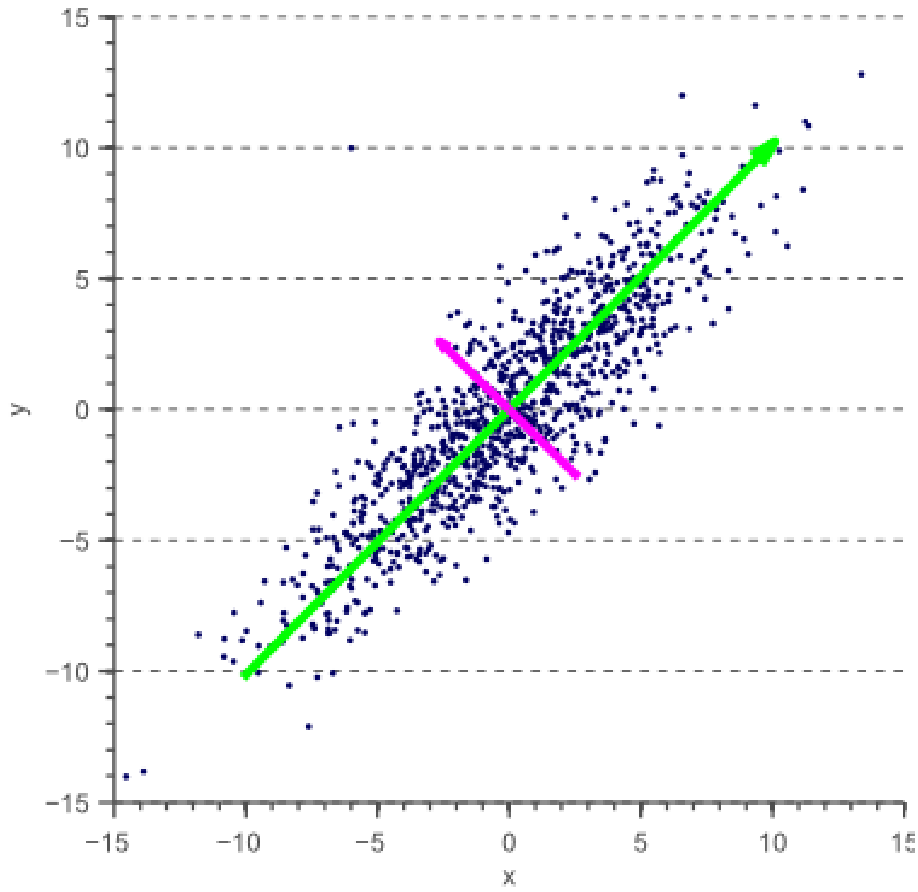
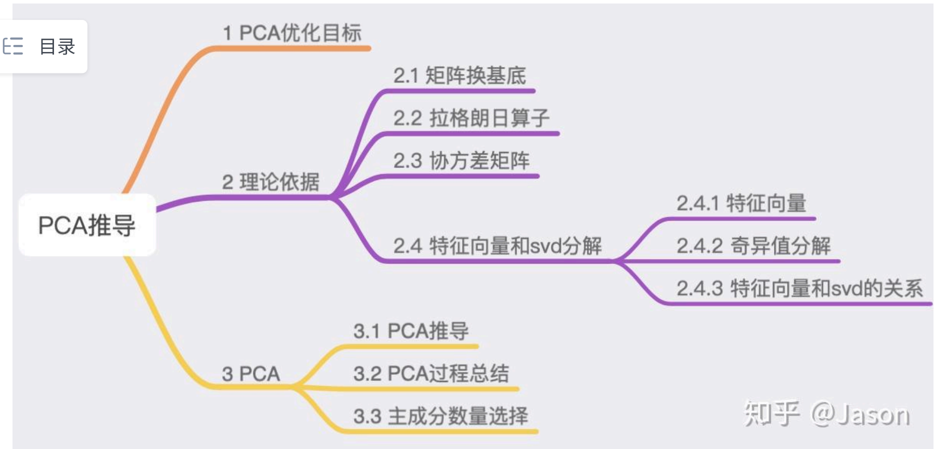


详细推导PCA算法

怪兽
一个有点理想的算法攻城狮

本文主要思路如下：



1 PCA优化目标

PCA（主成分分析⁺）是一种数据降维⁺的方法，即用较少特征地数据表达较多特征地数据（数据压缩，PCA属于有损压缩）。PCA推导有两种主要思路：

1. 最大化数据投影后的的方差⁺（让数据更分散）
2. 最小化投影造成的损失

本文采用第一种思路完成推导过程，下图中旋转的是新坐标轴，每个数据点在改坐标轴上垂直投影，最佳的坐标轴为数据投影后的数据之间距离最大。

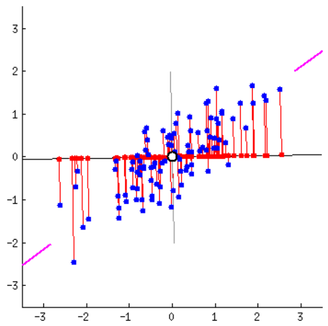


图1 数据投影到新坐标轴

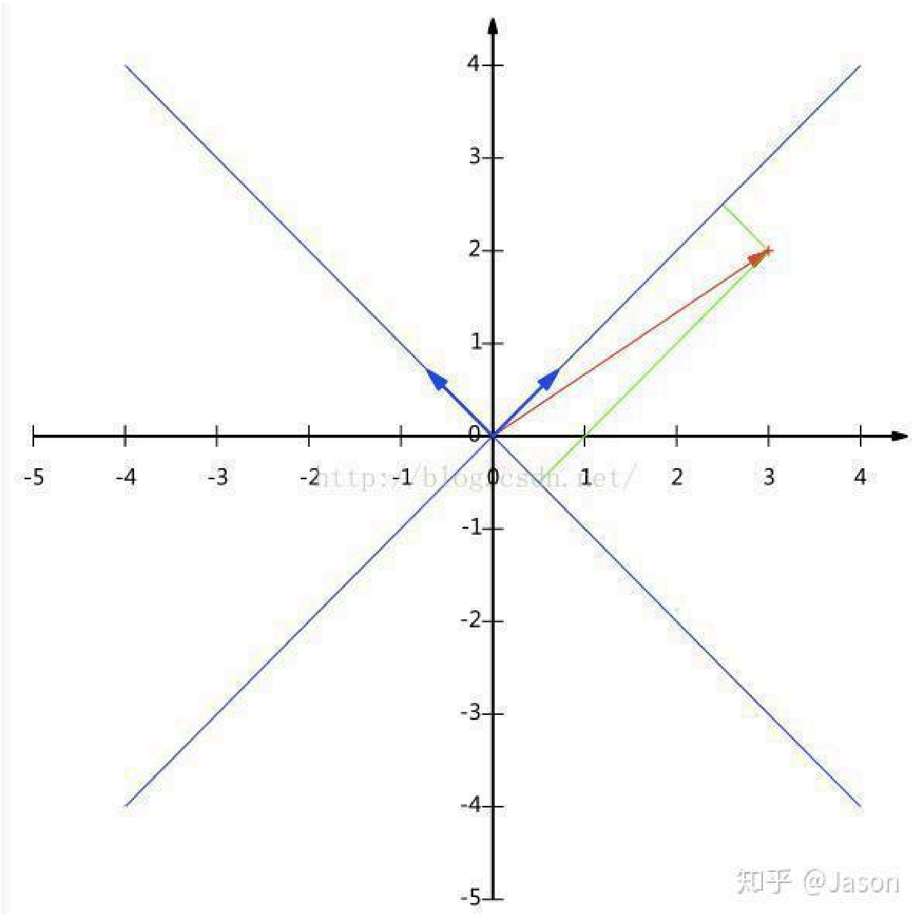
要完成PCA推导过程，需要如下第 2 章部分的理论依据

2 理论依据

2.1 矩阵换基底

坐标变换地目标是，找到一组新的正交单位向量，替换原来的正交单位向量。下面通过具体例子说明。

假设存在向量 $\vec{a}=\begin{bmatrix}3\\2\end{bmatrix}$ ，要变换导以 $\vec{u}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix},\vec{v}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$ 为新基底地坐标上，求在心坐标系中的坐标



∵ 向量 $\vec{a}$ 在向量 $\vec{u}$ 上的投影距离 s：

$$s=||\vec{a}||\cdot\cos\theta=\frac{\vec{a}\cdot\vec{u}}{||\vec{u}||}=\vec{a}\cdot\vec{u}$$

其中：θ 表示两个向量之间的夹角

$$\therefore a_u=\vec{u}^T\cdot\vec{a},\ a_v=\vec{v}^T\cdot\vec{a}$$

$\therefore$ 向量 $\vec{a}$ 在新坐标系中的坐标可以表示为：

$$\vec{a}_{new}=[\vec{u}\quad\vec{v}]^T\cdot\vec{a}=\begin{bmatrix}\vec{u}^T\cdot\vec{a}\\ \vec{v}^T\cdot\vec{a}\end{bmatrix}$$

如果矩阵 A 的列向量分别表示原来坐标系中的点，那么在新坐标系中的坐标为：

$$A_{new}=[\vec{u}\quad\vec{v}]^T\cdot A$$

如果 $\vec{a}_{center}$ 表示一系列数据点的中心，那么可以证明：

$$\vec{a}_{newcenter}=[\vec{u}\quad\vec{v}]^T\cdot\vec{a}_{center}$$

经过上面的变换之后，新坐标系相比原坐标系顺时针旋转了45度；$\vec{a}$ 相对新坐标系位置和相对原坐标系位置发生了逆时针旋转45度。即：上述变换过程为向量的**旋转**过程，旋转的角度=-坐标系旋转角度

如果 $||\vec{u}||\neq 1,||\vec{v}||\neq 1$，那么：

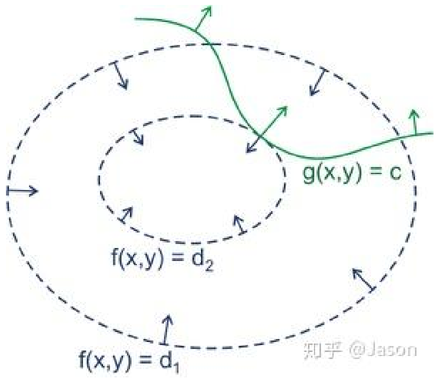
$$\vec{u}^T\cdot\vec{a}=s\cdot||\vec{u}||$$
$$\vec{v}^T\cdot\vec{a}=s\cdot||\vec{v}||$$

即：$\vec{a}_{new}$ 相比 $\vec{a}$，2个坐标分别放大了 $||\vec{u}||$ 倍和 $||\vec{v}||$ 倍。即向量发生了**伸缩**。

2.2 拉格朗日乘子法⁺

拉格朗日乘子法主要提供了一种求解函数在约束条件下极值的方法。下面还是通过一个例子说明。

假设存在一个函数 $f(x,y)$，求该函数在 $g(x,y)=c$ 下的极值（可以是极大，也可以极小）



通过观察我们发现，在极值点的时候两个函数必然相切，即此时各自的导数成正比，从而：

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\lambda\frac{\partial g}{\partial x}$$
$$\frac{\partial f}{\partial y}=\lambda\frac{\partial g}{\partial y}$$
$$g(x,y)=c$$

通过联立上述三个公式，既可以求出最终结果。拉格朗日算子的主要思路同上，不过他假设了一个新的函数：

$$F(x,y,\lambda)=f(x,y)+\lambda[c-g(x,y)]$$

然后分解求：

$$\frac{\partial F}{\partial x}=0$$
$$\frac{\partial F}{\partial y}=0$$
$$\frac{\partial F}{\partial \lambda}=0$$

从而完成求解过程

2.3 协方差矩阵+

假设有一组数据：

样本编号	变量x（如发传单数量）	变量y（如购买数量）	变量z（如购买总价）
1	1	2	3
2	35	25	55
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$

协方差研究的目的是变量（特征）之间的关系，也就是上表中的发传单数量、购买数量、购买总额之间的相关情况

上表数据用矩阵表示为：

$$X=\begin{bmatrix}1 & 35 & \cdots\\ 2 & 25 & \cdots\\ 3 & 55 & \cdots\end{bmatrix}$$

那么两两变量之间的关系：

$$\begin{gathered}cov(x,y)=E[(1-E(x))(2-E(y))+(35-E(x))(25-E(y))+\cdots]\\ cov(x,z)=E[(1-E(x))(3-E(z))+(35-E(x))(55-E(z))+\cdots]\\ \cdots\end{gathered}$$

如果E(x)=E(y)=E(z)=0（可以通过数据初始化实现），那么上述的协方差关系可以用如下矩阵乘法表示：

$$cov(X)=\frac{1}{m}XX^T=\begin{bmatrix}cov(x,x) & cov(x,y) & cov(x,z)\\ cov(y,x) & cov(y,y) & cov(y,z)\\ cov(z,x) & cov(z,y) & cov(z,z)\end{bmatrix}$$

如果把对角线上的数据加起来会发现：

$$\begin{gathered}cov(x,x)+cov(y,y)+cov(z,z)\\ =E[([(1-E(x)]^2+[2-E(y)]^2+[3-E(z)]^2)+\cdots]=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}||X_i-X_{center}||^2\end{gathered}$$

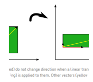
也就是说每个样本点到样本中心距离的平方和的平均 = 样本各个特征方差和（自身协方差）= $\sum diag(\frac{1}{m}XX^T)$，即样本的方差

2.4 特征向量和奇异值分解+

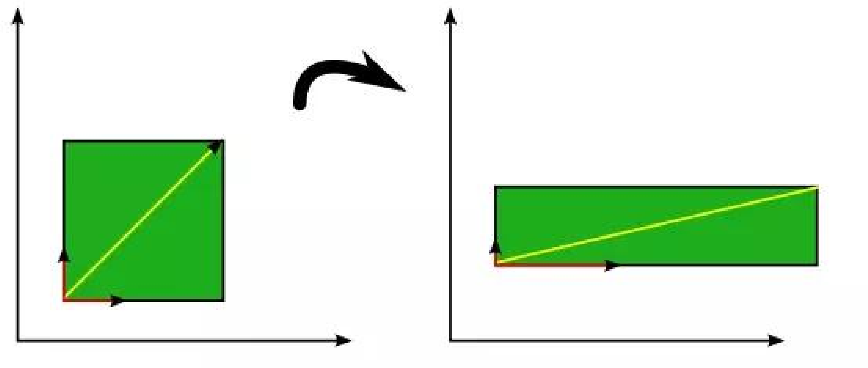
2.4.1 特征向量

参考：

特征值和特征向量
www.jianshu.com/p/f5e72e6ca289



假设：左侧矩形由 $\begin{bmatrix}\vec{i} & \vec{j}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}$ 定义，右侧矩形由 $\begin{bmatrix}\vec{i'} & \vec{j'}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 & 0 \\ 0 & 0.5\end{bmatrix}$ 定义。



Eigenvectors (red) do not change direction when a linear transformation (e.g. scaling) is applied to them. Other vectors (yellow) do.

根据 2.1 矩阵拉伸变换的结果，变换矩阵 $A = \begin{bmatrix}\vec{u}^T \\ \vec{v}^T\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 & 0 \\ 0 & 0.5\end{bmatrix}$ ，即：

$$A \cdot \begin{bmatrix}\vec{i} & \vec{j}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\vec{i'} & \vec{j'}\end{bmatrix}$$

在应用变换矩阵变换时，我们发现存在与上图中红色向量平行的向量 $\vec{a}$ ，他们总满足：

$$A \cdot \vec{a} \quad // \quad \vec{a}$$

即：

$$A \cdot \vec{a} = \lambda \cdot \vec{a}$$

所以：红色的特征向量不受变换矩阵的影响，仍保持原来的方向，我们称这类向量为变换矩阵A的特征向量，对应的 λ 为特征值。又因为特征向量有很多个，即：

$$A \cdot \vec{a_i} = \lambda_i \cdot \vec{a_i}$$

所以：

$$A \cdot \begin{bmatrix}\vec{a_1} & \vec{a_2} & \ldots\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\vec{a_1} & \vec{a_2} & \ldots\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots\end{bmatrix} \Rightarrow A = Q \cdot \Sigma \cdot Q^{-1}$$

其中：Q的列向量都是A变换矩阵的特征向量

另外，在做旋转变换时，要求变换前后的坐标维度不发生改变，即A须为方阵

综上：如果方阵A满足 $A = Q \cdot \Sigma \cdot Q^{-1}$ ，那么Q为特征向量， Σ 为对应的特征值

2.4.2 奇异值分解

奇异值分解（svd: singular value decomposition）定义：对于任意的矩阵A，存在：

$$A_{m\times n}=U_{m\times m}\cdot\Sigma_{m\times n}\cdot V_{n\times n}^T$$

其中：

$$\begin{aligned}U^T\cdot U=I_m\\V^T\cdot V=I_n\end{aligned}$$

即：U的列向量两两正交且模为1，V列向量两两正交且模为1，即：

$$\begin{aligned}U^T=U^{-1}\\V^T=V^{-1}\end{aligned}$$

2.4.3 特征向量和奇异值分解的关系

对于任意矩阵 A ，对A做svd有：

$$AA^T=U\Sigma V^T\cdot V\Sigma U^T=U\Sigma^2U^{-1}$$

令 $\Sigma'=\Sigma^2$ ，则：

$$\begin{gathered}AA^T=U\Sigma'U^{-1}\\ \text{满足}A=Q\Sigma Q^{-1}\text{特征向量定义}\end{gathered}$$

所以 AA^T 能实现特征分解，又因为：

$$AA^T=\underbrace{U''\Sigma''V''^T}_{svd}$$

所以：

$$\begin{aligned}&U=U''\\&\Sigma'=\Sigma''\\&U^{-1}=V''^T\Rightarrow U=V''\end{aligned}$$

因此：对 AA^T 做SVD，那么得到的U''列向量为特征向量（对应A的U矩阵）， Σ'' 为特征值对角阵

同理：对 A^TA做SVD，那么得到的U''列向量为特征向量（对应A的V矩阵）， Σ'' 为特征值对角矩阵

3 PCA

3.1 PCA推导

PCA的目标是找到一组新的正交基 $\{u_1,u_2,\cdots,u_k\}$ （从n维下降到k维），使得数据点在该正交基构成的平面上投影后，数据间的距离最大，即数据间的方差最大。如果数据在每个正交基上投影后的方差最大，那么同样满足在正交基所构成的平面上投影距离最大。

根据2.1，设正交基 u_j ，数据点 x_i 在该基底上的投影距离为 $x_i^T\cdot u_j$ ，所以所有数据在该基底上投影的方差 J_j 为：

$$J_j=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^m(x_i^Tu_j-x_{center}^Tu_j)^2$$

其中：m为样本数量，在数据运算之前对数据 x 进行0均值初始化，即 $x_{center}=0$ ，从而：

$$J_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i^T u_j)^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(u_j^T x_i \cdot x_i^T u_j) = u_j^T \cdot \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i x_i^T) \cdot u_j$$

所以：

$$J_j = u_j^T \cdot \frac{1}{m}(x_1 x_1^T + x_2 x_2^T + \cdots + x_m x_m^T) \cdot u_j = u_j^T \cdot \frac{1}{m}(\begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}) \cdot u_j == \frac{1}{m} u_j^T X X^T u_j$$

由于 $\frac{1}{m}XX^T$ 为常数，这里假设 $S = \frac{1}{m}XX^T$ ，则： $J_j = u_j^T \cdot S \cdot u_j$ ，根据PCA目标，我们需要求解 J_j 最大时对应的 u_j

根据 2.2 中的拉格朗日算子（求极值）求解：

$$J_j = u_j^T S u_j \\ s.t.\ u_j^T u_j = 1$$

则构造函数：

$$F(u_j) = u_j^T S u_j + \lambda_j (1 - u_j^T u_j)$$

求解 $\frac{\partial F}{\partial u_j} = 0$，得：

$$2S \cdot u_j - 2\lambda_j \cdot u_j = 0 \quad \Rightarrow \quad S u_j = \lambda_j u_j$$

结合2.4.1则：当 u_j、λ_j 分别为S矩阵的特征向量、特征值时， J_j 有极值，把上述结果带回公式得：

$$J_{j_m} = u_j^T \lambda_j u_j = \lambda_j$$

所以对于任意满足条件的正交基，对应的数据在上面投影后的方差值为S矩阵的特征向量，从而：

$$J_{max} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j，\lambda\text{从大到小排序}$$

所以投影正交基为S的特征向量中的前k个最大特征值对应的特征向量。

接下来对S进行特征分解，根据2.4.3特征向量和svd的关系结论，S的特征向量集合：

$$U = U\ of\ svd(S) = U\ of\ svd(\frac{1}{m}XX^T)$$

另外，由于 $S = \frac{1}{m}XX^T$ 由于X已0均值处理，根据2.3 协方差矩阵定义：S为数据集X的协方差矩阵。

综上，即可得到满足投影后数据距离最大的新的正交基 $\{u_1, u_2, \cdots, u_k\}$

因此：

$$X_{new_{k\times m}} = \begin{bmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_k^T \end{bmatrix}_{k\times n} \cdot X_{n\times m}$$

3.2 PCA过程总结

PCA流程如下：

1. 初始化X，使得所有样本之间的特征值均值为0，同时应用feature scaling，缩放到-0.5～0.5；
2. 计算X的协方差矩阵S;
3. 对S进行SVD分解，U即我们要求的新坐标系集合，Σ 为特征值集合（计算时特征值都会大于0，且结果会从小到大排列）；
4. 按照特征值从大到小排序，要降低为k维，那么取前k个特征值对应的特征向量，就是新的k个坐标轴
5. 把X映射到新的坐标系中，完整降维操作;

根据之前的公式，做PCA投影后，投影数据的方差：

$$Var_{X_{project}} = \sum_{j=1}^{k} J_j = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j$$

又因为：数据从n维投影新的n维的坐标系，方差不会发生改变（向量的模长度相等且为1，可以用2D坐标系投影到45-135度坐标系验证），即：

$$Var_X = Var_{X_{project}} = \sum_{j=1}^{n} J_j = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j$$

即：X的协方差矩阵的特征值和对应X的方差

3.3 主成份数量的选择

PCA使得数据从n维降低为k维度，接下来介绍如何选择合适的k。一般选择标准为：投影前后方差比例值，作为k值的选择标准。距离来说，我们期望：

$$\frac{Var_{X_{project}}}{Var_X} \geq q$$

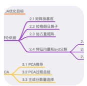
其中q一般选择0.99。根据PCA总结中特征协方差矩阵和X方差的关系得：

$$\frac{Var_{X_{project}}}{Var_X} = \frac{\sum_{j=1}^{k} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{n} \lambda_j} \geq 0.99$$

因此主成份数量k根据上述公式求得满足条件的最小k

本文同时发布于CSDN博客：

详细推导PCA算法（包括算法推导必备的知识） - 怪兽 - CSDN博客
blog.csdn.net/QQ2627866800/article/deta…



编辑于 2021-12-01 17:37

10 条评论

默认 最新

脑子空空无所谓

PCA流程里面第三步，难道不是 对X进行SVD分解，对S求特征值特征向量

2019-03-17 回复 2

随遇则安

既然说S是常数，那怎么最后又写是的是S矩阵，然后根据是矩阵又得出推导的那些量是特征向量和特征值呢?

2023-10-22 回复 1

悄然改变

这推导过程有问题

2024-06-03 回复 喜欢

clay

3.1最开始这里，“如果数据在每个正交基上投影后的方差最大，那么同样满足在正交基所构成的平面上投影距离最大”，应该是投影距离最小吧

2019-11-02 回复 3

许光达

推导的比较清晰

2023-04-01 回复 喜欢

cyh

写得很详细，但是我想问一下，在3.1的推导中，由于u是正交基，求极值的约束条件不应该只有uj乘以uj的转置为1，还应该满足不同的u之间的内积为0。这边是如何满足这个约束条件的呢

2022-08-10 回复 喜欢

小甜同学

想问下，为什么E(X)=0,E(Y)=0,E(Z)=0之后，就可以用下面的式子表示了，

2021-09-09 回复 喜欢

Prac

很详细，但是2.3协方差矩阵中的X的内容是不是写成了转置呢？是不是应该是[[1,2,3],[35,25,55],...]呢?

2019-04-24 回复 喜欢

怪兽 作者

一般我们处理数据时，一条数据作为一个向量，而向量我们默认是列向量

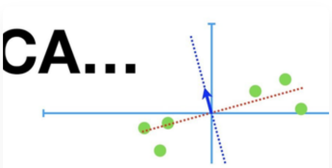
2019-04-26 回复 1

Nathan Wan

相当不错，深入浅出

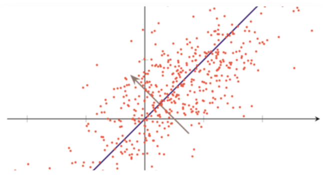
2019-02-07 回复 喜欢

推荐阅读



你真的懂PCA了?

一文



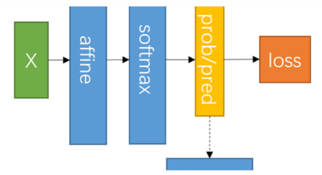
PCA算法总结

yhang... 发表于路曼曼其修...

PCA算法

原文来自 主成分分析（PCA）原理总结 - 刘建平Pinard - 博客园，文章对PCA算法做了详细介绍，总结如下。主成分分析（Principal components analysis，以下简称PCA）是最重要的降维方法之一…

漫漫成长



【机器学习基础】感知机Softmax loss函数梯度求导…

衍衍子 发表于EECS体...