c** 计算原始数据的协方差矩阵。

**d** 对数据标准化。

**e** 计算原始数据的相关性系数矩阵。

请大家自行学习 Bk7\_Ch16\_01.ipynb 剩余自定义函数。

```

%% self-defined PCA function

def PCA(X, method = 'demean'):

    n = len(X)
    # number of sample data

    if method == 'original':
        XX = X.dropna()
        GG = (XX.T @ XX)/(n - 1)
        # divided by (n-1) to make results comparable
        variance_V, V = np.linalg.eig(GG)

    elif method == 'demean':
        XX = (X - X.mean()).dropna()
        GG = XX.T @ XX/(n - 1)
        variance_V, V = np.linalg.eig(GG)

    elif method == 'normalize':
        XX = (X - X.mean())/X.std().dropna()
        GG = XX.T @ XX/(n - 1)
        variance_V, V = np.linalg.eig(GG)

    else:
        print('Method does not exist. '
              'Choose from original, demean, and normalize')

    original_variance = np.diag(GG)

    explained_variance_ratio = variance_V / np.sum(variance_V)
    return [explained_variance_ratio,
            variance_V, V,
            original_variance, GG, XX]

```

代码 1. 自定义 PCA 函数 | Bk7\_Ch16\_01.ipynb

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。换句话说，机器学习

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

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。

下一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>