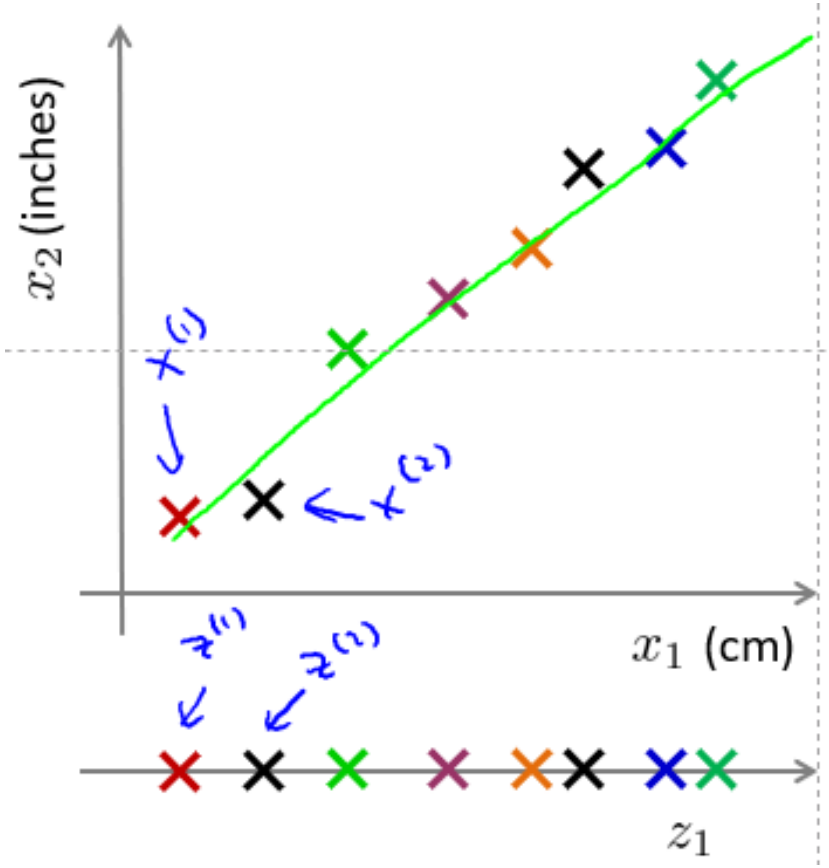
主成分分析
PCA(Principal Component Analysis)

数据压缩2D-1D



Reduce data from 2D to 1D

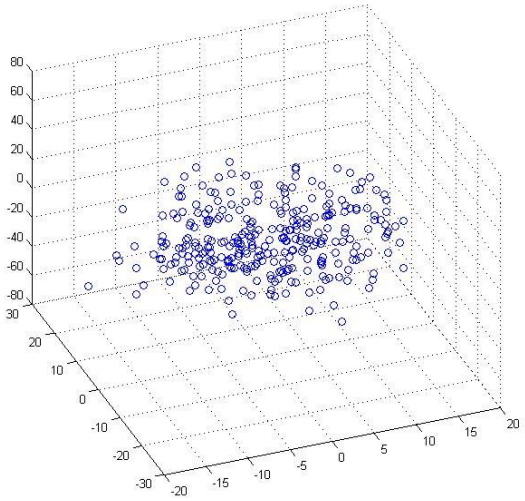
$x^{(1)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(1)} \in \mathbb{R}$

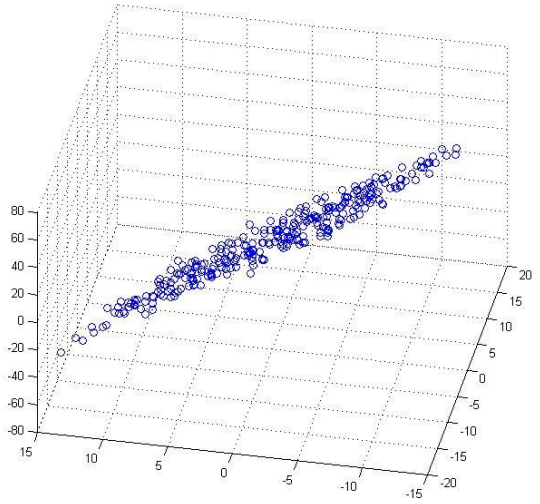
$x^{(2)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(2)} \in \mathbb{R}$

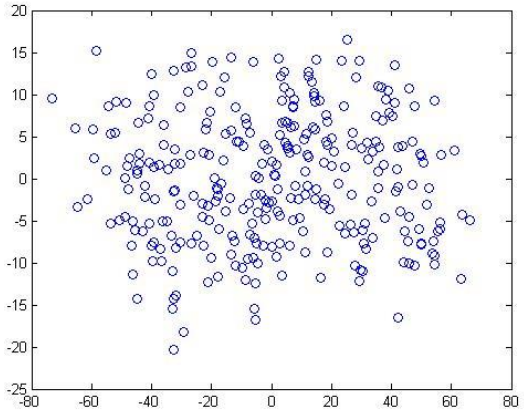
$\vdots$

$x^{(m)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(m)} \in \mathbb{R}$

数据压缩3D-2D


80
60
40
20
0
-20
-40
-60
-80
30
20
10
0
-10
-20
-30
-20
-15
-10
-5
0
5
10
15
20


80
60
40
20
0
-20
-40
-60
-80
15
10
5
0
-5
-10
-15
20
15
10
5
0
-5
-10
-15
-20


20
15
10
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-80
-60
-40
-20
0
20
40
60
80

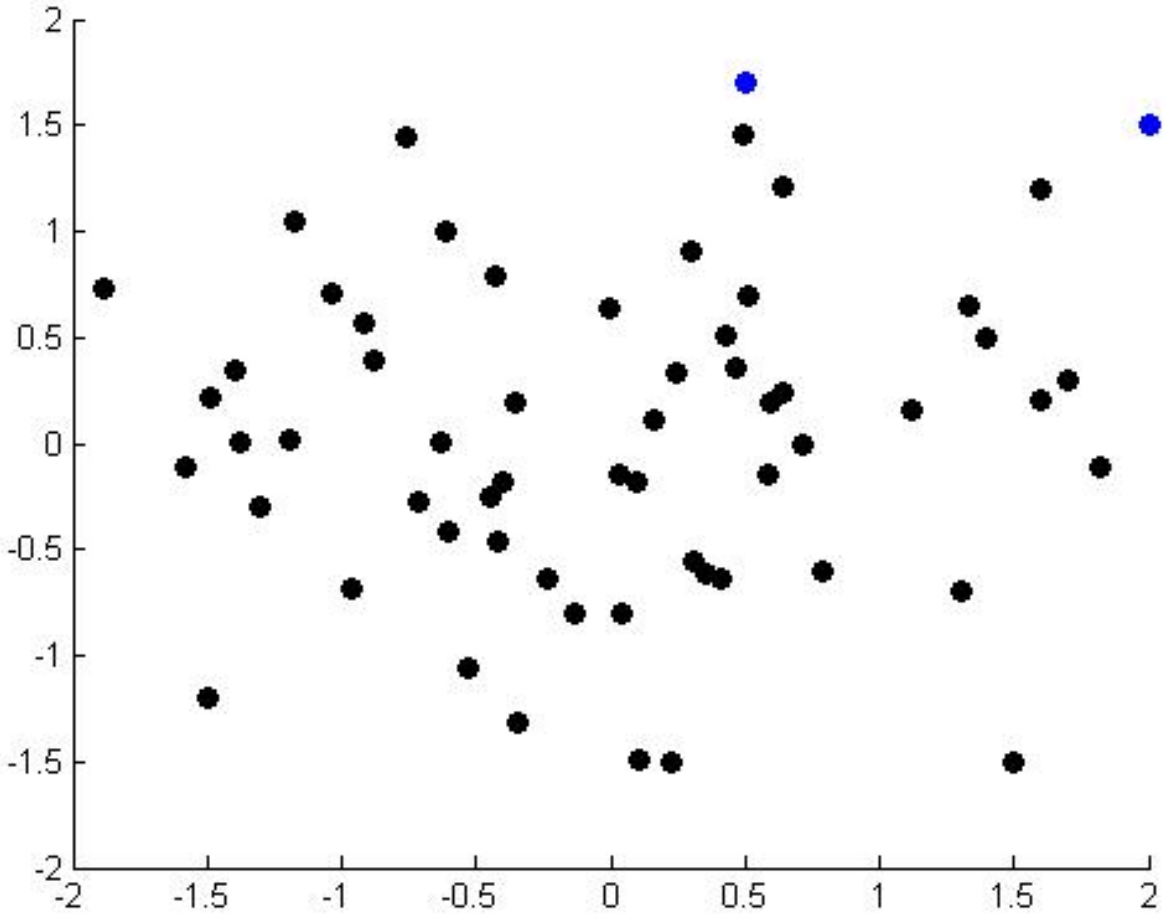
数据可视化

Country	GDP (trillions of US$)	Per capita GDP (thousands of intl. $)	Human Develop-ment Index	Life expectancy	Poverty Index (Gini as percentage)	Mean household income (thousands of US$)	…
Canada	1.577	39.17	0.908	80.7	32.6	67.293	…
China	5.878	7.54	0.687	73	46.9	10.22	…
India	1.632	3.41	0.547	64.7	36.8	0.735	…
Russia	1.48	19.84	0.755	65.5	39.9	0.72	…
Singapore	0.223	56.69	0.866	80	42.5	67.1	…
USA	14.527	46.86	0.91	78.3	40.8	84.3	…
…	…	…	…	…	…	…	

数据可视化

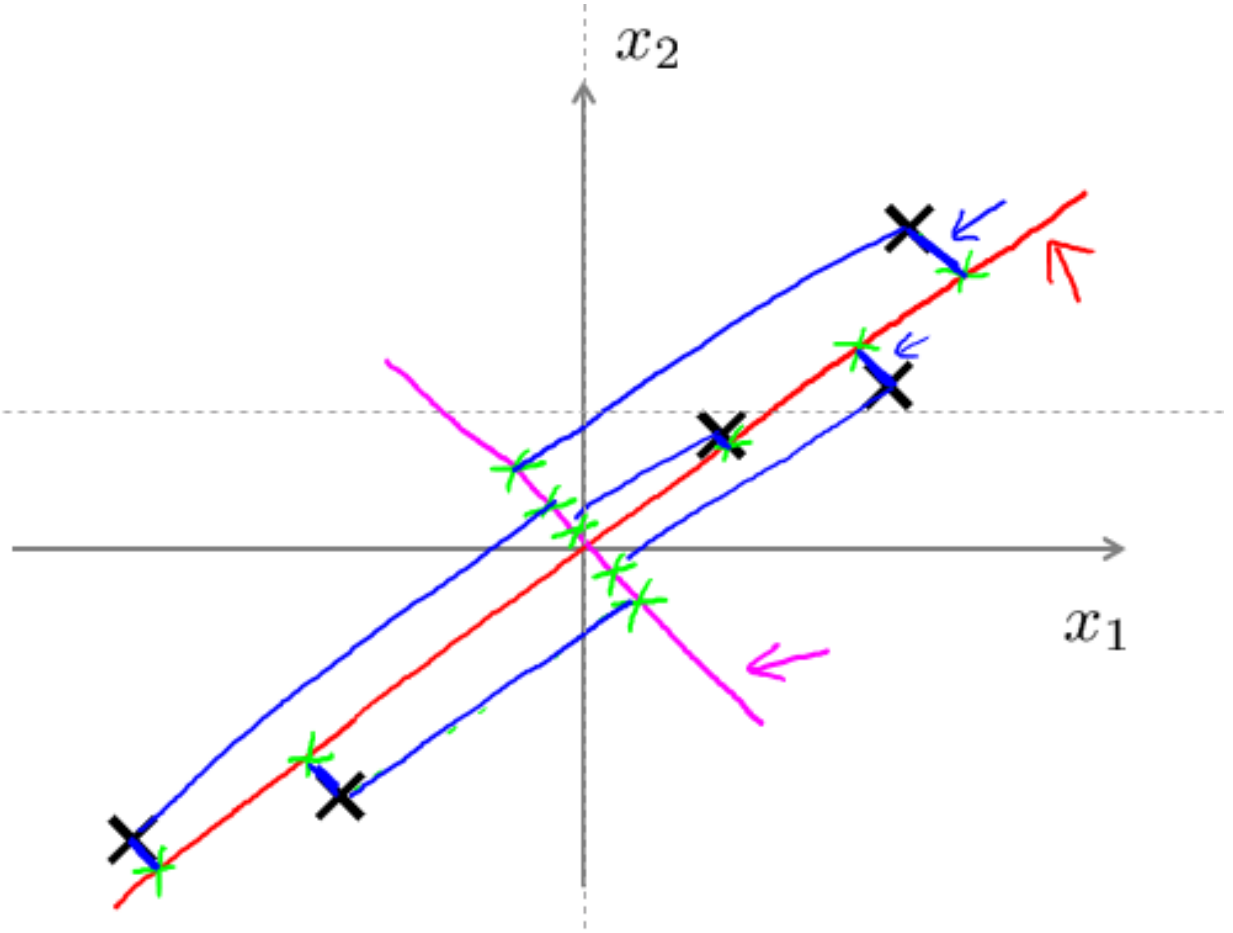
Country		
Canada	1.6	1.2
China	1.7	0.3
India	1.6	0.2
Russia	1.4	0.5
Singapore	0.5	1.7
USA	2	1.5
…	…	…

数据可视化



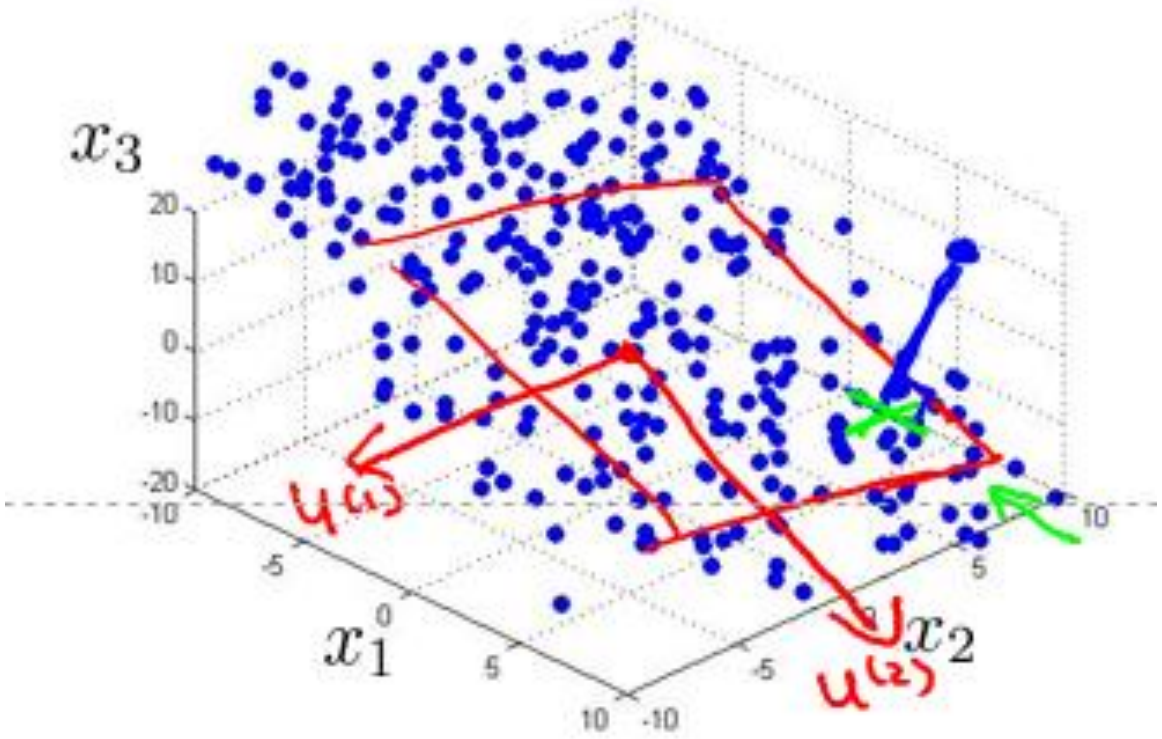
降维分析

找到数据最重要的方向(方差最大的方向)



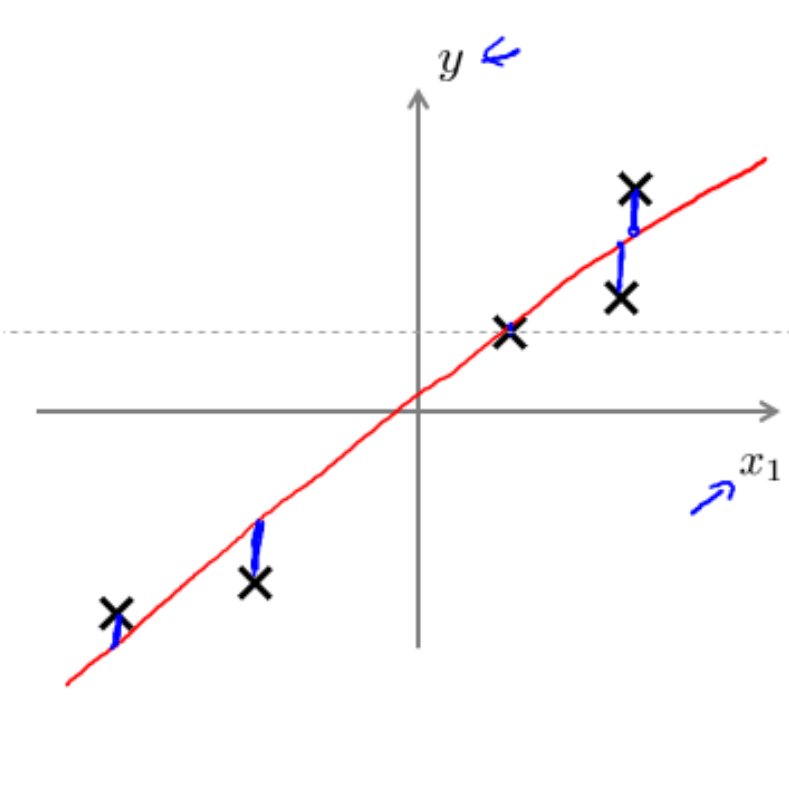
降维分析

第一个主成分就是从数据差异性最大(方差最大)的方向提取出来的，第二个主成分则来自于数据差异性次大的方向，并且要与第一个主成分方向正交。

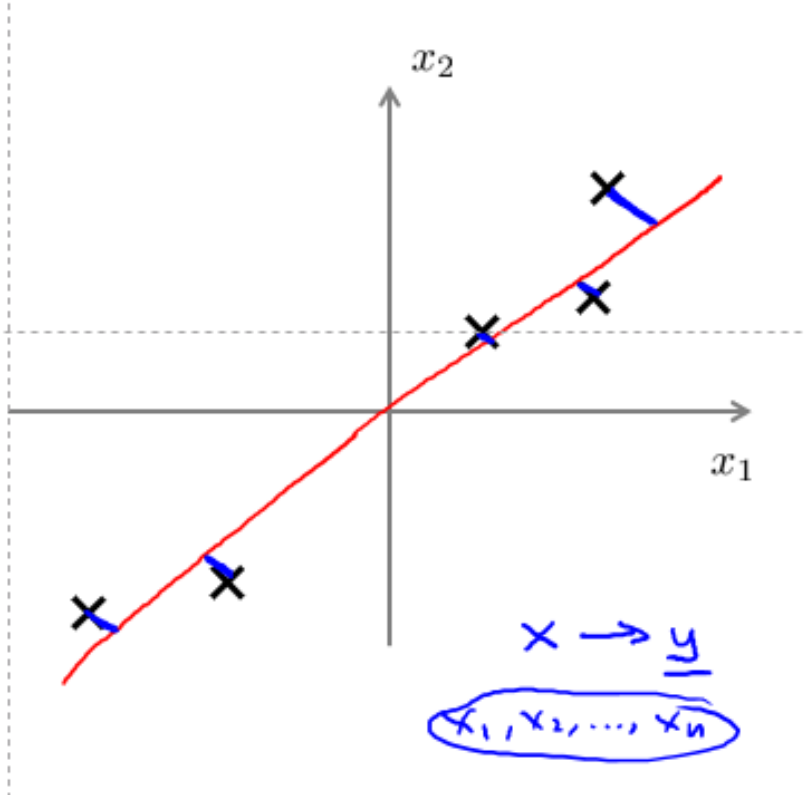


PCA不是线性回归

线性回归



PCA



PCA算法流程

1.数据预处理：中心化$X - \bar{X}$。

2.求样本的协方差矩阵$\frac{1}{\mathrm{m}} X X^T$。

3.对协方差$\frac{1}{\mathrm{m}} X X^T$矩阵做特征值分解。

4.选出最大的k个特征值对应的k个特征向量。

5.将原始数据投影到选取的特征向量上。

6.输出投影后的数据集。

协方差

方差描述一个数据的离散程度：

$$\mathrm{var}(X) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})(X_i - \bar{X})}{n-1}$$

协方差描述两个数据的相关性，接近1就是正相关，接近-1就是负相关，接近0就是不相关。

$$\mathrm{cov}(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{n-1}$$

协方差矩阵

协方差只能处理二维问题，那维数多了自然需要计算多个协方差，我们可以使用矩阵来组织这些 数据。
协方差矩阵是一个对称的矩阵，而且对角线是各个维度的方差。

二维的例子：

$$C = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) \\ cov(y,x) & cov(y,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} x_i^2 & \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} x_i y_i \\ \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} y_i x_i & \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} y_i^2 \end{pmatrix}$$

三维的例子：

$$C = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) & cov(x,z) \\ cov(y,x) & cov(y,y) & cov(y,z) \\ cov(z,x) & cov(z,y) & cov(z,z) \end{pmatrix}$$

协方差矩阵

n个特征，m个样本。n行m列

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(m)} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_n^{(1)} & \dots & x_n^{(m)} \end{bmatrix}$$

n行m列乘m行n列->n行n列

$$\boldsymbol{XX^T} = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \dots & \Sigma_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \Sigma_{n1} & \dots & \Sigma_{nn} \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) \\ cov(y,x) & cov(y,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\sum_i^m x_i^2 & \frac{1}{m}\sum_i^m x_i y_i \\ \frac{1}{m}\sum_i^m y_i x_i & \frac{1}{m}\sum_i^m y_i^2 \end{pmatrix}$$

特征值与特征向量

通过数据集的协方差矩阵及其特征值分析，我们可以得到协方差矩阵的特征向量和特征值。我们需要保留k个维度的特征就选取最大的k个特征值。

PCA-简单例子