在PCA中，数据从原来的坐标系转换到了新的坐标系，新坐标系的选择由数据本身决定。第一个新坐标轴选择的是原始数据中方差最大的方向，第二个新坐标轴和第一个正交且具有最大方差的方向。数据的最大方差给出了数据最重要的信息。（ 在信号处理中认为信号具有较大的方差，噪声有较小的方差，信噪比就是信号与噪声的方差比，越大越好）

考虑整个训练集，原样本点 $\boldsymbol{x}_i$ 与基于投影重构的样本点 $\hat{\boldsymbol{x}}_i$ 之间的距离为

$$\sum_{i=1}^{m}\left\|\sum_{j=1}^{d'} z_{ij}\boldsymbol{w}_j-\boldsymbol{x}_i\right\|_2^2=\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{z}_i{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_i-2\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{z}_i{}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+\mathrm{const}$$
$$\propto -\mathrm{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\left(\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{W}\right). \qquad (10.14)$$

根据最近重构性，式(10.14)应被最小化，考虑到 $\boldsymbol{w}_j$ 是标准正交基，$\sum_i \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}$ 是协方差矩阵，有

$$\min_{\mathbf{W}}\ -\mathrm{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right) \qquad (10.15)$$
$$\text{s.t.}\ \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}=\mathbf{I}.$$

这就是主成分分析的优化目标.

从最大可分性出发，能得到主成分分析的另一种解释. 我们知道，样本点 $\boldsymbol{x}_i$ 在新空间中超平面上的投影是 $\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i$，若所有样本点的投影能尽可能分开，则应该使投影后样本点的方差最大化，如图 10.4 所示.

投影后样本点的方差是 $\sum_i \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{W}$，于是优化目标可写为

$$\max_{\mathbf{W}}\ \mathrm{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\right) \qquad (10.16)$$
$$\text{s.t.}\ \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}=\mathbf{I}\ ,$$

显然, 式(10.16)与(10.15)等价.

对式(10.15)或(10.16)使用拉格朗日乘子法可得

$$\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W} = \lambda \mathbf{W} , \tag{10.17}$$

于是, 只需对协方差矩阵 $\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$ 进行特征值分解, 将求得的特征值排序: $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_d$, 再取前 $d'$ 个特征值对应的特征向量构成 $\mathbf{W} = (\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_{d'})$. 这就是主成分分析的解. PCA 算法描述如图 10.5 所示.

---

**输入:** 样本集 $D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$;
　　　低维空间维数 $d'$.

**过程:**

1: 对所有样本进行中心化: $\boldsymbol{x}_i \leftarrow \boldsymbol{x}_i - \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{x}_i$;
2: 计算样本的协方差矩阵 $\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$;
3: 对协方差矩阵 $\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$ 做特征值分解;
4: 取最大的 $d'$ 个特征值所对应的特征向量 $\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_{d'}$.

**输出:** 投影矩阵 $\mathbf{W} = (\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_{d'})$.

---

**图 10.5**　PCA 算法