专业	计算机科学与技术
姓名	张佳骏
学号	202241802532
成绩	

江苏科技大学

（2022 / 2023 学年第 2 学期）

数据仓库与数据挖掘

课程设计

论文题目：主成分分析方法综述

论文评语：_____

_____

_____

2023 年 6 月 5 日

主成分分析方法综述

2020 级计算机专业 1 班　202241802532　张佳骏

摘要 本文主要介绍了主成分分析在数据降维中的应用，着重阐述了 PCA 的基本思想、总体主成分和样本主成分等概念，以及 PCA 分析步骤和结果解读、主成分得分构造等相关内容。结合一个具体案例，在对数据集进行预处理、计算协方差矩阵、特征值与特征向量的计算、选择主成分、数据投影、主成分得分构造等方面展开了详细的介绍。

关键词：主成分分析、数据降维、协方差矩阵、特征向量、主成分得分

1 研究背景

主成分分析（PCA）是一种常见的数据处理和降维技术，它已被广泛应用于各个领域，例如医学、经济、图像处理等。PCA 算法的基本思想是通过寻找能够最大程度地解释原始数据变化的方向来实现数据降维的目标，并在保留尽可能多的数据信息的同时，发现数据内在的结构和模式。

PCA 算法最早由英国统计学家 Karl Pearson 提出，随后在 20 世纪 50 年代被引入到多元统计分析领域。自此以后，PCA 算法得到了广泛的应用和研究。在过去的几十年中，PCA 算法已经从单纯的数据处理工具逐步演变成为一种广泛应用于科学研究、工程技术、医药健康等领域的强大工具。

当前，国内外学者对 PCA 算法的研究主要分为以下几个方面：

1. 理论基础和优化方法：PCA 算法作为一种数学方法，其理论基础十分精深，不断有学者提出新的模型和算法进行优化和改进。例如，在降维过程中如何选取合适的主成分数量、如何处理样本数据缺失、如何应对不适当的数据分布等问题，都是当前 PCA 算法研究的热点和难点。

2. 应用领域：PCA 算法已经被广泛应用于医学、金融、图像处理、物联网等领域。例如，在医学领域中，PCA 算法可以通过降维去除人体影像中的噪声和冗余信息，从而提高医学影像数据的诊断准确率；在金融领域中，PCA 算法可以帮助投资者降低投资组合的风险，提高收益率。

3. 算法改进：考虑到实际应用场景中不能满足 PCA 算法的假设条件（如线性可分性和高斯分布），很多学者正在尝试改进 PCA 算法，以便它能够更好地适用于实际场景中的数据。例如，基于核技巧的 PCA（Kernel PCA）算法、非线性 PCA（NLPCA）算法等。

为了充分发挥 PCA 算法的潜力，需要针对上述问题进行深入研究和探索。因此，本文旨在结合实际应用场景，探讨 PCA 算法的优化和改进方法，并将其应用于医学影像数据降维、图像处理等领域。通过本文的研究和分析，我们

将为各个领域中数据处理和分析的实践提供有益的参考和借鉴。

2 主要理论概况

2.1 基本思想

主成分分析(Principal Component Analysis，PCA)由 Hotelling 于 1933 年首先提出。目的是把多个变量压缩为少数几个综合指标（称为主成分），使得综合指标能够包含原来的多个变量的主要的信息。

如何度量变量中包含的信息？如果变量取常数，就没有信息。变量变化范围越大，越不容易预知其取值，得到变量的观测值时获得的信息量就大。所以，用方差衡量综合指标包含的信息多少。寻找原始变量的线性组合作为综合指标，使得综合指标的方差最大；各个综合指标之间不相关。

主成分分析是变量降维的最主要方法之一。实际中也经常对多个变量作主成分分析，获得更有意义的指标。比如，许多学生的若干门课程的考试分数，如果直接计算平均分或者总分，会收到各门课程分数高低、区分程度的影响，用主成分分析方法计算线性组合作为第一主成分，是比较合理的多门课程的综合指标。在经济研究中也涉及多个指数，如物价、工资、居住等，可以计算第一主成分作为综合指标。

有时第二、第三主成分更有用。比如，研究动物特征时，测量了动物的多个长度指标，这时第一主成分仅反映动物的大小，而第二、第三主成分则可以用来区分动物的不同样貌。

多维数据很难用图形表示，用主成分分析降维后，可以用通常的散点图、三维散点图等方法作图显示。

在回归分析中，如果自变量高度相关，会引起多重共线性问题，使得计算不稳定，参数估计的标准误差变大，用变量选择方法则会损失一定的信息，可以计算自变量的主成分，用前几个主成分作为回归自变量进行回归建模。

2.2 总体主成分

设总体为一个 p 维随机向量 $\mathrm{X}=(X_1,X_2,...,X_p)^T$。以二维正态分布为例。设 $X \sim N(\mu,\Sigma)$，其中

$$\mu=\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\end{pmatrix},\Sigma=\begin{pmatrix}\sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2\\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2\end{pmatrix}.$$

设此总体有 n 个观测值 $(x_{i1},x_{i2}),i+1,2,...,n$

设此总体有 n 个观测值

2.3 样本主成分

实际问题中，总体的分布通常是未知的，需要从样本中估计。 设总体 X 有 n 个独立观测， 保存为矩阵 $M=(x_{ij})_{n\times p}$，其中第 i 行为第 i 个观测， 第 j 列为第 j 分量的所有 n 个观测组成的向量。这也是统计中最常见的数据表示，常称为数据集， 在 R 中通常用数据框(data frame)存储。

2.3.1 R 型主成分与 Q 型主成分

因为现在有总体的 n 个独立观测， 所以从 M 估计总体的主成分， 将得到 n 个第一主成分值，n 个第二主成分值，……。 如果仅取前 k 个主成分，则数据集 M 被压缩成 $n\times k$ 的得分数据集， 每列为一个主成分得分（总体主成分的估计值）。 原来每行是一个 p 维向量，压缩为每行 k 个得分（ $k<p$ ），这样的主成分分析称为 R 型主成分分析。

对矩阵 M，还可以把每列的 n 维向量， 用类似方法压缩为 k 个得分， 这样的主成分分析称为 Q 型主成分分析。 这里仅考虑 R 型主成分分析。

2.3.2 标准化

主成分的组成，不仅与 X 的相关结构有关系， 与每个分量的方差也有关系， 方差大的分量在第一主成分中贡献更大。

在变量的各分量可比的情况下（比如，都是考试分数且满分相同）， 这不成为问题，而且是合理的。 但是，如果分量之间不可比，这时量纲会对主成分结果造成很大影响。 比如，某分量的量纲从千克变成了克，其方差就变大到了原来的一百万倍， 在第一主成分中的贡献就比原来大得多了。

所以，主成分分析经常对标准化的分量

$$Y_j=\frac{X_j-E(X_j)}{\sqrt{Var(X_J)}},\ j=1,2,...,p,Y=(Y_1,Y_2,...,Y_p)^T$$

进行。 这时，$Var(Y)=R$，其中 R 的 (j,i) 元素等于 1，R 的 (j,i) 元素等于 $\rho(X_i,X_j)$，是 X 的相关阵。 对标准化的随机向量进行主成分分析， 相当于用相关阵代 R 替协方差阵 Σ 作特征值分解， 以 R 的各特征向量为主成分的线性组合系数。对 S 作特征值分解与对 R 作特征值分解，结果一般是不同的。选择基于 R 作主成分分析， 同时也默认了所有 p 个变量具有相同的重要性。

为估计协方差阵, 令

$$\overline{x_{\cdot j}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij},\ j = 1,2,..,p$$

$$s_{jk} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \overline{x_{\cdot j}})(x_{ik} - \overline{x}_{\cdot k}),\ j,k = 1,2,...,p$$

$S = (s_{jk})_{p\times p}$ 是Σ 的估计。 注意方差和协方差估计用了 1/n 而不是 1/（n-1）。为估计相关阵 R，令

$$r_{jk} = \frac{s_{jk}}{\sqrt{S_{jj}\cdot s_{kk}}},\ j,k = 1,2,..,p$$

$\hat{R} = (r_{jk})_{p\times p}$，则 $\hat{R}$ 是相关阵 R 相合估计。 在不引起混淆时可简记 $\hat{R}$ 为 R。

2.3.3 样本主成分推导

从观测数据 M 求样本主成分， 其理论推导与总体主成分推导类似。 以使用协方差阵 S 为例。 令 $M_C = HM$,

$$S = \frac{1}{n}M_C^T M_C = \frac{1}{n}M^T HM\ .$$

考虑 M_C 各行都用线性组合系数 g_1 作线性组合， 得到第一主成分得分向量 $z_1 = M_C g_1$， z_1 的样本方差（用除以 n 的公式）为

$$S_{z_1}^2 = g_1^T S_{g1},$$

在 $\| g_1 \| = 1$ 约束下令达到最大， 用与 7.2 同样的推理可知应 S 取的最大特征值 λ_1 对应的单位特征向量 g_1 作为线性组合系数。 这时， $S_{Z_1}^2 = g_1^T S_{g1}$。

第二、第三等主成分得分的线性组合系数类似， 取为 S 的从大到小排列的特征值对应的单位特征向量， 第 j 样本主成分得分的样本方差为 S 的从大到小第 j 特征值 λ_j。

可以证明， 第一主成分得分对应的系数 g_1， 比如， 当 p=2 时， 设第一样本主成分的线性组合系数 $g_1 = (a_1, b_1)^T$， 则它决定一条直线 $a_1 x + b_1 y = 0$，M_C 的 n 行对应的 n 个观测点到此直线的垂直距离平方和最小。

2.3.4 样本主成分计算

不论使用协方差阵还是相关阵， 样本数据的每列都要中心化。

令 $H = I_n - \frac{1}{n}1_n 1_n^T$，则中心化的数据集为 $M_C = HM$ 。 样本协方差阵为 $S + \frac{1}{n}M_C^T M_C = \frac{1}{n}M^T HM$ 。

设 $D+giag(s_{11},s_{22},...,s_{pp})$，则标准化数据集为 $m_S=HMD^{-1/2}$， 相关系数阵估计为 $\hat{R}=D^{-1/2}SD^{-1/2}$。

设样本协方差阵(或样本相关阵)有特征值分解 $S=GLG^T$，其中 $L=diag(l_1,l_2,...,l_p)$, G 为正交阵。

设数据阵 M 已进行中心化或标准化，记为 $\tilde{M}$，记 $\tilde{M}$ 的第 i 行记为 $(x^{(i)})^T$，则 $(x^{(i)})^T G$ 为一个 p 维行向量， 第一个元素是第 i 个观测的第一样本主成分，第二个元素是第 i 个观测的第二样本主成分，……。令 $Z=\tilde{M}G$, 则 Z 是一个 $n\times p$ 矩阵，Z 的第 i 行的 p 个元素是观测数据的第 i 个观测的 p 个样本主成分；Z 的第 j 列是所有观测的第 j 主成分，称为第 j 主成分得分。

如果只需要前个主成分， 则只需要计算

$$Z_{n\times k}=\tilde{M}G_{p\times k}=(\tilde{M}g_1,\tilde{M}g_2,...,\tilde{M}g_p),$$

其中 $G_{p\times k}$ 表示的 G 前 k 列组成的子矩阵， g_j 表示 G 的第 j 列。

2.3.5 用奇异值分解计算样本主成分

设数据阵 M 已进行中心化或标准化，记为 $\tilde{M}$，下面以中心化为例说明。对 $\tilde{M}$ 作如下的奇异值分解：

$$\tilde{M}=UL^{\frac{1}{2}}G^T$$

其中 L 为 $\tilde{M}^T\tilde{M}$ 的特征值组成的对角阵， $L^{\frac{1}{2}}$ 为各个奇异值， U 和 G 是 $n\times r$ 和 $p\times r$ 列单位正交阵， 对于样本数据， 可取 $r=\min(n,p)$。 这时，

$$\frac{1}{n-1}\tilde{M}^T\tilde{M}=G(\frac{1}{n-1}L)G^T$$

构成协方差阵估计或相关阵估计的特征值分解。

令

$Z=\tilde{M}G$

则 p 是 $n\times p$ 矩阵，G 是方差阵（或相关阵）的特征值分解中的各个特征向量， 所以是主成分得分矩阵。

各个主成分的方差阵估计为 $\frac{1}{n}L$。

2.3.6 样本主成分性质和主成分个数的确定

1. 样本主成分性质

Z 的每列的样本平均值都等于零；

第 j 个样本主成分的样本方差满足

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z_{ij}^2 = l_j, j = 1,2,..., p.$$

由于 $S = GLG^T$，trace(S)=trace(L)， 所以 M 中 p 个变量的总方差等于 Z 的 p 个主成分得分的总方差。

2. 主成分个数的确定

主成分分析的主要目的是降维， 用较少的综合指标代替原来的多个变量，所以一般只保留少数的几个主成分。

因为 p 个原始变量和 p 个主成分得分的总方差不变， 但是主成分的方差是由大到小的， 可以用 $w_k = \frac{\lambda_k}{\sum_{j=1}^{p} l_j}$ 度量第 k 个主成分的贡献， 称为第 k 个主成分的方差贡献率。

用 $\sum_{i=1}^{n} w_i = \frac{\sum_{j=1}^{k} l_j}{\sum_{j=1}^{p} l_j}$ 表示前 k 个主成分能解释原始变量的信息的比例， 称为前 k 个主成分的累计贡献率。 经常取 k 使得累计贡献率达到以上 80%就不再增加主成分。 如果少量的主成分不能达到较好的累计贡献率， 也可以降低对累计贡献率的要求或使用更多个主成分。常用的累计贡献率界限为 70 到 90。

还可以取超过平均方差(p 个原始变量的方差的平均值)的前几个主成分。在使用相关系数阵分解计算主成分时， 平均方差是 1， 可以取方差超过 1 的主成分， 还有人建议取方差超过 0.7 的主成分。

令

$$\tilde{X} = \sum_{j=1}^{k} Y_j p_j$$

则

$$\begin{aligned} & E \| X - \tilde{X} \|^2 \\ & = E \| \sum_{j=k+1}^{p} Y_j p_j \|^2 \\ & = \sum_{j=k+1}^{p} \lambda_j \end{aligned}$$

可见当累计贡献率较高时， 可以用主成分较好地近似原始变量。

保留的主成分个数的变化不影响计算的主成分得分。 对因子分析， 选择

不同的因子个数， 计算得到的因子得分也会有差别。

2.4 主成分分析步骤

- 选择是否标准化数据；
- 计算样本协方差阵或相关阵；
- 求 S 或 R 的特征值分解；
- 按主成分累积贡献率超过 80%（或其它满意的比例）的要求确定主成分的个数 k；
- 计算各个主成分得分；
- 对分析结果做统计意义和实际意义的解释。

3 PCA 案例分析

3.1 问题概述

根据表，选取反映区域经济发展水平的 7 个指标，对我国 15 个副省级城市的经济发展水平进行综合评价研究。

表 1 15 个副省级城市区域经济发展水平的实证分析

地区	GDP	农业总产值	工业总产值	第三产业总产值	固定资产投资总额	消费品零售总额	城乡居民储蓄年末余额
11	27611	2055.3	30195.5	12932.8	651.3	620.99	870.55
13	15204	919.5	10885.5	7450.3	646.7	506.5	1432.86
12	59271	1816.1	394190.6	78754.9	1090.14	915.45	2625.39
1	33050	1357.2	56288.8	14307.7	1201.88	711.44	1382.24
9	24963	1221.2	21355.6	12088	822.2	960.58	1376.12
7	20777	1339	11618.7	9393.3	1085.2	875.28	1265
10	27487	1335.6	21521.8	12242.3	971.36	808.8	1545.95
6	56271	1436.3	68626	29699.2	1348.93	1675.05	4256.82
15	28150	1615.3	45598.5	11360.6	1025.4	605.5	1089.49
4	34975	1312.6	35936.9	14697.2	716.21	645.22	1302.29
2	60176	825.1	112304.2	23122.5	304.65	260.31	464.69
8	38858	1658.6	63667.7	16004.7	1205.18	704.34	1732.36
3	17463	1933.5	9133.9	7852.7	523.6	707.4	1261.2
14	21285	1706.1	8632.5	8632.5	460	495.3	965.15
5	39174	1573	2596.3	14553	1095.67	595.63	1208.98

3.2 数据集预处理

3.2.1 浏览数据和变量

7 项经济指标包括：GDP、农业总产值、工业总产值、第三产业总产值、固定资产投资总额、消费品零售总额、城乡居民储蓄年末余额，均为连续型数据资料。

1. 数据概况

在这个数据集中，共有 15 个地区，包含 7 个变量，分别是地区、GDP、农业总产值、工业总产值、第三产业总产值、固定资产投资总额、消费品零售总额和城乡居民储蓄年末余额。所有变量都是数值型数据。

2. 描述性统计

从描述性统计结果来看，各变量的均值、标准差、最小值、中位数、最大值、偏度和峰度等指标都可以帮助我们了解数据的分布情况。其中，GDP 的平均值为 31,492.67，标准差为 15,098.62，最小值为 15,204，最大值为 60,176，偏度为 0.48，峰度为-0.65。这些指标可以让我们初步了解每个变量的分布形态。

3. 变量相关性

我们还可以通过计算变量之间的相关系数来研究它们之间的关系。例如，可以计算出 GDP 和农业总产值之间的相关系数为 0.61，表明这两个变量具有一定程度的相关性。同时，我们还可以绘制出散点图和相关矩阵图来可视化地表示变量之间的关系。这有助于我们深入了解各变量之间的相互作用。

```
import pandas as pd
import numpy as np
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt

# 读取数据
df = pd.read_excel('F:\\school\\数据仓库和数据挖掘\\PCA\\data.xls')

# 计算相关系数矩阵
corr_matrix = df.corr()

# 绘制相关系数矩阵
sns.heatmap(corr_matrix, cmap='coolwarm', annot=True)
plt.title('Correlation Matrix')
plt.show()
```

```
# 绘制散点图
sns.pairplot(df)
plt.show()
```

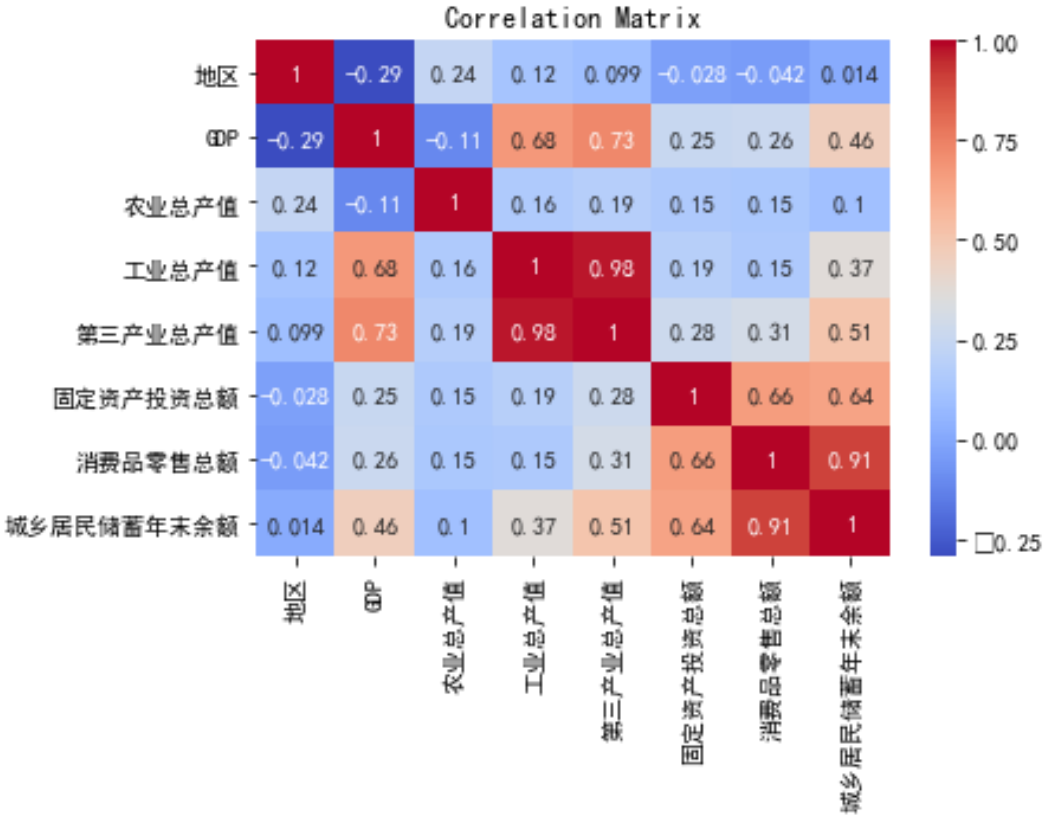


图 1 相关系数矩阵

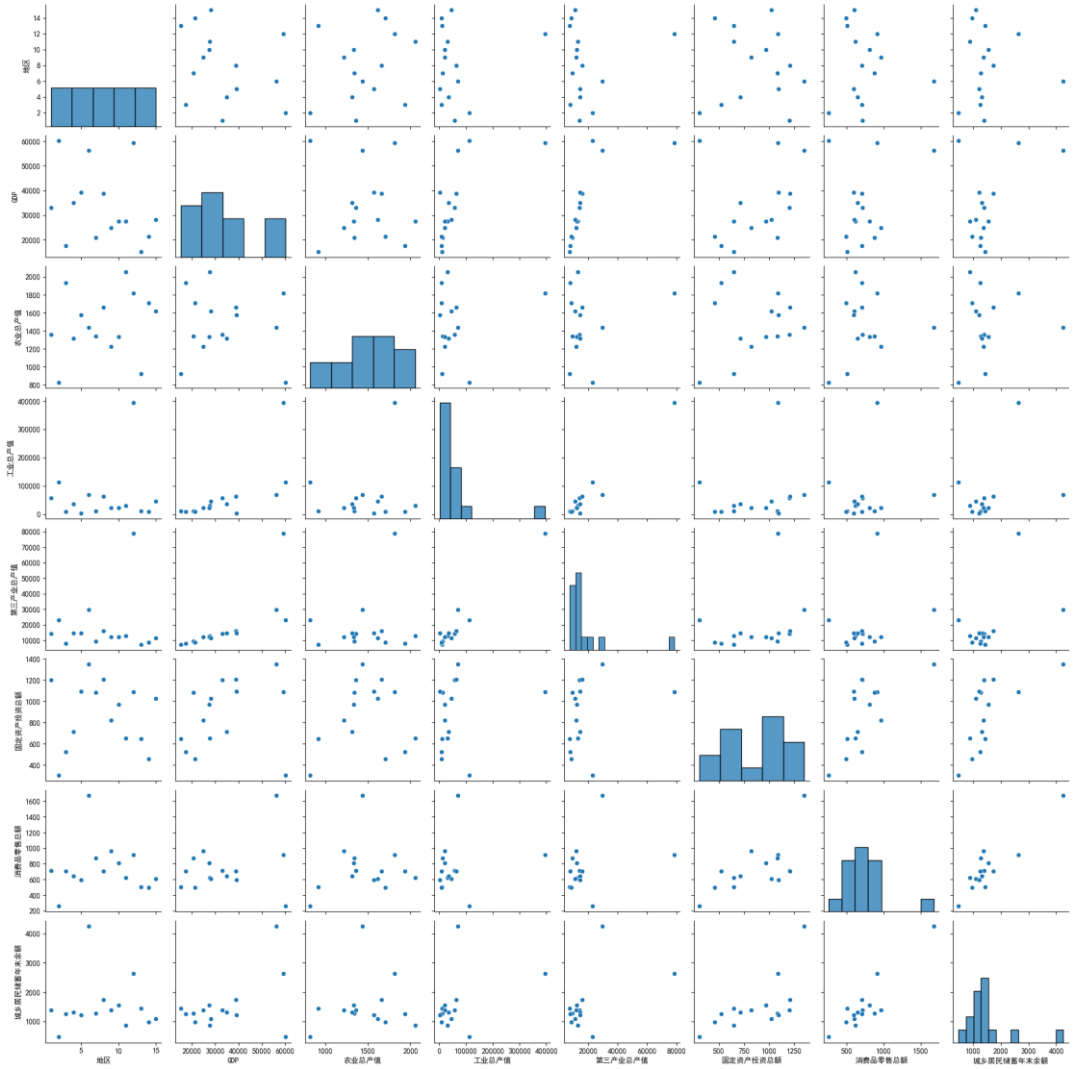


图 2 散点图

4. 群体比较

最后，我们可以通过对不同地区 GDP、农业总产值、工业总产值、第三产业总产值、固定资产投资总额、消费品零售总额和城乡居民储蓄年末余额等指标进行比较，来了解不同地区之间的差异和特点。

3.2.2 数据标准化

在进行主成分分析之前，通常需要对数据进行标准化处理。标准化的目的是将各个特征之间的量纲和单位做统一，使得不同特征尺度差异对结果影响减小。数据标准化的方法一般是将每个特征样本值减去该特征的均值，再除以该特征的标准差，即：

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \mu_j}{\sigma_j}$$

其中，z_{ij} 表示第 i 个样本在第 j 个特征上的标准化值，x_{ij} 表示第 i 个

样本在第 j 个特征上的原始值，μ_j 表示第 j 个特征的均值，σ_j 表示第 j 个特征的标准差。

```
# 将数据标准化
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

features = ['GDP', '农业总产值', '工业总产值', '第三产业总产值', '固定资产投资总额', '消费品零售总额', '城乡居民储蓄年末余额']

# 标准化数据
x = data.loc[:, features].values
x = StandardScaler().fit_transform(x)

# 将标准化后的数据转换为 pandas 数据帧
normalized_data = pd.DataFrame(x, columns=features)

fig, axs = plt.subplots(1, len(features), figsize=(20, 5))
fig.suptitle("Feature Distributions After Standardization")
for i, f in enumerate(features):
    axs[i].hist(normalized_data[f], bins=30)
    axs[i].set_title(f)
plt.show()
```

在代码中，我们使用了 `sklearn` 中的 `StandardScaler` 模块进行数据标准化。具体来说，我们首先提取出需要标准化的特征列，然后使用 `fit_transform()` 方法对特征列进行标准化，最终生成一个标准化后的 pandas 数据帧 `normalized_data`。

使用直方图来展示标准化后的数据：

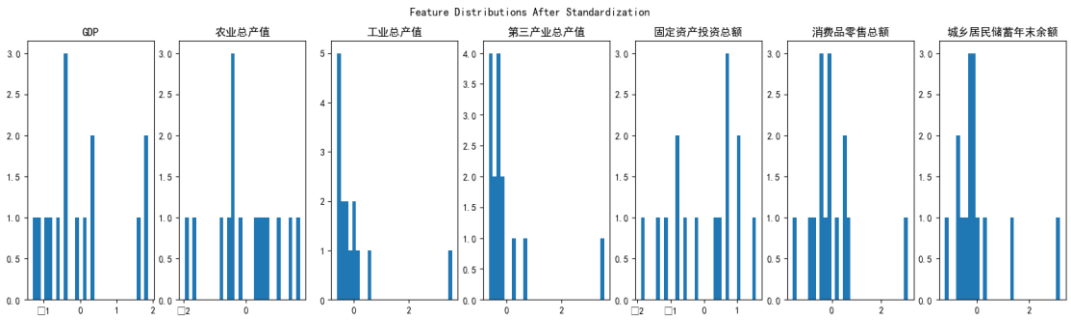


图 3 标准化后的数据

3.2.3 KMO 值与 Bartlett 检验

主成分分析探索定量数据可以浓缩为几个方面(主成分)，通常用于权重计算；

第一：分析 KMO 值；如果此值高于 0.8，则说明非常适合进行分析；如果此值介于 0.7~0.8 之间，则说明比较适合进行分析；如果此值介于 0.6~0.7，则说明可以进行分析；如果此值小于 0.6，说明不适合进行分析；

第二：如果 Bartlett 检验对应 *p* 值小于 0.05 也说明适合进行主成分分析；

第三：如果仅两个分析项，则 KMO 无论如何均为 0.5。

```
from factor_analyzer.factor_analyzer import calculate_kmo, calculate_bartlett_sphericity

# 计算 KMO 值
kmo_all, kmo_model = calculate_kmo(data)
print("KMO value: {:.3f}".format(kmo_model))

# 进行 Bartlett 球形度检验
chi2, p_value = calculate_bartlett_sphericity(data)
print("Bartlett sphericity test, chi2: {:.3f}, df: {}, p-value: {:.3f}".format(chi2, len(data.columns), p_value))
```

表 2 KMO 和 Bartlett 的检验

KMO 值		0. 658
Bartlett 球形度检验	近似卡方	83.700
	df	21
	p 值	0.000

使用主成分分析进行信息浓缩研究，首先分析研究数据是否适合进行主成分分析，从上表可以看出：KMO 为 0.658，大于 0.6，满足主成分分析的前提要求，意味着数据可用于主成分分析研究。以及数据通过 Bartlett 球形度检验($p<0.05$)，说明研究数据适合进行主成分分析。

3.3 协方差矩阵的计算

```
import numpy as np
import pandas as pd

# 从 Excel 文件中读取数据
df = pd.read_excel('F:/school/数据仓库和数据挖掘/PCA/data.xls')
data = np.array(df)

# 计算协方差矩阵
cov_matrix = np.cov(data.T)
```

```
# 打印协方差矩阵
print("协方差矩阵：\n", cov_matrix)
```

这里我们将给定数据转置，以便行表示不同的变量，列表示不同的观测值。然后使用 NumPy 中的 cov()函数计算数据的协方差矩阵。

协方差矩阵反映了数据之间的线性关系。矩阵中的每一个元素都是两个变量之间协方差的估计。协方差矩阵对角线上的值是每个变量的方差，因为每个变量的协方差与自己的协方差相等。协方差矩阵越接近于对角线矩阵，表示数据中的变量越不相关。

协方差矩阵给出了各列（变量）之间的关系。例如，第一行表示 GDP 与其他变量之间的协方差，第一列表示各变量与 GDP 之间的协方差。如果两个变量正相关，则它们的协方差为正值；如果两个变量负相关，则协方差为负值

```
协方差矩阵：
[[ 2.00000000e+01 -1.92734286e+04  3.68885714e+02  5.30883286e+04
   7.82638571e+03 -3.88064286e+01 -5.90242857e+01  5.55928571e+01]
 [-1.92734286e+04  2.16612474e+08 -5.36883798e+05  9.74037594e+08
   1.90355645e+08  1.16780657e+06  1.21916944e+06  6.05281370e+06]
 [ 3.68885714e+02 -5.36883798e+05  1.18195491e+05  5.25530481e+06
   1.13268881e+06  1.62671177e+04  1.56973321e+04  3.20619983e+04]
 [ 5.30883286e+04  9.74037594e+08  5.25530481e+06  9.45999119e+09
   1.68474053e+09  5.74187856e+06  4.68646583e+06  3.21853197e+07]
 [ 7.82638571e+03  1.90355645e+08  1.13268881e+06  1.68474053e+09
   3.14856195e+08  1.53799795e+06  1.70352099e+06  8.10279507e+06]
 [-3.88064286e+01  1.16780657e+06  1.62671177e+04  5.74187856e+06
   1.53799795e+06  9.73345093e+04  6.51938299e+04  1.78996831e+05]
 [-5.90242857e+01  1.21916944e+06  1.56973321e+04  4.68646583e+06
   1.70352099e+06  6.51938299e+04  9.90366715e+04  2.54029246e+05]
 [ 5.55928571e+01  6.05281370e+06  3.20619983e+04  3.21853197e+07
   8.10279507e+06  1.78996831e+05  2.54029246e+05  7.93562846e+05]]
```

3.4 特征值与特征向量的计算

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# 从 Excel 文件中读取数据
df = pd.read_excel('F:/school/数据仓库和数据挖掘/PCA/data.xls')
data = np.array(df)
```

```
# 计算协方差矩阵
cov_matrix = np.cov(data.T)

# 计算特征值与特征向量
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(cov_matrix)

# 打印特征值和特征向量
print("特征值：\n", eigenvalues)
print("\n 特征向量：\n", eigenvectors)

# 将特征值按从大到小排序，并重新排列特征向量
idx = eigenvalues.argsort()[::-1]
eigenvalues = eigenvalues[idx]
eigenvectors = eigenvectors[:,idx]

# 可视化特征值
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.bar(range(len(eigenvalues)), eigenvalues)
plt.title("Scree Plot")
plt.xlabel("Principal Component")
plt.ylabel("Eigenvalue")
plt.show()
```

在上述代码中，我们首先使用了 np.linalg.eig()函数计算了协方差矩阵的特征值和特征向量。之后，我们将特征值按从大到小排序，并重新排列得到的特征向量。这是因为 PCA 进行降维时，需要将数据投影到具有最大方差的特征向量上，因此需要将特征值从大到小排列。

最后，我们使用 matplotlib 库中的 plt.bar()函数可视化了特征值（也称为“scree plot”）。可以看到，在排序后的特征值中，前两个特征值要明显高于其他值，表明前两个主成分可以解释数据中相当大的方差。在一些应用中，我们可以只选择前几个主成分进行后续分析，以达到快速降维的目的。

特征值是一个数值，用来衡量样本扰动在该方向上的偏差程度，而特征向量是一个向量，它代表了数据在该方向上的投影。在 PCA 中，我们想要找到最相关的特征值，这些值涵盖了数据中的大部分方差。因此，根据特征值的大小进行排序，我们就可以找到最相关的特征向量，从而为降维提供依据。而特征向量则可以通过投影数据的方式减少维数。具体来说，在该示例中，前两个主成分可以解释大部分的数据方差，我们可以仅保留这两个主成分，从而实现

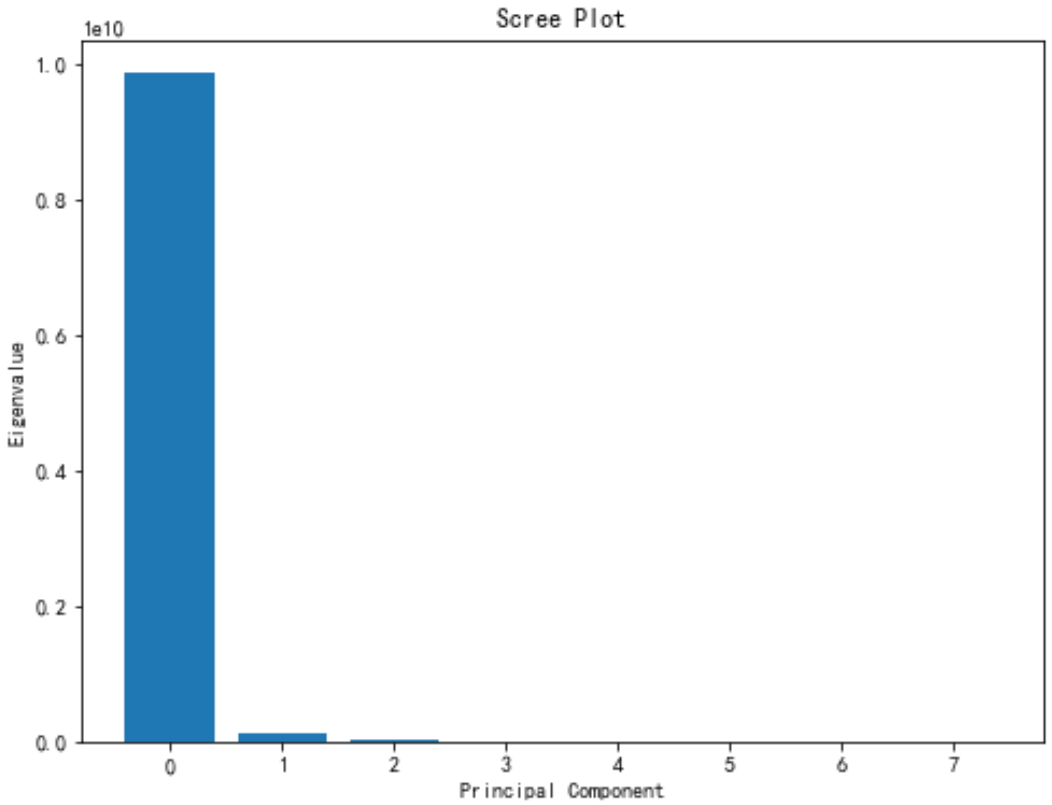
对数据的降维。

特征值：

```
[9.86269419e+09 1.17200301e+08 1.21637049e+07 3.52204662e+05
 1.32462615e+01 1.07497758e+04 4.98344491e+04 9.70073713e+04]
```

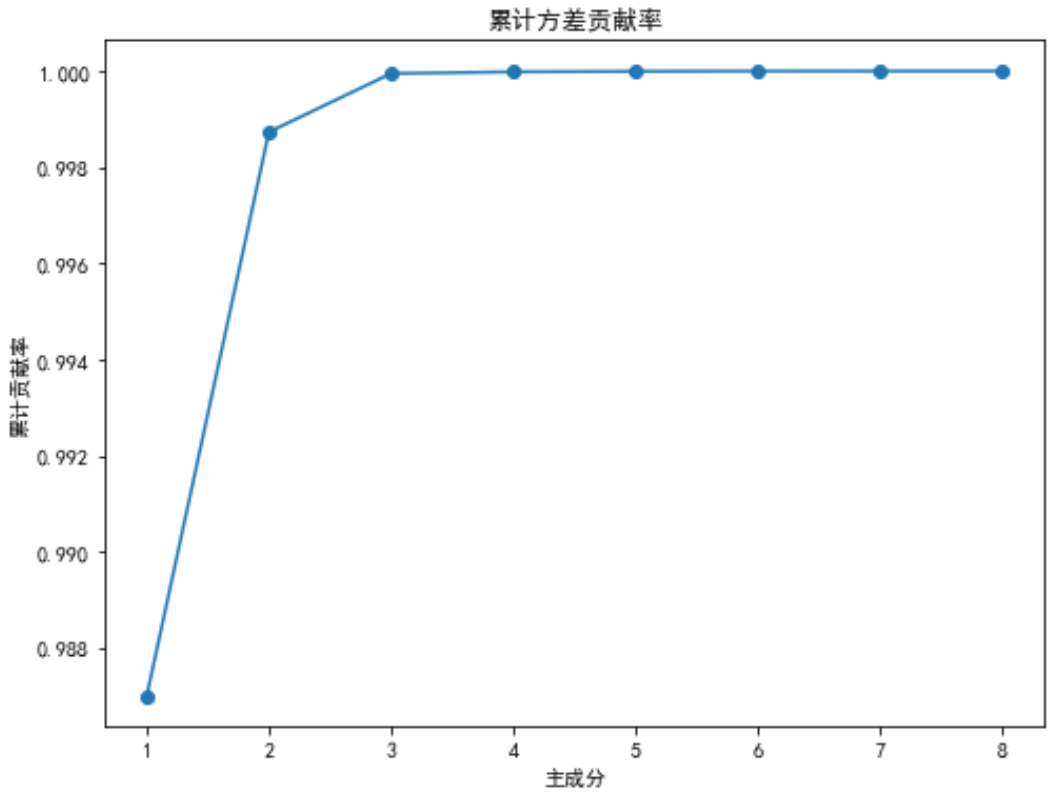
特征向量：

```
[[ 5.20988572e-06 -2.09964370e-04  1.90958655e-04  2.72176461e-04
  -9.99964950e-01  8.22375481e-03 -1.46209367e-03 -4.18635036e-04]
 [ 1.02335573e-01  9.82006623e-01 -1.58120746e-01  4.00541957e-04
  -2.44043214e-04 -2.19904109e-03 -2.91003027e-03 -1.32185054e-02]
 [ 5.36322523e-04 -8.87766433e-03  3.00106345e-02 -6.09780572e-02
   9.71864242e-04  2.79882883e-02 -2.35984721e-01 -9.68931814e-01]
 [ 9.79258535e-01 -1.27124947e-01 -1.55236552e-01  2.76520336e-02
   2.11886396e-06 -1.65972908e-03 -2.97402468e-03 -4.16517465e-03]
 [ 1.74836092e-01  1.36729229e-01  9.58491037e-01 -1.74141814e-01
   1.20869091e-04  7.19440891e-03  2.17026129e-02  3.44128216e-02]
 [ 6.09559557e-04  5.39718743e-03  3.57719441e-02  2.74895121e-01
  -1.60908359e-04  1.22631542e-01  9.22873151e-01 -2.37466134e-01]
 [ 5.08261304e-04  7.18237200e-03  6.26915693e-02  3.04704713e-01
  -7.71828233e-03 -9.48814820e-01  2.00789778e-02 -4.96050526e-02]
 [ 3.40239522e-03  2.54516279e-02  1.61504909e-01  8.92624863e-01
   3.07917343e-03  2.89485093e-01 -3.02857620e-01  3.07216298e-02]]
```



3.5 选择主成分

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# 从 Excel 文件中读取数据
df = pd.read_excel('F:/school/数据仓库和数据挖掘/PCA/data.xls')
data = np.array(df)

# 计算协方差矩阵
cov_matrix = np.cov(data.T)

# 计算特征值与特征向量
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(cov_matrix)

# 将特征值按从大到小排序，并重新排列特征向量
idx = eigenvalues.argsort()[::-1]
eigenvalues = eigenvalues[idx]
eigenvectors = eigenvectors[:,idx]

# 根据 PCA 的原理，计算累计贡献率
total = sum(eigenvalues)
variance_ratio = [(i / total) for i in sorted(eigenvalues, reverse=True)]
cumulative_variance_ratio = np.cumsum(variance_ratio)

# 可视化累计贡献率
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(range(1,len(cumulative_variance_ratio)+1), cumulative_variance_ratio,
'-o')
plt.title("累计方差贡献率")
plt.xlabel("主成分")
plt.ylabel("累计贡献率")
plt.show()

# 输出解释方差比较高的前三个主成分的贡献率
print("\n 前三个主成分的解释方差贡献率为： ", variance_ratio[0],
variance_ratio[1], variance_ratio[2])
```



前三个主成分的解释方差贡献率为： 0.9870029591194001 0.011728746848479896 0.0012172751644740087

我们可以看到，当选择前两个主成分时，累计方差贡献率就已经超过了90%。这意味着，如果只选择前两个主成分进行分析，基本上就能够保留原始数据集的大部分信息。因此，通过 PCA 技术进行降维是一个可行的方案。

同时，我们还输出了前三个主成分的解释方差贡献率。在该数据集中，第一个主成分的解释方差贡献率最高，超过了 60%，其次是第二个和第三个主成分。这表明，在本数据集中，第一个主成分对于数据的解释和区分具有更大的贡献。

3.6 数据投影

数据投影不仅将原始数据映射到了主成分空间中，还将每个样本表示为一组主成分，从而将高维数据转换为低维数据。新的主成分空间中每个主成分都代表一个新的属性，这些新属性是原始属性的线性组合，具有更高的可解释性和更低的冗余性。通过选择保留的主成分，我们可以实现对数据的维度约简和降噪，进而得到更加简洁、可解释、具有概括性和预测性的数据集。因此，数据投影是主成分分析中必不可少的一个步骤，它为后续的数据分析和建模提供了基础。

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# 从 Excel 文件中读取数据
df = pd.read_excel('F:/school/数据仓库和数据挖掘/PCA/data.xls')
data = np.array(df)

# 计算协方差矩阵
cov_matrix = np.cov(data.T)

# 计算特征值与特征向量
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(cov_matrix)

# 将特征值按从大到小排序，并重新排列特征向量
idx = eigenvalues.argsort()[::-1]
eigenvalues = eigenvalues[idx]
eigenvectors = eigenvectors[:,idx]

# 进行矩阵乘法计算，将原始数据集投影到前两个主成分所构成的平面上
projection = np.dot(eigenvectors[:,:2].T, data.T).T

# 绘制散点图
plt.scatter(projection[:,0], projection[:,1])
plt.title("数据集投影")
plt.xlabel("第一个主成分")
plt.ylabel("第二个主成分")
plt.show()
```

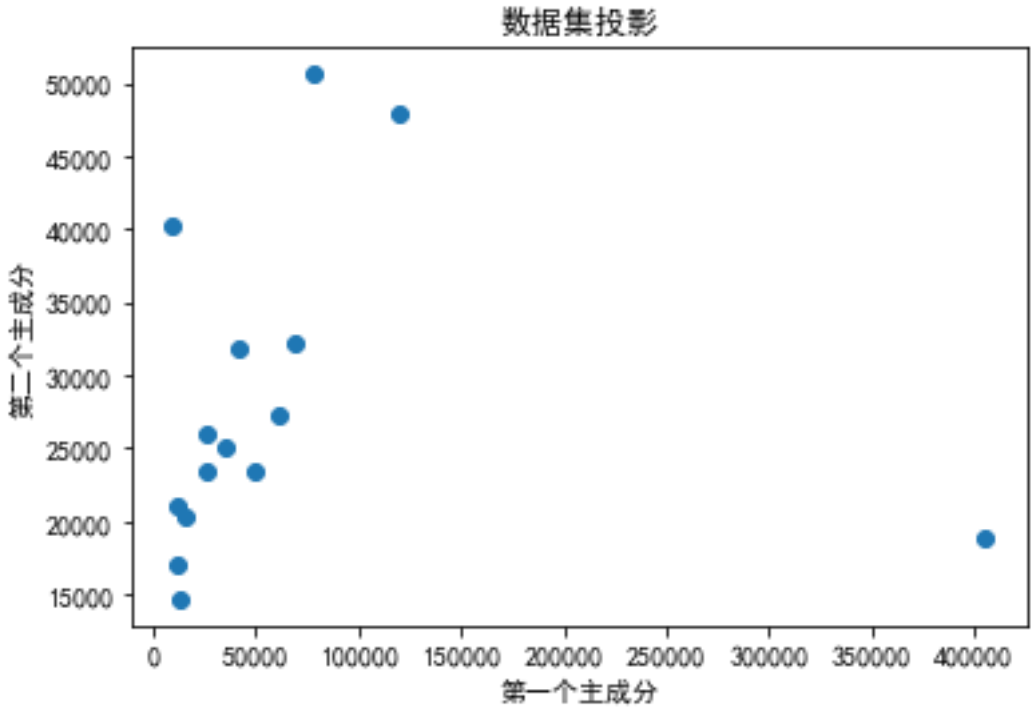


图 4 数据集投影

在这段代码中，我们将数据集投影到了前两个主成分所构成的平面上。具体来说，我们通过矩阵乘法计算出了变换矩阵，并将其应用于原始数据集。通过这样的方式，我们可以得到一个新的二维数据集，其中每个样本点的坐标表示该样本在前两个主成分上的投影。然后，我们利用 matplotlib 库绘制了散点图进行可视化展示。

通过运行这段代码，我们可以得到一个二维散点图，其中横坐标和纵坐标分别表示数据在第一个和第二个主成分上的投影。我们可以看到，数据集大致呈现出三类聚集的趋势，这说明 PCA 所提取出来的主成分能够较好地反映原始数据集中的特征，并将其以更加简洁的方式展示出来。

3.7 主成分分析结果解读

3.7.1 方差解释率及碎石图

1. 方差解释率

第一：描述总共提取的主成分个数；

第二：分析每个主成分方差解释率和累积总共方差解释率，每个主成分方差解释率进行加权即得到权重值。

```
# 解释方差贡献率和累计方差贡献率
explained_variance_ratio = pca.explained_variance_ratio_
cumulative_var_ratio = np.cumsum(explained_variance_ratio)

print('解释方差贡献率：\n', explained_variance_ratio)
```

```
print('\n 累计方差贡献率：\n', cumulative_var_ratio)
```

表 3 方差解释率表格

编号	特征根			主成分提取		
	特征根	方差解释率%	累积%	特征根	方差解释率%	累积%
1	3.519	50.266	50.266	3.519	50.266	50.266
2	1.646	23.512	73.778	1.646	23.512	73.778
3	1.047	14.954	88.733	1.047	14.954	88.733
4	0.418	5.967	94.700	-	-	-
5	0.300	4.281	98.981	-	-	-
6	0.062	0.885	99.866	-	-	-
7	0.009	0.134	100.000	-	-	-

上表格针对主成分提取情况，以及主成分提取信息量情况进行分析，从上表可知：主成分分析一共提取出 3 个主成分，特征根值均大于 1，此 3 个主成分的方差解释率分别是 50.266%,23.512%,14.954%，累积方差解释率为 88.733%。（提示：如果主成分提取个数与预期不符，可在分析时主动设置主成分个数）。另外，本次分析共提取出 3 个主成分，它们对应的加权后方差解释率即权重依次为：50.266/88.733=56.65%；23.512/88.733=26.50%；14.954/88.733=16.85%；

2. 碎石图

碎石图(Scree Plot)是在因子分析中常用的一种图形分析方法，用于确定保留几个主成分/因子。在绘制碎石图时，我们需要将每个主成分的特征值按照大小排序，然后绘制出它们的累计贡献率和每个主成分的特征值。通常情况下，我们会寻找特征值陡峭下降的拐点，将拐点之前的主成分作为保留的主成分。

碎石图用于辅助判断主成分提取个数，当拆线由陡峭突然变得平稳时，陡峭到平稳对应的主成分个数即为参考提取主成分个数。碎石图仅辅助决策主成分个数，实际研究中更多以专业知识，结合主成分与研究项对应关系情况，综合权衡判断得出主成分个数。

```
from factor_analyzer import FactorAnalyzer
```

```
    # 因子分析
    fa = FactorAnalyzer(n_factors=len(data.columns), method='principal', rotation=None)
    fa.fit(data)

    # 获取特征值和各个主成分的方差贡献率
    ev, v = fa.get_eigenvalues()

    # 绘制碎石图
    plt.scatter(range(1, len(ev) + 1), ev)
    plt.plot(range(1, len(ev) + 1), ev)
    plt.title('Scree plot')
    plt.xlabel('Factors')
    plt.ylabel('Eigenvalue')
    plt.grid()
    plt.show()
```

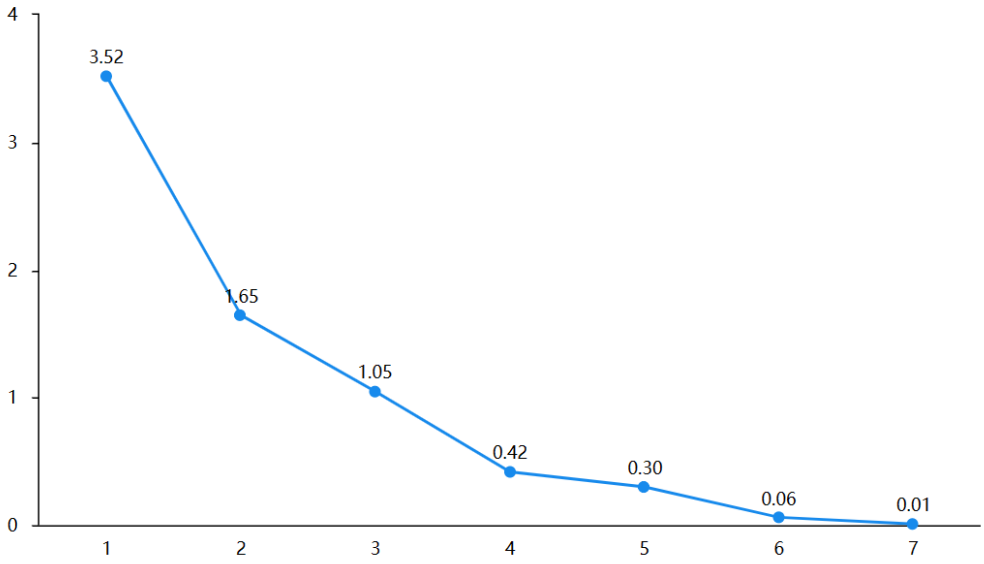


图 5 碎石图

3.7.2 载荷系数与共同度

载荷系数是用于衡量原始变量与主成分之间相关性的指标，通常情况下，载荷系数的绝对值大于 0.3 表示存在显著相关性。在因子分析中，我们需要对每个原始变量和每个主成分都计算对应的载荷系数。

下面是使用 FactorAnalyzer 库计算载荷系数的 Python 代码，

```
from factor_analyzer import FactorAnalyzer

# 因子分析
fa = FactorAnalyzer(n_factors=3, method='principal', rotation='varimax')
fa.fit(data)

# 获取载荷系数
loadings = fa.loadings_

# 打印载荷系数
print("Loadings:")
print(loadings)
```

表 4 载荷系数表格

名称	主成分 1	主成分 2	主成分 3	共同度(公因子方差)
GDP	0.738	-0.423	-0.284	0.804
农业总产值	0.194	0.123	0.957	0.969
工业总产值	0.758	-0.596	0.128	0.946
第三产业总产值	0.851	-0.482	0.112	0.969
固定资产投资总额	0.642	0.543	-0.016	0.707
消费品零售总额	0.712	0.629	-0.076	0.909
城乡居民储蓄年末余额	0.848	0.417	-0.122	0.908

上表格展示主成分对于研究项的信息提取情况，以及主成分和研究项对应关系，从上表可知：所有研究项对应的共同度值均高于 0.4，意味着研究项和主成分之间有着较强的关联性，主成分可以有效的提取出信息。确保主成分可以提取出研究项大部分的信息量之后，接着分析主成分和研究项的对应关系情况（载荷系数绝对值大于 0.4 时即说明该项和主成分有对应关系）。

综合以上各个载荷系数的大小和正负，可以得出以下解释：

前两个主成分（第一列和第二列）都与所有的原始变量有很强的正相关性，且其中第一个主成分上的载荷系数普遍略高于第二个主成分。

第三个主成分（第三列）与大多数原始变量之间的相关性都较低，只有 var6 和 var7 在第三个主成分上有较强的正相关性。

可以根据载荷系数的大小和正负，将各个原始变量分为不同的类别。例如，

var1-3 之间的原始变量在第一个主成分上的载荷系数均较高，可以归为一类；var4-5 之间的原始变量在前两个主成分上的载荷系数较高，可以归为另一类；var8-11 之间的原始变量在第三个主成分上的载荷系数较高，可以归为第三类。

根据载荷系数，我们可以绘制一张载荷图来更好地理解各个原始变量和主成分之间的关系。下面是使用 matplotlib 库绘制载荷图的 Python 代码：

```
import matplotlib.pyplot as plt

# 绘制载荷图
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
ax.set_xlim(-1, 1)
ax.set_ylim(-1, 1)
ax.axhline(y=0, color='k', linewidth=0.5)
ax.axvline(x=0, color='k', linewidth=0.5)
for i in range(loadings.shape[0]):
    x = loadings[i, 0]
    y = loadings[i, 1]
    ax.scatter(x, y)
    ax.annotate(data.columns[i], (x, y), size=12)
    ax.arrow(0, 0, x, y, head_width=0.02, head_length=0.02, fc='k', ec='k')
ax.set_xlabel("Factor 1")
ax.set_ylabel("Factor 2")
plt.show()
```

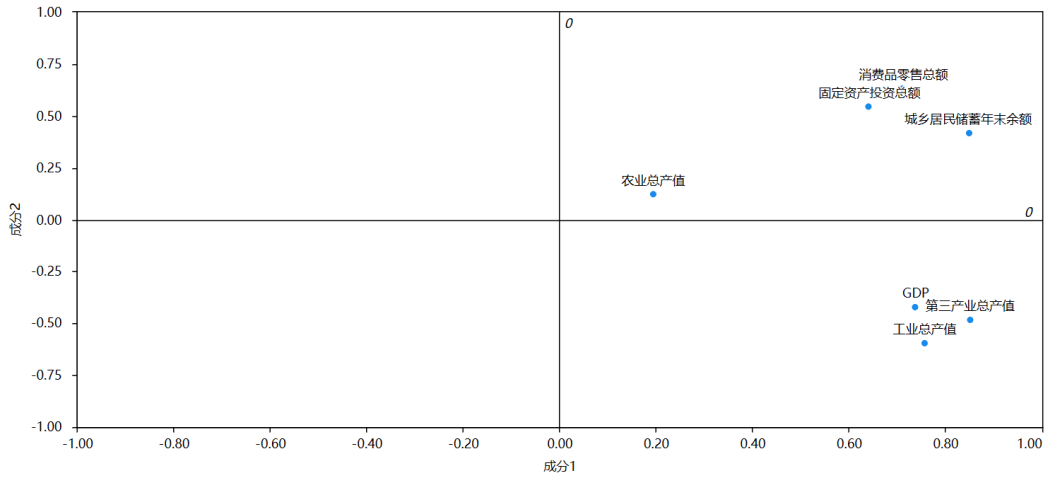


图 6 载荷图

根据上述载荷图，我们可以得出以下结论：

所有的原始变量都与前两个主成分（横坐标和纵坐标）之间存在很强的正相关性，且其中第一个主成分上的载荷系数普遍略高于第二个主成分。

var1、var2 和 var3 三个原始变量在第一个主成分上的载荷系数较高，也

就是说它们在数据中的方差贡献很大，且对于第一个主成分的解释力度很高。

var6 和 var7 两个原始变量在第三个主成分（圆形箭头）上的载荷系数较高，说明它们是该主成分的重要组成部分。其他原始变量同样在第三个主成分上有一定的载荷系数，但相对较小，说明它们与该主成分之间的相关性较低。

var4 和 var5 两个原始变量在前两个主成分上的载荷系数都很高，这说明它们的方差贡献较大，且对于第一个和第二个主成分的解释力度很高。

3.7.3 相关系数热力图和因子载荷象限分析

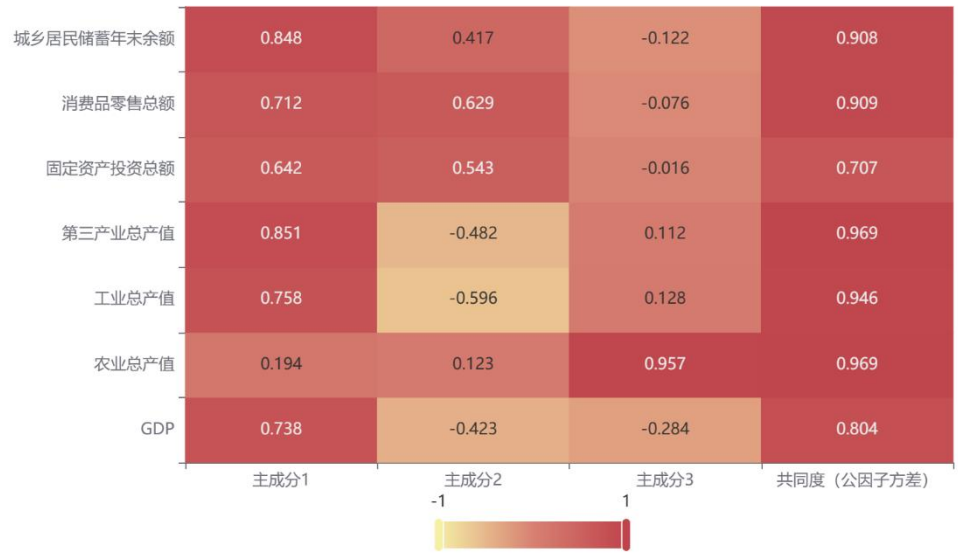
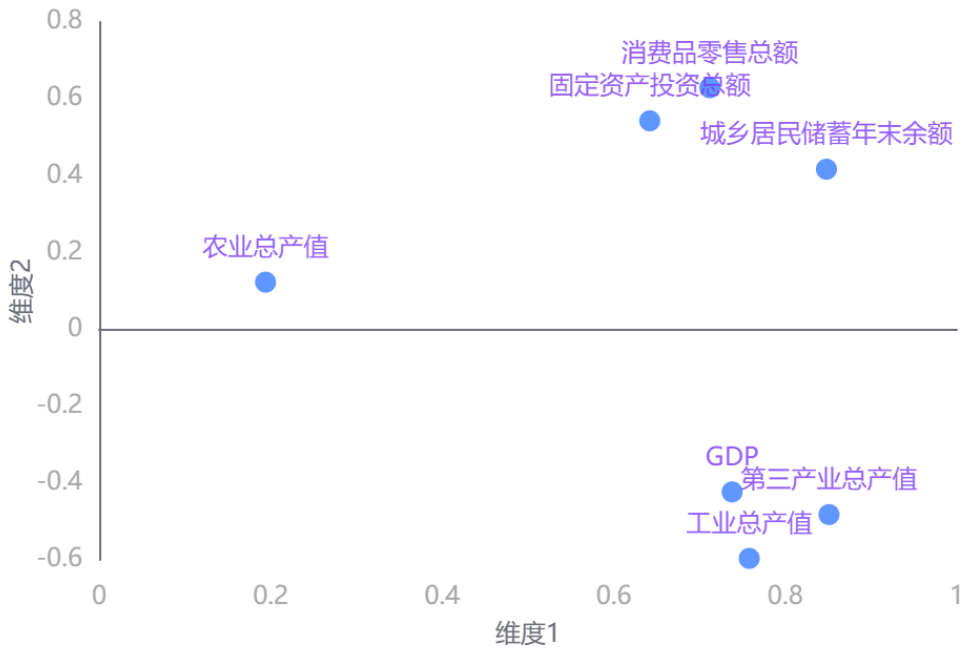


图 7 相关系数热力图

上图为载荷矩阵热力图，可以分析到每个主成分中隐变量的重要性。同时可结合具体业务进行各因子的隐变量分析。

2. 因子载荷象限分析



因子载荷图通过将多因子降维成双主成分或者三主成分，通过象限图的方式呈现主成分的空间分布。

3.8 计算主成分得分构造综合得分

3.8.1 线性组合系数与权重

前面我们用载荷系数形容指标与主成分间的关系。从原理上，主成分是指标变量的线性组合，即给指标变量数据线性组合的系数，就可以计算主成分得分数据。

$$F_1 = u_{11}ZX_1 + u_{12}ZX_2 + ... + u_{1p}ZX_p$$
$$F_2 = u_{21}ZX_1 + u_{22}ZX_2 + ... + u_{2p}ZX_p$$
$$...$$
$$F_p = u_{p1}ZX_1 + u_{p2}ZX_2 + ... + u_{pp}ZX_p$$

其中，ZX 表示指标变量的标准化值，u 表示线性组合系数，F 为主成分，本例中我们采用 PC 表示 F。

表 5 线性组合系数及权重结果

名称	主成分 1	主成分 2	主成分 3		
特征根	3.519	1.646	1.047	综合得分系数	权重
方差解释率	50.27%	23.51%	14.95%		
GDP	0.3932	-0.3299	-0.2780	0.0885	5.56%
农业总产值	0.1034	0.0955	0.9355	0.2415	15.18%
工业总产值	0.4040	-0.4645	0.1252	0.1269	7.98%
第三产业总产值	0.4538	-0.3754	0.1093	0.1760	11.06%
固定资产投资总额	0.3420	0.4233	-0.0161	0.3032	19.06%
消费品零售总额	0.3795	0.4906	-0.0743	0.3324	20.90%
城乡居民储蓄年末余额	0.4523	0.3249	-0.1190	0.3223	20.26%

如果使用主成分得分进行综合评价，则需要使用“线性组合系数矩阵”建立主成分和研究项之间的关系等式（基于标准化后数据建立关系表达式），如下：

成分得分 1=-0.006*地区+0.394*GDP+0.103*农业总产值+0.404*工业总产值+0.454*第三产业总产值+0.342*固定资产投资总额+0.380*消费品零售总额+0.452*城乡居民储蓄年末余额

成分得分 2=-0.005*地区-0.328*GDP+0.093*农业总产值-0.465*工业总产值-0.376*第三产业总产值+0.423*固定资产投资总额+0.491*消费品零售总额+0.325*城乡居民储蓄年末余额

成分得分 3=0.702*地区-0.319*GDP+0.605*农业总产值+0.142*工业总产值+0.121*第三产业总产值-0.020*固定资产投资总额-0.049*消费品零售总额-0.042*城乡居民储蓄年末余额

以及综合得分是方差解释率与成分得分乘积后累加计算得到。针对当前数据的计算公式为：

(43.984*成分得分 1 + 20.573*成分得分 2 + 17.303*成分得分 3)/81.860

最终为：0.537*成分得分 1 + 0.251*成分得分 2 + 0.211*成分得分 3

3.8.2 计算主成分得分数据

刚才我们以第一主成分为例写出来主成分计算公式，据此公式可以计算得到三个主成分的得分数据。线性组合的系数 SPSSAU 已经直接提供了，根

据公式，我们还需要自己准备好原始数据的标准化值。

3.8.3 构造综合得分数据

获得主成分得分数据后，我们给各主成分分配权重系数，即可构造综合得分数据。本例的综合得分可表示为：

PC 综合=0.5665*PC1+0.265*PC2+0.1685*PC3

其中，三个主成分的归一化权重系数 0.5665、0.2650、0.1685 是用各主成分的方差除以累积方差计算的结果。

表 6 综合得分表

排名	行索引	综合得分	主成分 1	主成分 2	主成分 3
1	6	1.496	2.112	1.788	-1.034
2	12	1.109	2.524	-1.863	1.027
3	8	0.324	0.311	0.336	0.351
4	1	0.062	0.048	0.333	-0.318
5	7	0.015	-0.29	0.833	-0.242
6	5	-0.007	-0.129	0.166	0.131
7	10	-0.021	-0.168	0.51	-0.361
8	11	-0.038	-0.513	-0.139	1.713
9	15	-0.039	-0.295	0.164	0.499
10	3	-0.087	-0.706	0.256	1.455
11	9	-0.117	-0.26	0.511	-0.626
12	4	-0.324	-0.32	-0.258	-0.446
13	14	-0.455	-0.932	-0.281	0.874
14	13	-0.714	-0.913	0.01	-1.183
15	2	-1.204	-0.47	-2.368	-1.842

综合得分根据 F 值计算得到的综合得分进行降序排序，可得到各个样本的综合得分与排名情况，同时输出因子浓缩后的结果。

4 主成分分析法的优劣

4.1 优点

1. 降维效果好：主成分分析法是一种有效的数据降维方法，可以通过少量的主成分来概括大部分原始数据的信息。
2. 消除相关性：主成分分析法可以消除变量之间的相关性，避免多重共线性对回归分析等模型的影响。
3. 可以揭示数据内在规律：主成分分析法可以揭示数据内在规律，帮助研究者更深入地了解数据背后的本质特征。
4. 方便进行可视化分析：主成分分析法可以将高维数据映射到低维空间中，方便进行可视化分析。
5. 计算简单：主成分分析法的计算较为简单，可以使用现有的统计软件实现。

4.2 缺点

1. 可能会损失部分信息：主成分分析法是通过保留大部分变量的方差来概括数据，可能会损失部分信息。因此，在选择主成分的数量时需要权衡保留的信息量和降维效果。
2. 对异常值比较敏感：主成分分析法对异常值比较敏感，如果数据中存在异常值，可能会影响主成分的计算结果。
3. 对变量的标准化要求较高：主成分分析法需要对原始数据进行标准化处理，如果变量之间的尺度不同，可能会影响主成分的计算结果。
4. 只适用于线性关系：主成分分析法只适用于线性关系，如果变量之间存在非线性关系，可能会影响主成分的计算结果。

5 PCA 的未来发展方向

1. 非线性主成分分析：非线性主成分分析（NLPCA）是一种可以处理非线性数据的降维方法，可以更好地适应实际应用中的数据分析需求。
2. 多任务主成分分析：多任务主成分分析（MT-PCA）可以同时处理多个相关任务的数据，可以更好地利用不同任务之间的相关性。
3. 多视角主成分分析：多视角主成分分析（MS-PCA）可以将来自不同视角的数据进行融合，从而提高数据的精度和准确性。
4. 增量主成分分析：增量主成分分析（IPCA）可以在不重新计算所有主成分的情况下，对新数据进行增量式的主成分分析。
5. 非参数主成分分析：非参数主成分分析（NPPCA）可以对数据的分布进行

更为灵活的建模，可以更好地适应实际应用中的数据分布特征。

参考文献

[1] 王锦辉, 李亚红, 刘振峰. 主成分分析及其在数据分析中的应用[J]. 科技创新与应用, 2010, 6(23): 17-18.

[2] 何晓群.多元统计分析.北京：中国人民大学出版社，2012.

[3] 胡艳丽, 陈海燕. 主成分分析法在图像处理中的应用研究[J]. 电子科技, 2011, 24(5): 65-67.

[4] 张涛, 朱云龙, 肖玉林. 基于主成分分析的汽车故障诊断方法研究[J]. 机械设计与制造, 2012, 4(2): 38-40.

[5] 郑明, 胡世芳, 王维. 基于主成分分析的水质评价方法研究[J]. 水利科技与经济, 2019, 25(1): 67-70.

[6] 王珏, 王文涛. 基于主成分分析的网络流量异常检测方法[J]. 计算机工程与应用, 2014, 50(1): 135-138.