北京航空航天大学
经济管理学院
BEIHANG UNIVERSITY
SCHOOL OF ECONOMICS AND MANAGEMENT

第 5 讲：主成分分析

康雁飞

数量经济与商务统计系

Outline

1. 为什么主成分分析?
2. PCA 算法
3. PCA 与聚类
4. 主成分分析在 R 中的实现
5. 作业

Outline

主成分分析的目的

- 主成分分析，简称 PCA（Principal Component Analysis）
- 高维数据降维
- 易于展示

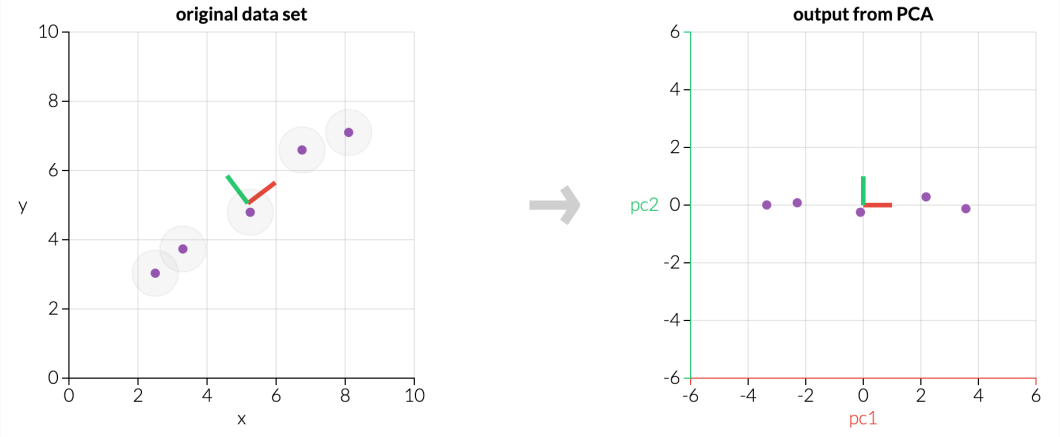
PCA 的主要功能

问题：如何展示一个 10 维数据?

- 在信息损失最小的前提下，对高维空间进行降维处理。
- 在一个低维空间辩识系统要比在高维空间容易得多。

怎样能够对数据进行降维处理?

通过平移 + 旋转省去数据变异不大方向的信息。



来源: https://setosa.io/ev/principal-component-analysis/.

Outline

PCA 算法

- 降维之后的每个维度都是原数据维度的线性组合：

$$\mathbf{y}_h = \sum_{j=1}^{p} \alpha_{hj}\mathbf{x}_j = X\alpha_h,\ (h = 1, \cdots, m,\ m << p).$$

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}_{n\times p} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1p} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{np} \end{bmatrix}_{n\times p} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1m} \\ y_{21} & \cdots & y_{2m} \\ \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & \cdots & y_{nm} \end{bmatrix}_{n\times m}$$

- 降维之后
  - 均值为 0：$\bar{\mathbf{y}}_h = 0$.
  - 维度之间互不相关：$\mathrm{cov}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j) = 0$.

PCA 算法

1. 数据标准化：将 X 的每一列减其均值，除以标准差。标准化的矩阵记为 Z，其中 $z_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j}$。

2. 计算 Z 的方差协方差矩阵，即 X 的相关系数矩阵，记 $\Sigma = \frac{1}{n} Z^T Z$。

3. 求 Σ 的特征值和特征向量，将 Σ 的特征值排序：$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p$，对应的特征向量进行排序，构成 Q，这个过程即将 Σ 对角化：$\Lambda = Q^T \Sigma Q$。

4. 计算 $Y = ZQ$，取 Y 的前 m 列，即 X 的前 m 个主成分得分。Q 的每一列叫作载荷向量。第 h 个主成分得分即：

$$\mathbf{y}_h = \sum_{j=1}^{p} q_{hj} \mathbf{z}_j = Z \mathbf{q}_h.$$

为什么上述算法成立?

我们的目标是

1. 想让 $\mathbf{y}_1$ 携带最多的信息，也就是 $\mathbf{y}_1$ 的方差取到最大值，依次类推。
2. 降维之后不相关。

$$\mathbf{q}_1 = \underset{\|\mathbf{q}_1\|=1}{\operatorname{argmax}} \{\mathbf{q}_1' \Sigma \mathbf{q}_1\}$$

$$\mathbf{q}_2 = \underset{\|\mathbf{q}_2\|=1}{\operatorname{argmax}} \{\mathbf{q}_2' \Sigma \mathbf{q}_2\} \quad \text{subject to} \quad \mathbf{q}_1' \Sigma \mathbf{q}_2 = 0$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{q}_\ell = \underset{\|\mathbf{q}_\ell\|=1}{\operatorname{argmax}} \{\mathbf{q}_\ell' \Sigma \mathbf{q}_\ell\} \quad \text{subject to} \quad \mathbf{q}_k' \Sigma \mathbf{q}_\ell = 0 \quad \forall k < \ell$$

PCA 算法

- 拉格朗日算法求得 q_1 满足 $\Sigma q_1 = \lambda_1 q_1$. 其中 $\lambda_1 = \mathrm{var}(\mathbf{y}_1)$.
- $\lambda_h = \mathrm{var}(\mathbf{y}_h)$.
- $\bar{\mathbf{y}}_h = 0$.
- $\mathrm{cov}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j) = 0$.

PCA 的累计贡献率

- 前 m 个主成分的累计贡献率：

$$\frac{\sum_{k=1}^{m} \lambda_k}{\sum_{k=1}^{p} \lambda_k}.$$

- 注意：$\sum_{k=1}^{p} \lambda_k = \sum_{k=1}^{p} \mathrm{var}(\mathbf{y}_k) = \sum_{k=1}^{p} \mathrm{var}(\mathbf{z}_k) = p.$

主成分与原变量的相关系数

- $\mathrm{cor}(\mathbf{y}_1, \mathbf{z}_j) = \sqrt{\lambda_1} q_{1j}$.

降维的两个特殊作用

1. 将一个高维变量系统有效的降至二维（抽象思维 $\rightarrow$ 形象思维）
2. 将一个高维变量系统有效的降至一维（综合指数）

降至二维

例：管理期刊遴选研究

	Citation	PaperNO	RefNO	NSFC
管理世界	33	175	54	1
系统理实	47	285	64	59
系工学报	21	60	35	24
中国软科	20	293	117	0
数量经济	37	212	22	10
中国管科	1	41	26	3
管理工程	8	44	40	13
企业管理	1	252	0	0
运筹学报	9	22	9	14
经济理管	3	97	73	0
管理现代	6	130	5	1
中国工经	42	194	25	1
金融研究	15	202	12	0
经济科学	4	82	28	2
科学学研	20	72	54	11
科研管理	20	83	49	10

主成分和原变量之间的关系?

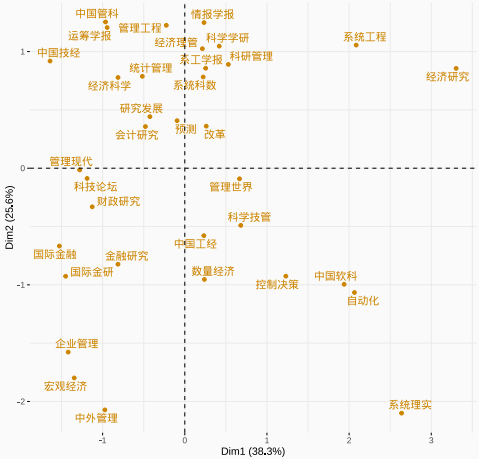
载荷（loadings）

```
##
## Loadings:
##          Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4
## Citation  0.634         0.395  0.664
## PaperNO         -0.936  0.281 -0.197
## RefNO     0.648  0.246  0.131 -0.709
## NSFC      0.414 -0.251 -0.865  0.132
##
##                Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4
## SS loadings      1.00   1.00   1.00   1.00
## Proportion Var   0.25   0.25   0.25   0.25
## Cumulative Var   0.25   0.50   0.75   1.00
```

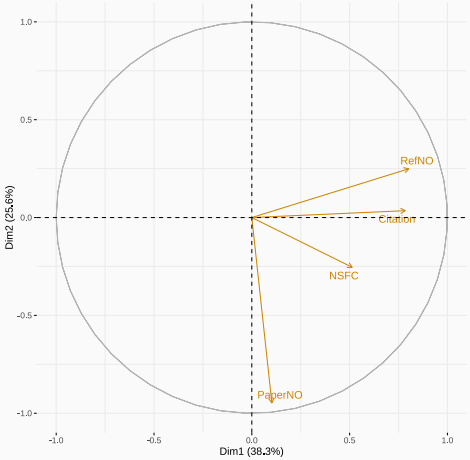
主成分得分（scores）

```
##                Comp.1      Comp.2      Comp.3      Comp.4
## 管理世界   0.66652842 -0.09044110  0.89506349 -0.33498953
## 系统理实   2.63911891 -2.10015964 -0.99424599 -0.10131949
## 系工学报   0.25449784  0.85696057 -0.85180952  0.28562855
## 中国软科   1.93936103 -0.99528927  1.47169792 -2.66842290
## 数量经济   0.23870367 -0.95372324  0.54386527  0.58036927
## 中国管科  -0.96426677  1.25396608 -0.36413074 -0.13038629
## 管理工程  -0.22495473  1.22511228 -0.61375999 -0.24190476
## 企业管理  -1.41905599 -1.57657886  0.43351126 -0.02271772
## 运筹学报  -0.94468388  1.20595510 -0.87475479  0.66398914
## 经济理管   0.21410146  1.02476840  0.24094165 -1.47497153
## 管理现代  -1.27895150 -0.01450266  0.03939508  0.31321626
## 中国工经   0.23218572 -0.57833643  0.97492533  0.62785225
## 金融研究  -0.81275449 -0.82304264  0.53731028  0.18554668
## 经济科学  -0.81233253  0.77792029 -0.10640871 -0.21336411
## 科学学研   0.41931154  1.04656538 -0.15223777 -0.36049748
## 科研管理   0.53040476  0.88986910  0.05883912 -0.01311399
## 宏观经济  -1.34581534 -1.79823718  0.53419476 -0.01402184
## 会计研究  -0.47904284  0.35704298  0.28179363 -0.29612825
```

PCA 得分散点图（高维数据的可视化）



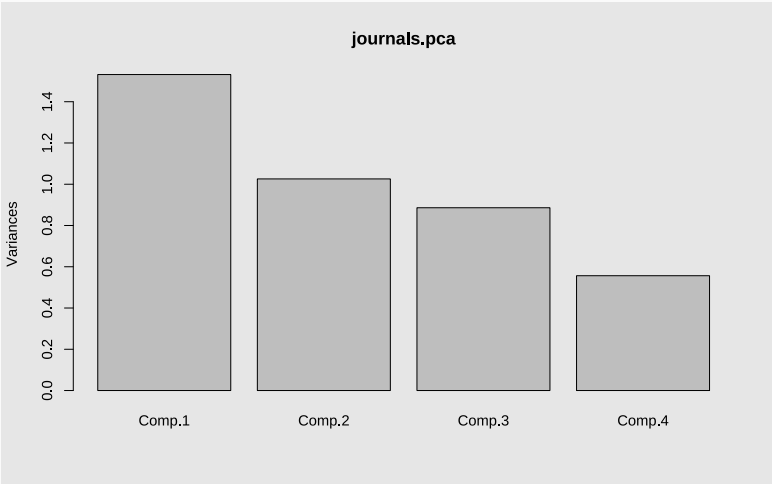
PCA 变量图（相关圆图）


RefNO
Citation
NSFC
PaperNO
Dim2 (25.6%)
Dim1 (38.3%)
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0

前两个主成分解释了多少信息?

```
## Importance of components:
##                           Comp.1    Comp.2    Comp.3    Comp.4
## Standard deviation     1.2376191 1.0128027 0.9412763 0.7460085
## Proportion of Variance 0.3829253 0.2564423 0.2215003 0.1391322
## Cumulative Proportion  0.3829253 0.6393676 0.8608678 1.0000000
```

碎石图


journals.pca
Variances
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1.2
1.4
Comp.1
Comp.2
Comp.3
Comp.4

降至一维（综合指数）

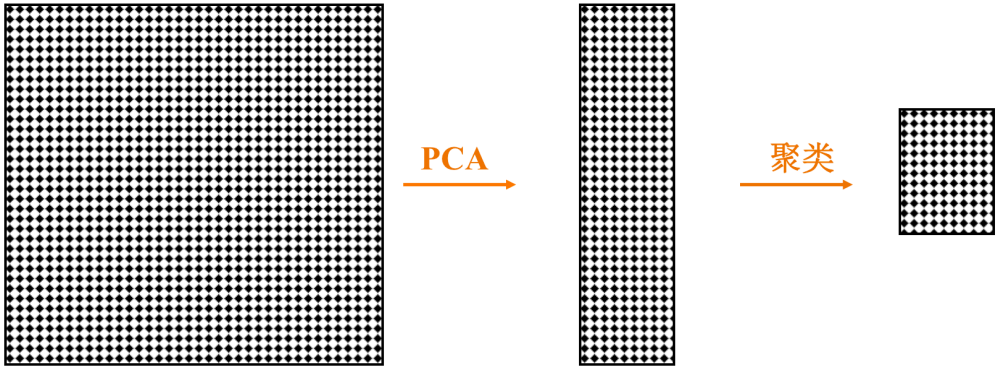
例：拟评估英国各地区农业生产水平。48 个地区，10 种农作物：小麦（x_1）、大麦（x_2）、燕麦（x_3）、土豆（x_4）、菜豆（x_5）、马铃薯（x_6）、萝卜（x_7）、饲料甜菜（x_8）、临时牧场干草（x_9）、永久牧场干草（x_{10}）。

$$PC1 = 0.39x_1 + 0.37x_2 + 0.39x_3 + 0.27x_4 + 0.22x_5 + 0.30x_6 + 0.32x_7 + 0.26x_8 + 0.24x_9 + 0.34x_{10}$$

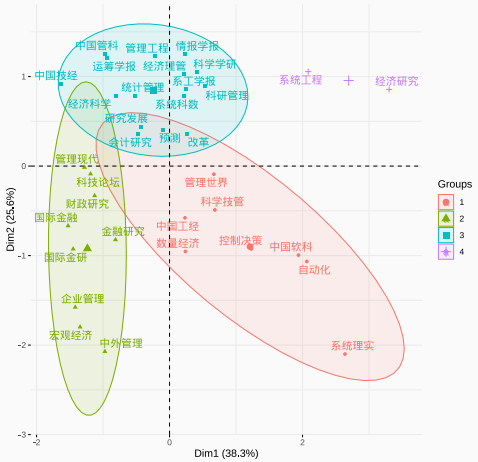
精度为 47.6%。

Outline

海量数据的简约处理



PCA + 聚类


中国管科
管理工程
情报学报
运筹学报
经济管理
科学学研
中国软科
统计管理
系工学报
科研管理
经济科学
系统科数
研究发展
预测
改革
会计研究
管理现代
科技论坛
财政研究
国际金融
金融研究
国际金研
企业管理
宏观经济
中外管理
管理世界
科学技管
中国工经
数量经济
控制决策
中国软科
自动化
系统理实
系统工程
经济研究
Groups
1
2
3
4
Dim2 (25.6%)
Dim1 (38.3%)
1
0
-1
-2
-3
-2
0
2

Outline

PCA

```
journals.pca <- princomp(journals,cor = TRUE)
names(journals.pca)
```

```
## [1] "sdev"     "loadings" "center"   "scale"    "n.obs"    "scores"   "call"
```

```
summary(journals.pca)
```

```
## Importance of components:
##                           Comp.1    Comp.2    Comp.3    Comp.4
## Standard deviation     1.2376191 1.0128027 0.9412763 0.7460085
## Proportion of Variance 0.3829253 0.2564423 0.2215003 0.1391322
## Cumulative Proportion  0.3829253 0.6393676 0.8608678 1.0000000
```

PCA 载荷

```
journals.pca$loadings
```

```
##
## Loadings:
##          Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4
## Citation  0.634         0.395  0.664
## PaperNO         -0.936  0.281 -0.197
## RefNO     0.648  0.246  0.131 -0.709
## NSFC      0.414 -0.251 -0.865  0.132
##
##                Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4
## SS loadings      1.00   1.00   1.00   1.00
## Proportion Var   0.25   0.25   0.25   0.25
## Cumulative Var   0.25   0.50   0.75   1.00
```

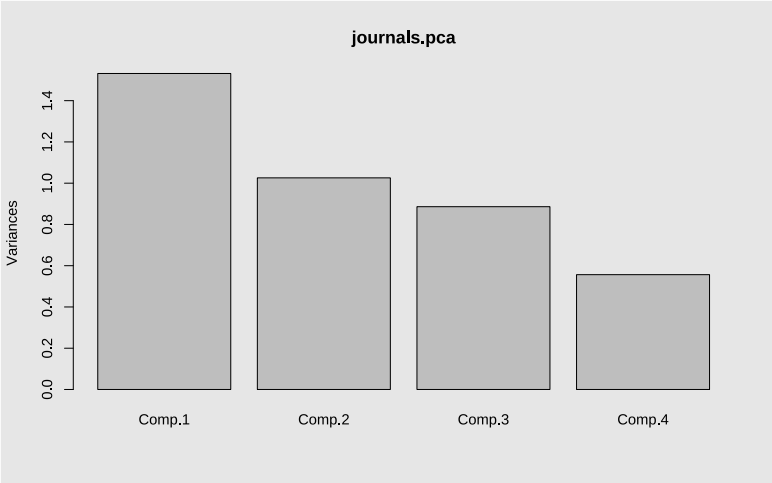
PCA 得分

```
journals.pca$scores
```

```
##                Comp.1      Comp.2      Comp.3      Comp.4
## 管理世界  0.66652842 -0.09044110  0.89506349 -0.33498953
## 系统理实  2.63911891 -2.10015964 -0.99424599 -0.10131949
## 系工学报  0.25449784  0.85696057 -0.85180952  0.28562855
## 中国软科  1.93936103 -0.99528927  1.47169792 -2.66842290
## 数量经济  0.23870367 -0.95372324  0.54386527  0.58036927
## 中国管科 -0.96426677  1.25396608 -0.36413074 -0.13038629
## 管理工程 -0.22495473  1.22511228 -0.61375999 -0.24190476
## 企业管理 -1.41905599 -1.57657886  0.43351126 -0.02271772
## 运筹学报 -0.94468388  1.20595510 -0.87475479  0.66398914
## 经济理管  0.21410146  1.02476840  0.24094165 -1.47497153
## 管理现代 -1.27895150 -0.01450266  0.03939508  0.31321626
## 中国工经  0.23218572 -0.57833643  0.97492533  0.62785225
## 金融研究 -0.81275449 -0.82304264  0.53731028  0.18554668
## 经济科学 -0.81233253  0.77792029 -0.10640871 -0.21336411
## 科学学研  0.41931154  1.04656538 -0.15223777 -0.36049748
## 科研管理  0.53040476  0.88986910  0.05883912 -0.01311399
```

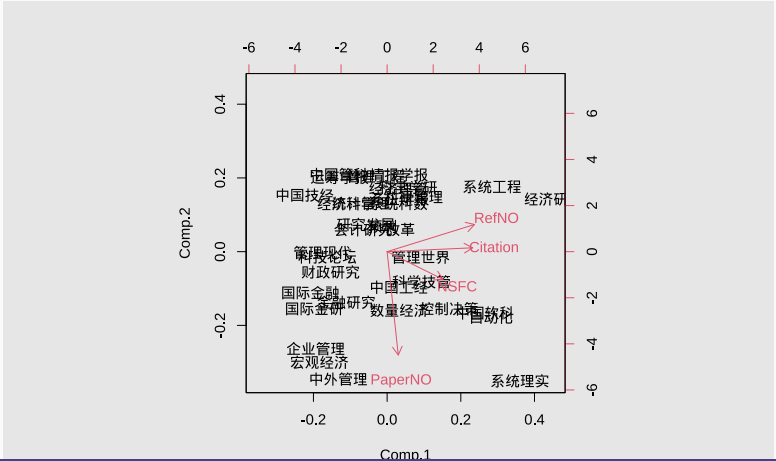
PCA 碎石图

```
plot(journals.pca)
```



Biplot

```
par(family = 'SimHei')
biplot(journals.pca)
```



其他相关学习材料

1. 基于 factoextra 包的 PCA 可视化，请参考 https://www.rdocumentation.org/packages/factoextra/versions/1.0.7.
2. 关于 PCA 的交互可视化：https://setosa.io/ev/principal-component-analysis/.

Outline

1. 对“污染数据”做 PCA 分析和聚类分析（数据见污染数据.xlsx)。
2. 对房地产数据做 PCA 分析和聚类分析（数据见 houses.csv)。