Principal Component Analysis - PCA

Mariusz Godlewski, Piotr Kędzierski

22 lutego 2026

Wyprowadzenie Wzoru

Konstrukcja danych, założenia i dowód

Legenda Symboli Matematycznych

Macierz A transponowana: A^T

Iloczyn skalarny/wewnętrzny: $x \cdot y = \langle x, y \rangle = x^T y$

Długość/norma wektora: $\|x\|$

Supremum po zmiennej a, w zbiorze/rodzinie X: $\sup\limits_a X$

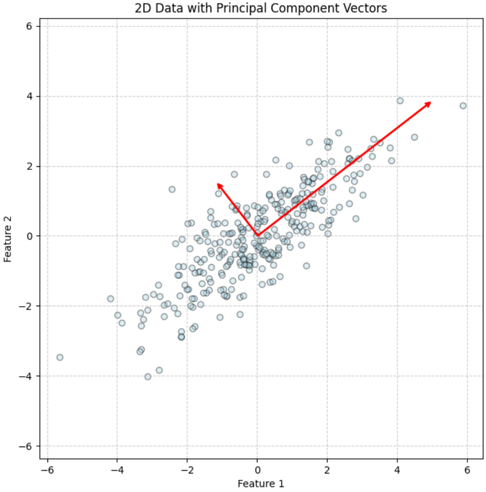
Kowariancja zmiennych X i Y: $\operatorname{cov}(X, Y)$

Konstrunkcja Macierzy Danych

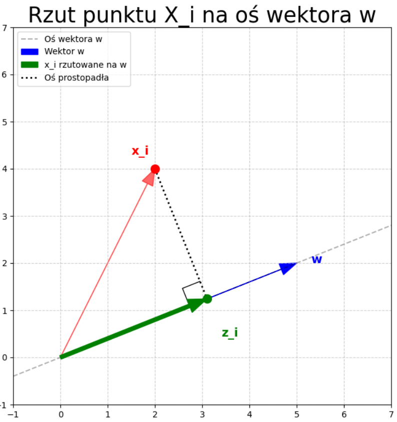
Na początku zdefiniujemy, jak wyglądają nasze dane. Wektory X_i, o wymiarach $d \times 1$, reprezentują obserwacje o d cechach. Natomiast $\mathbb{X}$ $(n \times d)$ jest tablicą składającą się z transponowanych wektorów X_i.

$$X_i = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix} \qquad \mathbb{X} = \begin{bmatrix} — & X_1^T & — \\ — & X_2^T & — \\ & \vdots & \\ — & X_n^T & — \end{bmatrix}$$

Wizulalizacja głównych składowych w 2D



Rzut prostokątny



$$||w|| = 1$$

$$z_i = \langle X_i, w \rangle = X_i^T w$$

Konstrukcja macierzy kowariancji 1

Wzór na kowariancję: $\mathrm{cov}(X, Y) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$

W dalszej części zakładamy, że zmienne są wyśrodkowane względem swoich średnich ($\bar{x} = \bar{y} = 0$). Wtedy w naszej macierzy $\mathbb{X}$, kowariancję j-tej i k-tej zmiennej możemy zapisać w postaci

$$\mathrm{cov}(j, k) = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n} x_{ij}x_{ik}$$

Gdzie elemnt x_{ij} jest i-tą obserwacją j-tej zmiennej

Konstrukcja macierzy kowariancji 2

Przyjrzyjmy się teraz macierzy

$$M = \mathbb{X}^T \mathbb{X}$$

a konkretnie elementowi znajdującemu się w j-tym wierszu i k-tej kolumnie, który oznaczymy jako M_{jk}. Ze wzoru na mnożenie macierzy wiemy, że jest to iloczyn skalarny k-tej kolumny $\mathbb{X}$ oraz j-tego wiersza $\mathbb{X}^T$, czyli j-tej kolumny $\mathbb{X}$. Dzięki temu otrzymujemy

$$M_{jk} = x_{1j}x_{1k} + x_{2j}x_{2k} + \cdots + x_{nj}x_{nk} = \sum_{i=0}^{n} x_{ij}x_{ik} = n \operatorname{cov}(j, k)$$

Łatwo wtedy zauważyć, że macierz kowariancji S, to

$$S = \frac{1}{n} M = \frac{1}{n} \mathbb{X}^T \mathbb{X}$$

Nasz Cel

Naszym zadaniem będzie znalezienie takiego wektora w, który zmaksymalizuje wariancję, gdy rzutujemy na niego punkty X_i. Przy tym założymy, że dane są znormalizowane (wszystkie cechy mieszczą się w przedziale $[0, 1]$) i mają średnią $\bar{X}_i = 0$.

Dodatkowo, ustalimy długość wektora $||w|| = 1$, żeby ona sama w sobie nie wpływała na otrzymywaną wariancję.

Obliczanie Wariancji 1

$$\text{wariancja} = \sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(z_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i^T w)^2 = \frac{1}{n}(\mathbb{X}w)^T\mathbb{X}w$$

$$= w^T\left(\frac{1}{n}\mathbb{X}^T\mathbb{X}\right)w = w^T S w$$

S jest macierzą kowariancji. Jest ona symetryczna, dlatego

$$v_1 \perp v_2 \perp \ldots \perp v_d, \qquad ||v_i|| = 1$$

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_d, \qquad \lambda_i \in \mathbb{R}$$

Gdzie v_i są wektorami własnymi S, a λ_i odpowiadającymi im wartościami własnymi.

Obliczanie Wariancji 2

Wektory v_i tworzą przestrzeń ortonormalną, dlatego możemy zapisać wektor w jako kombinację liniową:

$$w = \sum_{i=1}^{d} c_i v_i$$

Korzystając z warunku długości wektora w, możemy ograniczyć wartości współczynników c_i

$$||w|| = 1 \implies \left(\sum_{i=1}^{d} c_i v_i \right)^T \sum_{i=1}^{d} c_i v_i = 1 \implies \sum_{i=1}^{d} c_i^2 = 1$$

Obliczanie Wariancji 3

Podstawiamy nowy wzór na w, pamiętając, że wektory własne spełniają równanie $Sv = \lambda v$.

$$Sw = S\left(\sum_{i=1}^{d} c_i v_i\right) = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i c_i v_i$$

$$w^T S w = \left(\sum_{i=1}^{d} c_i v_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{d} \lambda_i c_i v_i\right) = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i c_i^2$$

Co daje nam nowy wzór na wariancję:

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i c_i^2$$

Maksymalizacja Wariancji

Przypomnijmy sobie, że naszym celem jest znalezienie takiego wektora w, który zmaksymalizuje wariancję, dlatego

$$\sup \sigma^2 = \sup_{c_i} \sum_{i=1}^{d} \lambda_i c_i^2 = \max\{\lambda_i; \quad i \in \{1, 2, \ldots, d\}\}$$

Z tego wynika, że $c_i = 1$, gdy $\lambda_i = \max\{\lambda\}$, w przeciwny razie $c_i = 0$. Dzięki temu, wnioskujemy, że wektor w maksymalizujący

wariancję, jest wektorem własnym macierzy S, odpowiadającym największej wartości własnej.

$$w = v_1 \quad \text{oraz} \quad \sigma^2 = \lambda_1$$