> zhuanlan.zhihu.com

协方差矩阵在统计学和机器学习中随处可见，一般而言，可视作**方差**和**协方差**两部分组成，即方差构成了对角线上的元素，协方差构成了非对角线上的元素。本文旨在从几何角度介绍我们所熟知的协方差矩阵。

1. 方差和协方差的定义

> 在统计学中，**方差**是用来度量**单个随机变量**的**离散程度**，而协方差则一般用来刻画**两个随机变量**的**相似程度**，其中，**方差**的计算公式为
> $$\sigma_x^2=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2$$
> 其中，n 表示样本量，符号 $\bar{x}$ 表示观测样本的均值，这个定义在初中阶段就已经开始接触了。

在此基础上，**协方差**的计算公式被定义为

$$\sigma(x,y)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$$

在公式中，符号 $\bar{x},\bar{y}$ 分别表示两个随机变量所对应的观测样本均值，据此，我们发现：方差 σ_x^2 可视作随机变量 x 关于其自身的协方差 $\sigma(x,x)$.

2. 从方差 / 协方差到协方差矩阵

根据方差的定义，给定 d 个随机变量 $x_k,k=1,2,\ldots,d$，则这些**随机变量的方差**为

$$\sigma(x_k,x_k)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{ki}-\bar{x}_k)^2,k=1,2,\ldots,d$$

其中，为方便书写，x_{ki} 表示随机变量 x_k 中的第 i 个观测样本，n 表示样本量，每个随机变量所对应的观测样本数量均为 n 。

对于这些随机变量，我们还可以根据协方差的定义，求出**两两之间的协方差**，即

$$\sigma(x_m,x_k)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{mi}-\bar{x}_m)(x_{ki}-\bar{x}_k)$$

因此，**协方差矩阵**为

$$\Sigma=\begin{bmatrix}\sigma(x_1,x_1) & \cdots & \sigma(x_1,x_d)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \sigma(x_d,x_1) & \cdots & \sigma(x_d,x_d)\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{d\times d}$$

其中，对角线上的元素为各个随机变量的方差，非对角线上的元素为两两随机变量之间的协方差，根据协方差的定义，我们可以认定：矩阵 $\sum$ 为**对称矩阵** (symmetric matrix)，其大小为 $d\times d$。

3. 多元正态分布与线性变换

> 假设一个向量 $\boldsymbol{x}$ 服从均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$ 、协方差矩阵为 Σ 的多元正态分布 (multi-variate Gaussian distribution)，则
>
> $$p\left(\boldsymbol{x}\right)=\left|2\pi\Sigma\right|^{-1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)^{T}\Sigma^{-1}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)\right)$$

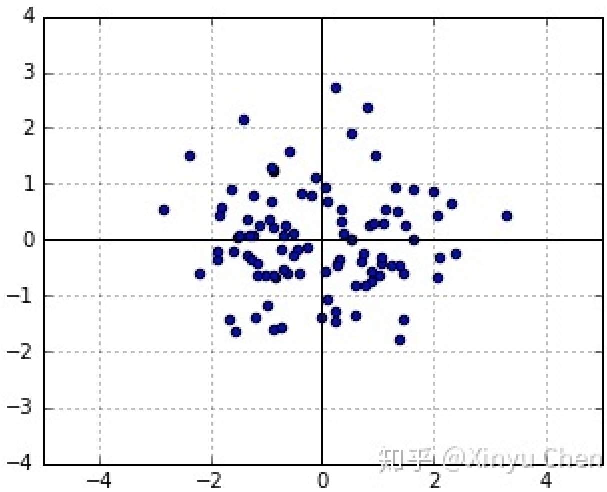
令该分布的均值向量为 $\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{0}$ ，由于指数项外面的系数 $\left|2\pi\Sigma\right|^{-1/2}$ 通常作为常数，故可将多元正态分布简化为

$$p\left(\boldsymbol{x}\right)\propto\exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{T}\Sigma^{-1}\boldsymbol{x}\right)$$

再令 $\boldsymbol{x}=\left(y,z\right)^{T}$ ，包含两个随机变量 y 和 z ，则协方差矩阵可写成如下形式：

$$\Sigma=\begin{bmatrix}\sigma(y,y) & \sigma\left(y,z\right)\\ \sigma\left(z,y\right) & \sigma(z,z)\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{2\times 2}$$

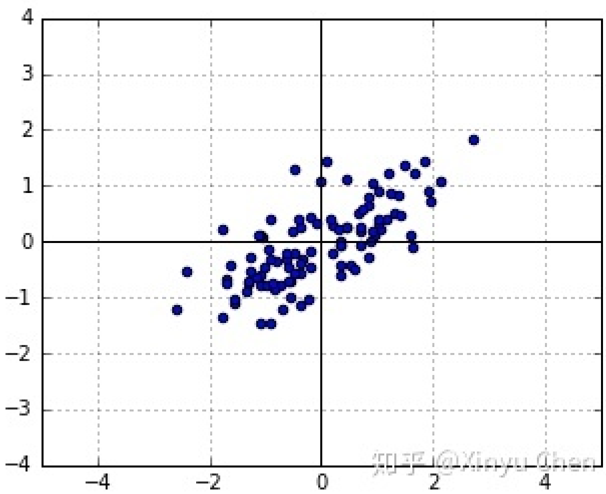
用**单位矩阵** (identity matrix) I 作为协方差矩阵，随机变量 y 和 z 的**方差均为 1**，则生成如干个随机数如图 1 所示。



在生成的若干个随机数中，每个点的似然为

$$\mathcal{L}\left(\boldsymbol{x}\right)\propto\exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{x}\right)$$

对图 1 中的所有点考虑一个**线性变换** (linear transformation)： $\boldsymbol{t}=A\boldsymbol{x}$ ，我们能够得到图 2.



在线性变换中，矩阵 A 被称为**变换矩阵** (transformation matrix)，为了将图 1 中的点经过线性变换得到我们想要的图 2，其实我们需要构造两个矩阵：

- **尺度矩阵** (scaling matrix)：

$$S=\begin{bmatrix} s_y & 0 \\ 0 & s_z \end{bmatrix}$$

- **旋转矩阵** (rotation matrix)

$$R=\begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

其中，θ 为**顺时针旋转的度数。**

> **变换矩阵、尺度矩阵和旋转矩阵三者的关系式：**
> $A=RS$

在这个例子中，尺度矩阵为 $S=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$，旋转矩阵为

$R=\begin{bmatrix} \cos(-\frac{\pi}{6}) & -\sin(-\frac{\pi}{6}) \\ \sin(-\frac{\pi}{6}) & \cos(-\frac{\pi}{6}) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}$，故变换矩阵为

$A=RS=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{4} \end{bmatrix}$.

另外，需要考虑的是，经过了线性变换，$\boldsymbol{t}$ **的分布是什么样子呢**？

将 $\boldsymbol{x}=A^{-1}\boldsymbol{t}$ 带入前面给出的似然 $\mathcal{L}(\boldsymbol{x})$，有

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\boldsymbol{t}) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(A^{-1}\boldsymbol{t}\right)^T\left(A^{-1}\boldsymbol{t}\right)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{t}^T\left(AA^T\right)^{-1}\boldsymbol{t}\right)\end{aligned}$$

由此可以得到，多元正态分布的协方差矩阵为

$$\Sigma=AA^T=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{4} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \frac{13}{16} & -\frac{3\sqrt{3}}{16} \\ -\frac{3\sqrt{3}}{16} & \frac{7}{16} \end{bmatrix}.$$

4. 协方差矩阵的特征值分解

> 回到我们已经学过的线性代数内容，对于任意对称矩阵 Σ，存在一个**特征值分解 (eigenvalue decomposition, EVD)**：
> $\Sigma=U\Lambda U^T$
> 其中，U的每一列都是相互正交的特征向量，且是单位向量，满足 $U^TU=I$，Λ对角线上

> 的元素是从大到小排列的特征值，非对角线上的元素均为 0。

当然，这条公式在这里也可以很容易地写成如下形式：

$$\Sigma = \left(U\Lambda^{1/2}\right)\left(U\Lambda^{1/2}\right)^T = AA^T$$

其中，$A = U\Lambda^{1/2}$，因此，通俗地说，**任意一个协方差矩阵都可以视为线性变换的结果。**

在上面的例子中，**特征向量构成的矩阵**为

$$U = R = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}.$$

特征值构成的矩阵为

$$\Lambda = SS^T = \begin{bmatrix} s_y^2 & 0 \\ 0 & s_z^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

到这里，我们发现：多元正态分布的概率密度是由**协方差矩阵的特征向量控制旋转 (rotation)**，**特征值控制尺度 (scale)**，除了协方差矩阵，**均值向量会控制概率密度的位置**，在图 1 和图 2 中，均值向量为 $\mathbf{0}$，因此，概率密度的中心位于坐标原点。

相关参考：

- [Understanding the Covariance Matrixjanakiev.com]
- [What is the Covariance Matrix?fouryears.eu]