# Principal Components Analysis

# 主成分分析

肖　磊，2026 年 4 月 30 日

# 已学知识点 (Recap)

## 第 10 章 数据矩阵的因子分解

$$\mathcal{X}_{n\times p} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{[1]} & \boldsymbol{x}_{[2]} & \cdots & \boldsymbol{x}_{[p]} \end{pmatrix}$$

### 10.1 几何的角度

- $\mathcal{X}$ 的每一行 (观测点) $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}$ 是 $\mathbb{R}^p$ 中的一个向量. 所以 $\mathcal{X}$ 是 $\mathbb{R}^p$ 中的 $n$ 个点.
- $\mathcal{X}$ 的每一列 (变量) $\boldsymbol{x}_{[j]}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个向量. 所以 $\mathcal{X}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的 $p$ 个点.

# 已学知识点 (Recap)

## 第 10 章 数据矩阵的因子分解

### 10.2 拟合 $p$ 维数据点

$$\mathcal{X}_{n\times p} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{[1]} & \boldsymbol{x}_{[2]} & \cdots & \boldsymbol{x}_{[p]} \end{pmatrix}$$

- 通过将每一个 $p$ 维观测点投影到更低维度的空间上以图形方式表示.
- 第一个主因子轴 $\boldsymbol{u}_1$ 确定了一条过原点的直线 $F_1$. 这条直线通过使正交距离 $\sum_{i=1}^{n} \| \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{x}_i} \|^2$ 最小化而得到. 因子 $\boldsymbol{u}_1$ 由矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 的最大特征值对应的特征向量确定. $p$ 维观测点在直线上的坐标由 $z_1 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_1$ 给出.
- 第二个主因子轴 $\boldsymbol{u}_2$ 由矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 的第二大特征值对应的特征向量确定. $p$ 维观测点在平面上的坐标由 $z_1 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_1$ 与 $z_2 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_2$ 给出.
- 前 $q$ 个主因子轴 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, , \boldsymbol{u}_q$ 由矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 的前 $q$ 个大特征值对应的特征向量确定. $p$ 维观测点在 $q$ 维子空间上的坐标由 $z_1 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_1, z_2 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_2, \ldots, z_q = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_q$ 给出.

# 已学知识点 (Recap)

## 第 10 章 数据矩阵的因子分解

### 10.3 拟合 $n$ 维变量点

$$\mathcal{X}_{n\times p} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{[1]} & \boldsymbol{x}_{[2]} & \cdots & \boldsymbol{x}_{[p]} \end{pmatrix}$$

- 通过将每一个 $n$ 维变量点投影到更低维度的空间上以图形方式表示.
- 第一个主因子轴 $\boldsymbol{v}_1$ 确定了一条过原点的直线 $G_1$. 该直线通过使正交距离 $\sum_{j=1}^{p} \left\| \boldsymbol{x}_{[j]} - \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{x}_{[j]}} \right\|^2$ 最小化而得到. 因子 $\boldsymbol{v}_1$ 由矩阵 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 的最大特征值对应的特征向量确定. $n$ 维变量点在直线上的坐标由 $\boldsymbol{w}_1 = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1$ 给出.
- 第二个主因子轴 $\boldsymbol{v}_2$ 由矩阵 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 的第二大特征值对应的特征向量确定. $n$ 维变量点在平面上的坐标由 $\boldsymbol{w}_1 = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1$ 与 $\boldsymbol{w}_2 = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2$ 给出.
- 前 $q$ 个主因子轴 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, , \boldsymbol{v}_q$ 的方向由矩阵 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 的前 $q$ 个大特征值对应的特征向量确定. $n$ 维变量点在 $q$ 维子空间上的坐标由 $\boldsymbol{w}_1 = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{w}_2 = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_q = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_q$ 给出.

# 已学知识点 (Recap)

## 第 10 章 数据矩阵的因子分解

### 10.4 两个子空间的关系

$$\mathcal{X}_{n\times p} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{[1]} & \boldsymbol{x}_{[2]} & \cdots & \boldsymbol{x}_{[p]} \end{pmatrix}$$

- 矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 与 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 有相同的非零特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_r$，其中 $r = \mathrm{rank}(\mathcal{X})$.
- 矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 的特征向量可以由矩阵 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 的特征向量计算得出，反之亦然：

$$\boldsymbol{u}_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \mathcal{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}_k, \qquad \boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \mathcal{X} \boldsymbol{u}_k.$$

- $\mathcal{X}$ 的变量 (列) 点在 $q$ 维子空间中的坐标可以很容易地通过 $\boldsymbol{w}_k = \sqrt{\lambda_k}\, \boldsymbol{u}_k$ 计算得到.

# 已学知识点 (Recap)

## 第 10 章 数据矩阵的因子分解

### 10.5 实际计算

$$\mathcal{X}_{n\times p} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{[1]} & \boldsymbol{x}_{[2]} & \cdots & \boldsymbol{x}_{[p]} \end{pmatrix}$$

- 具体实施数据矩阵的因子分解时，要计算矩阵 $\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p$ 以及对应的特征向量 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, , \boldsymbol{u}_p$.

  通过绘制 $\boldsymbol{z}_1 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_1$ 与 $\boldsymbol{z}_2 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_2$ 的关系图 (如果需要的话，还可以绘制与 $\boldsymbol{z}_3 = \mathcal{X}\boldsymbol{u}_3$ 的关系图)，即可得到 $n$ 个观测点的可视化表示. 通过绘制 $\boldsymbol{w}_1 = \sqrt{\lambda_1}\,\boldsymbol{u}_1$ 与 $\boldsymbol{w}_2 = \sqrt{\lambda_2}\,\boldsymbol{u}_2$ 的关系图 (如果需要的话，还可以绘制与 $\boldsymbol{w}_3 = \sqrt{\lambda_3}\,\boldsymbol{u}_3$ 的关系图)，即可得到 $p$ 个变量点的可视化表示.

- 因子表示于 $q$ 维子空间的质量可以用前 $q$ 个因子的惯性百分比 $\tau_q$ 来评价，其中

$$\tau_q = \frac{\lambda_1 + \cdots + \lambda_q}{\lambda_1 + \cdots + \lambda_q + \lambda_{q+1} + \cdots + \lambda_p}.$$

# 概述

## 第 11 章 主成分分析 (Principal Components Analysis, PCA)

标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

实践中的主成分 (Principal Components in Practice)

主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

归一化主成分分析 (Normalized Principal Components Analysis)

作为因子分析方法的主成分 (Principal Components as a Factorial Method)

共同主成分 (Common Principal Components)

波士顿房屋数据 (Boston Housing)

美国公司数据集 (U.S. Companies Data)

# 引言

- 讨论多元数据集的降维问题.
  - 数据矩阵 $\mathcal{X}$ 的行看作是对 $p$ 元随机变量 $\boldsymbol{X}$ 的观测结果.
  - 对 $\boldsymbol{X}$ 进行降维的核心思路是通过线性组合来实现.
  - 目的：(1) 更易于解读.
    (2) 用作更为复杂的数据分析的中间步骤.

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & \cdots & X_p \\ \downarrow & \downarrow & \cdots & \downarrow \end{matrix} = \boldsymbol{X}$$

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \cdots \\ \boldsymbol{x}_n^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

- 更准确地说，寻找能在 $\boldsymbol{X}$ 的观测值之间产生最大离散程度 (方差) 的线性组合.
- 介绍主成分背后的基本思想和技术要素.
- 如何通过研究主成分与 $\boldsymbol{X}$ 的初始变量之间的相关性来解释主成分.
- 主成分的统计推断方法.
- 讨论主成分的标准化版本.
- 示例.

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 研究下述加权平均

SLC: 标准线性组合

$$\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \sum_{j=1}^{p} \delta_j X_j = \delta_1 X_1 + \delta_2 X_2 + \cdots + \delta_p X_p \,, \quad \text{such that} \quad \sum_{j=1}^{p} \delta_j^2 = 1$$

- 选择什么样的 SLC (线性组合)?

$$\max_{\{\boldsymbol{\delta}:\ |\boldsymbol{\delta}|=1\}} \mathrm{Var}\left(\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right) = \max_{\{\boldsymbol{\delta}:\ |\boldsymbol{\delta}|=1\}} \boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}}\mathrm{Var}\left(\boldsymbol{X}\right)\boldsymbol{\delta}$$

- 通过协方差矩阵的谱分解，可以找到 $\boldsymbol{\delta}$ 的那些有趣的 “方向”.

- $\boldsymbol{\delta}$ 由与协方差矩阵 $\Sigma = \mathrm{Var}(\boldsymbol{X})$ 的最大特征值 $\lambda_1$ 对应的特征向量 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 给出.

**Theorem 2.5** *If $\mathcal{A}$ and $\mathcal{B}$ are symmetric and $\mathcal{B} > 0$, then the maximum of $\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{B}\,\boldsymbol{x}}$ is given by the largest eigenvalues of $\mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}$. More generally,*

$$\max_{x} \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{B}\,\boldsymbol{x}} = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p = \min_{x} \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{B}\,\boldsymbol{x}}$$

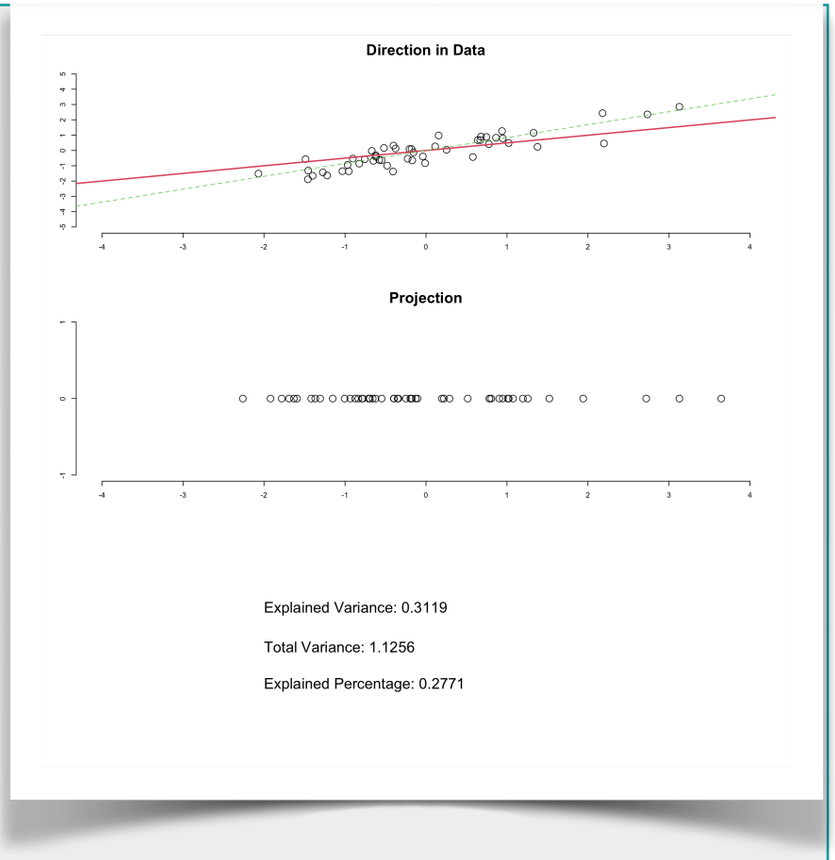
*where $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p$ denote the eigenvalues of $\mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}$. The vector which maximizes (minimizes) $\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{B}\,\boldsymbol{x}}$ is the eigenvector of $\mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}$ which corresponds to the largest (smallest) eigenvalue of $\mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}$. If $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{B}\,\boldsymbol{x} = 1$, we get*

$$\max_{x}\ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x} = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p = \min_{x}\ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathcal{A}\,\boldsymbol{x}$$

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 一个均值为零的数据集的任意投影.

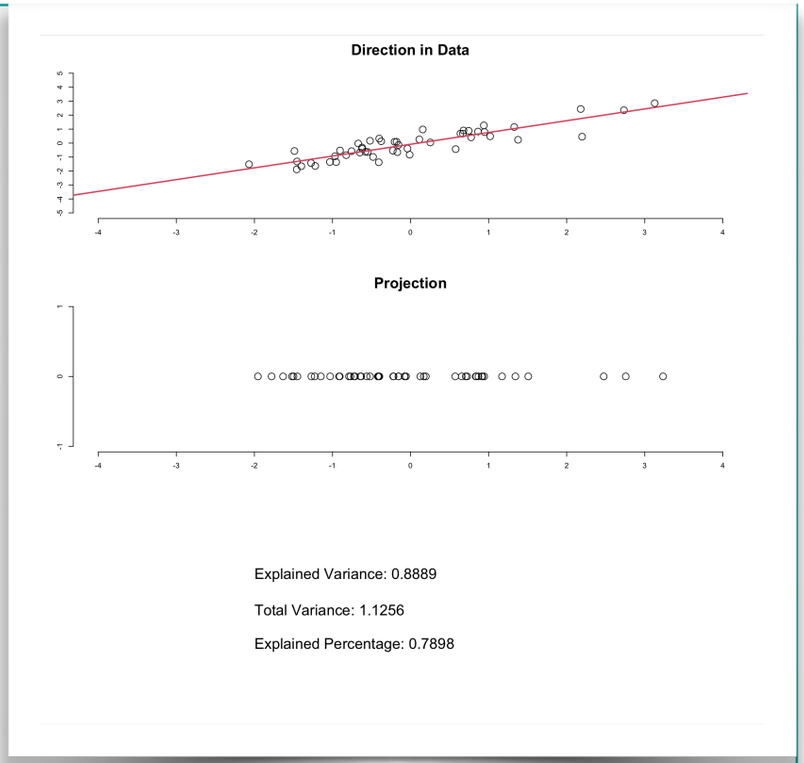
```
par(mfrow=c(3, 1))
set.seed(1963)
x <- rnorm(50)
y = 0.8 * x + rnorm(50, 0, 1/2)
a <- 0.5
plot(x, y, xlim = c(-4, 4), ylim = c(-5, 5), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', cex = 2)
axis(1, at = -4:4)
axis(2, at = -5:5)
abline(0, a, col = 2, lwd = 2)
y.lm <- lm(y ~ x)
b <- coef(y.lm)[2]
abline(0, b, col = 3, lty = 2)
title(main = 'Direction in Data', cex.main = 2)

proj_x <- (x + a * y) / (1 + a^2)
plot(proj_x, rep(0, 50), xlim = c(-4, 4), ylim = c(-1, 1), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', cex = 2)
axis(1, at = -4:4)
axis(2, at = -1:1)
title(main = 'Projection', cex.main = 2)

plot(proj_x, rep(0, 50), xlim = c(-4, 4), ylim = c(-1, 1), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', type = 'n')
text(-2, 0.5, adj = 0, 'Explained Variance: 0.3119', cex = 2)
text(-2, 0, adj = 0, 'Total Variance: 1.1256', cex = 2)
text(-2, -0.5, adj = 0, 'Explained Percentage: 0.2771', cex = 2)
```



# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 投影能够反映同一数据集中的大部分方差.

```
par(mfrow=c(3, 1))
set.seed(1963)
x <- rnorm(50)
y = 0.8 * x + rnorm(50, 0, 1/2)
plot(x, y, xlim = c(-4, 4), ylim = c(-5, 5), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', cex = 2)
axis(1, at = -4:4)
axis(2, at = -5:5)
y.lm <- lm(y ~ x)
abline(y.lm, col=2, lwd=2)
title(main = 'Direction in Data', cex.main = 2)

a <- coef(y.lm)[2]
proj_x <- (x + a * y) / (1 + a^2)
plot(proj_x, rep(0, 50), xlim = c(-4, 4), ylim = c(-1, 1), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', cex = 2)
axis(1, at = -4:4)
axis(2, at = -1:1)
title(main = 'Projection', cex.main = 2)

plot(proj_x, rep(0, 50), xlim = c(-4, 4), ylim = c(-1, 1), axes = FALSE, xlab = '', ylab = '', type = 'n')
text(-2, 0.5, adj = 0, 'Explained Variance: 0.8889', cex = 2)
text(-2, 0, adj = 0, 'Total Variance: 1.1256', cex = 2)
text(-2, -0.5, adj = 0, 'Explained Percentage: 0.7898', cex = 2)
```



# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 应该选择哪个SLC?

$$\max_{\{\delta:\ |\delta|=1\}} \mathrm{Var}\left(\delta^{\mathrm{T}}X\right) = \max_{\{\delta:\ |\delta|=1\}} \delta^{\mathrm{T}}\mathrm{Var}\left(X\right)\delta$$

  - 方差最大的 SLC 即为第一主成分 (principal component) $y_1 = \gamma_1^{\mathrm{T}}X.$
  - 与 $\gamma_1$ 的方向正交，具有第二大方差的 SLC: $y_2 = \gamma_2^{\mathrm{T}}X$，即为第二主成分.
  - 以这种方式进行并用矩阵符号表示，对于均值为 $\mathrm{E}(X) = \mu$ 和协方差矩阵为 $\mathrm{Var}(X) = \Sigma = \Gamma\Lambda\Gamma^{\mathrm{T}}$ 的随机变量 $X$，其主成分变换的定义为

$$Y = \Gamma^{\mathrm{T}}\left(X - \mu\right)$$

$$\Gamma = \left(\gamma_1, \gamma_2, \cdots\gamma_p\right)$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{pmatrix}$$

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 例: 设 $\boldsymbol{X} \sim N_2\left(\boldsymbol{0}, \Sigma\right)$ 且

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho > 0$$

  - $\Sigma$ 的特征值为

$$\lambda_1 = 1 + \rho, \quad \lambda_2 = 1 - \rho$$

  - 对应的特征向量是

$$\boldsymbol{\gamma}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

  - 则主成分变换为

$$\boldsymbol{Y} = \Gamma^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}\right) = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2}\left(X_1 + X_2\right) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\left(X_1 - X_2\right) \end{pmatrix}$$

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

- 例: 设 $\boldsymbol{X} \sim N_2\left(\mathbf{0}, \Sigma\right)$ 且

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho > 0$$

  - 第一主成分为 $Y_1 = \dfrac{\sqrt{2}}{2}\left(X_1 + X_2\right)$
  - 第二主成分为 $Y_2 = \dfrac{\sqrt{2}}{2}\left(X_1 - X_2\right)$

$$\begin{aligned} \operatorname{Var}\left(Y_1\right) &= \operatorname{Var}\left[\frac{\sqrt{2}}{2}\left(X_1 + X_2\right)\right] = \frac{1}{2}\operatorname{Var}\left(X_1 + X_2\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[\operatorname{Var}\left(X_1\right) + \operatorname{Var}\left(X_2\right) + 2\operatorname{Cov}\left(X_1, X_2\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left(1 + 1 + 2\rho\right) = 1 + \rho = \lambda_1 \end{aligned}$$

$$\operatorname{Var}\left(Y_2\right) = 1 - \rho = \lambda_2$$

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

定理 11.1 对给定的 $\boldsymbol{X} \sim (\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$，设 $\boldsymbol{Y} = \Gamma^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})$ 为主成分变换. 则

$$\mathrm{E}(Y_j) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

$$\mathrm{Var}(Y_j) = \lambda_j, \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

$$\mathrm{Cov}(Y_i, Y_j) = 0, \quad i \neq j$$

$$\mathrm{Var}(Y_1) \geq \mathrm{Var}(Y_2) \geq \cdots \geq \mathrm{Var}(Y_p) \geq 0$$

$$\sum_{j=1}^{p} \mathrm{Var}(Y_j) = \mathrm{tr}(\Sigma)$$

$$\prod_{j=1}^{p} \mathrm{Var}(Y_j) = |\Sigma|$$

# 标准线性组合 (Standardized Linear Combination)

定理 11.2 不存在方差大于 $\lambda_1 = \mathrm{Var}\left(Y_1\right)$ 的标准线性组合 (SLC).

定理 11.3 如果 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 是与 $\boldsymbol{X}$ 的前 $k$ 个主成分不相关的标准线性组合，则当 $\boldsymbol{Y}$ 为第 $\left(k+1\right)$ 个主成分时可使其方差最大.

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 在实践中，主成分变换要用到相应的估计量：$\boldsymbol{\mu}$ 用 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 替换，$\Sigma$ 用 $\mathcal{S}$ 替换，等等.
  - 如果 $\boldsymbol{g}_1$ 是 $\mathcal{S}$ 的首个特征向量，则首个主成分为 $y_1 = \left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right) \boldsymbol{g}_1$.
  - 一般而言，如果 $\mathcal{S}$ 的谱分解为 $\mathcal{S} = \mathcal{G}\,\mathcal{L}\,\mathcal{G}^{\mathrm{T}}$，则主成分可如下得到

$$\mathcal{G} = \left(\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots \boldsymbol{g}_p\right) \longleftarrow \mathcal{Y} = \left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right) \mathcal{G} \longrightarrow \mathcal{L} = \begin{pmatrix} \ell_1 & & & \\ & \ell_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ell_p \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{S}_{\mathcal{Y}} = \frac{1}{n}\mathcal{Y}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{Y} = \frac{1}{n}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \mathcal{H} \left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right) \mathcal{G}$$

$$= \frac{1}{n}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X}\mathcal{G} = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{n}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X}\right)\mathcal{G}$$

$$= \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\mathcal{S}\mathcal{G} = \mathcal{L} \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{Var}\left(y_i\right) = \ell_i$$

$\mathcal{H}\mathbf{1}_n\bar{\boldsymbol{x}} = \mathbf{0}$

Centering matrix: $\mathcal{H} = \mathcal{I} - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^{\mathrm{T}}$

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 主成分分析 (PC) 方法对尺度变化很敏感.
  - 如果给一个变量乘以一个常数，就会得到不同的特征值和特征向量.
  - 这是因为我们作的是协方差矩阵的特征值分解，而非相关矩阵的特征值分解.

主成分变换应当应用于每个变量尺度大致相同的数据.

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 例: 银行钞票数据集. 未进行数据的标准化.
  - $\mathcal{X}$ 的均值向量为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \left(214.9\ ,\ 130.1\ ,\ 130.0\ ,\ 9.4\ ,\ 10.7\ ,\ 140.5\right)^{\mathrm{T}}$$

```
library(mclust)
data(banknote)
str(banknote)
head(banknote)
X <- banknote[, 2:7]
bar_X <- apply(X, 2, mean)
round(bar_X, digits = 1)
```

  - 样本协方差矩阵为

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 0.143 & 0.032 & 0.023 & -0.104 & -0.019 & 0.085 \\ 0.032 & 0.131 & 0.109 & 0.217 & 0.106 & -0.210 \\ 0.023 & 0.109 & 0.164 & 0.286 & 0.131 & -0.242 \\ -0.104 & 0.217 & 0.286 & 2.097 & 0.165 & -1.042 \\ -0.019 & 0.106 & 0.131 & 0.165 & 0.648 & -0.552 \\ 0.085 & -0.210 & -0.242 & -1.042 & -0.552 & 1.334 \end{pmatrix}$$

```
n <- dim(X)[1]
S <- n * var(X) / (n-1)
round(S, digits = 3)
```

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 例: 银行钞票数据集. 未进行数据的标准化.
  - $\mathcal{S}$ 的特征值是

$$\ell = (3.015\ ,\ 0.940\ ,\ 0.245\ ,\ 0.196\ ,\ 0.086\ ,\ 0.036)^{\mathrm{T}}$$

```
eigen_S <- eigen(S)
eigen_values <- eigen_S$values
round(eigen_values, digits = 3)
```

  - 对应的特征向量为

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{g}_1 & \boldsymbol{g}_2 & \boldsymbol{g}_3 & \boldsymbol{g}_4 & \boldsymbol{g}_5 & \boldsymbol{g}_6 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ -0.044 & 0.011 & -0.326 & 0.562 & 0.753 & 0.098 \\ 0.112 & 0.071 & -0.259 & 0.455 & -0.347 & -0.767 \\ 0.139 & 0.066 & -0.345 & 0.415 & -0.535 & 0.632 \\ 0.768 & -0.563 & -0.218 & -0.186 & 0.100 & -0.022 \\ 0.202 & 0.659 & -0.557 & -0.451 & 0.102 & -0.035 \\ -0.579 & -0.489 & -0.592 & -0.258 & -0.084 & -0.046 \end{pmatrix}$$

```
eigen_vectors <- eigen_S$vectors
round(eigen_vectors, digits = 3)
```

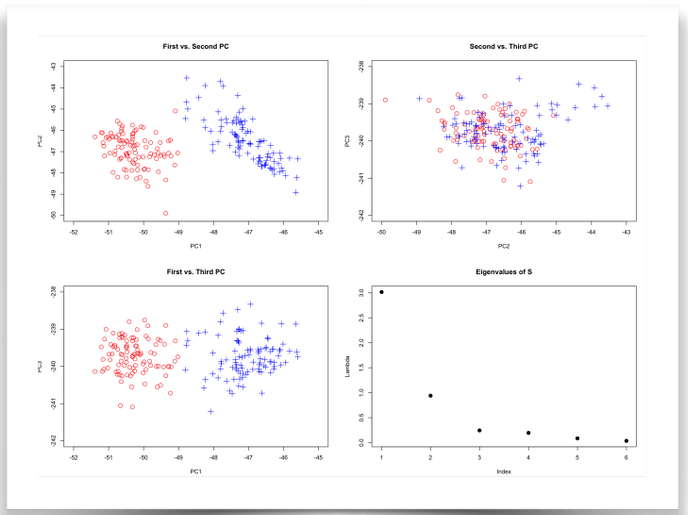
# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 例: 银行钞票数据集. 未进行数据的标准化.

counterfeit

```
Y <- X %*% eigen_vectors
par(mfrow=c(2, 2))
plot(Y[1:100, 1], Y[1:100, 2], xlim = c(-52, -45), ylim = c(-50, -43), xlab = 'PC1', ylab = 'PC2', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y[101:200, 1], Y[101:200, 2], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'First vs. Second PC')

plot(Y[1:100, 2], Y[1:100, 3], xlim = c(-50, -43), ylim = c(-242, -238), xlab = 'PC2', ylab = 'PC3', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y[101:200, 2], Y[101:200, 3], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'Second vs. Third PC')

plot(Y[1:100, 1], Y[1:100, 3], xlim = c(-52, -45), ylim = c(-242, -238), xlab = 'PC1', ylab = 'PC3', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y[101:200, 1], Y[101:200, 3], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'First vs. Third PC')

plot(1:6, eigen_values, xlab = 'Index', ylab = 'Lambda', main = 'Eigenvalues of S', cex = 1.5, pch = 16)
```

genuine



# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 为了解主成分对变量尺度变化的敏感程度，假设在银行数据集里，$X_1$，$X_2$，$X_3$ 和 $X_6$ 以厘米为单位进行测量，而 $X_4$ 和 $X_5$ 仍以毫米为单位.

```
X_new <- X
X_new[, 1:3] <- X[, 1:3] / 10
X_new[, 6] <- X[, 6] / 10
head(X)
head(X_new)
```

  - 不同尺度下的数据集 $\mathcal{X}$:

```
> head(X)
     Length  Left Right Bottom  Top Diagonal
[1,]  214.8 131.0 131.1    9.0  9.7    141.0
[2,]  214.6 129.7 129.7    8.1  9.5    141.7
[3,]  214.8 129.7 129.7    8.7  9.6    142.2
[4,]  214.8 129.7 129.6    7.5 10.4    142.0
[5,]  215.0 129.6 129.7   10.4  7.7    141.8
[6,]  215.7 130.8 130.5    9.0 10.1    141.4
```

```
> head(X_new)
     Length  Left Right Bottom  Top Diagonal
[1,]  21.48 13.10 13.11    9.0  9.7    14.10
[2,]  21.46 12.97 12.97    8.1  9.5    14.17
[3,]  21.48 12.97 12.97    8.7  9.6    14.22
[4,]  21.48 12.97 12.96    7.5 10.4    14.20
[5,]  21.50 12.96 12.97   10.4  7.7    14.18
[6,]  21.57 13.08 13.05    9.0 10.1    14.14
```

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 为了解主成分对变量尺度变化的敏感程度，假设在银行数据集里，$X_1$，$X_2$，$X_3$ 和 $X_6$ 以厘米为单位进行测量，而 $X_4$ 和 $X_5$ 仍以毫米为单位.
  - 新数据集的均值向量为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \left(21.5\ ,\ 13.0\ ,\ 13.0\ ,\ 9.4\ ,\ 10.7\ ,\ 14.0\right)^{\mathrm{T}}$$

```
bar_X_new <- apply(X_new, 2, mean)
round(bar_X_new, digits = 1)
```

  - 新数据集的协方差矩阵为

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 0.001 & 0.000 & 0.000 & -0.010 & -0.002 & 0.001 \\ 0.000 & 0.001 & 0.001 & 0.022 & 0.011 & -0.002 \\ 0.000 & 0.001 & 0.002 & 0.029 & 0.013 & -0.002 \\ -0.010 & 0.022 & 0.029 & 2.097 & 0.165 & -0.104 \\ -0.002 & 0.011 & 0.013 & 0.165 & 0.648 & -0.055 \\ 0.001 & -0.002 & -0.002 & -0.104 & -0.055 & 0.013 \end{pmatrix}$$

```
S_new <- n * var(X_new) / (n-1)
round(S_new, digits = 3)
```

# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 为了解主成分对变量尺度变化的敏感程度，假设在银行数据集里，$X_1$，$X_2$，$X_3$ 和 $X_6$ 以厘米为单位进行测量，而 $X_4$ 和 $X_5$ 仍以毫米为单位.

```
eigen_S_new <- eigen(S_new)
eigen_values_new <-
eigen_S_new$values
round(eigen_values_new, digits = 4)
```

  - 新的协方差矩阵 $\mathcal{S}$ 的特征值为

$$\boldsymbol{\ell} = (2.1224\ ,\ 0.6326\ ,\ 0.0047\ ,\ 0.0021\ ,\ 0.0009\ ,\ 0.0004)^{\mathrm{T}}$$

  - 对应的特征向量是

```
eigen_vectors_new <- as.matrix(eigen_S_new$vectors)
round(eigen_vectors, digits = 4)
```

$$\mathcal{G} = \begin{array}{c} \begin{matrix} \boldsymbol{g}_1 & \boldsymbol{g}_2 & \boldsymbol{g}_3 & \boldsymbol{g}_4 & \boldsymbol{g}_5 & \boldsymbol{g}_6 \end{matrix} \\ \downarrow\quad\downarrow\quad\downarrow\quad\downarrow\quad\downarrow\quad\downarrow \\ \begin{pmatrix} -0.0050 & -0.0011 & -0.0542 & 0.6325 & 0.7662 & -0.0999 \\ 0.0108 & 0.0128 & 0.1004 & 0.5352 & -0.3343 & 0.7690 \\ 0.0141 & 0.0155 & 0.0629 & 0.5569 & -0.5373 & -0.6299 \\ 0.9920 & -0.1172 & -0.0453 & -0.0063 & 0.0085 & 0.0020 \\ 0.1134 & 0.9905 & -0.0762 & -0.0118 & 0.0068 & 0.0030 \\ -0.0520 & -0.0687 & -0.9875 & 0.0564 & -0.1112 & 0.0432 \end{pmatrix} \end{array}$$

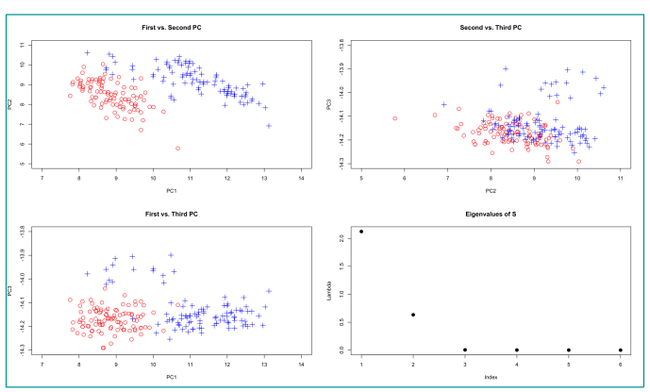
# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 为了解主成分对变量尺度变化的敏感程度，假设在银行数据集里，$X_1$，$X_2$，$X_3$ 和 $X_6$ 以厘米为单位进行测量，而 $X_4$ 和 $X_5$ 仍以毫米为单位.

counterfeit

```
Y_new <- X_new %*% eigen_vectors_new
par(mfrow=c(2, 2))
plot(Y_new[1:100, 1], Y_new[1:100, 2], xlim = c(7, 14), ylim = c(5, 11), xlab = 'PC1', ylab = 'PC2', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y_new[101:200, 1], Y_new[101:200, 2], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'First vs. Second PC')

plot(Y_new[1:100, 2], Y_new[1:100, 3], xlim = c(5, 11), ylim = c(-14.3, -13.8), xlab = 'PC2', ylab = 'PC3', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y_new[101:200, 2], Y_new[101:200, 3], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'Second vs. Third PC')

plot(Y_new[1:100, 1], Y_new[1:100, 3], xlim = c(7, 14), ylim = c(-14.3, -13.8), xlab = 'PC1', ylab = 'PC3', col = 'red', cex = 1.5)
points(Y_new[101:200, 1], Y_new[101:200, 3], col = 'blue', cex = 1.5, pch = 3)
title(main = 'First vs. Third PC')

plot(1:6, eigen_values_new, xlab = 'Index', ylab = 'Lambda', main = 'Eigenvalues of S', cex = 1.5, pch = 16)
```

genuine



# 主成分的应用 (Principal Components in Practice)

- 为了解主成分对变量尺度变化的敏感程度，假设在银行数据集里，$X_1$，$X_2$，$X_3$ 和 $X_6$ 以厘米为单位进行测量，而 $X_4$ 和 $X_5$ 仍以毫米为单位.
  - 将这些结果与两个 $\mathscr{G}$ 的前两列进行比较，会发现截然不同的情况.
  - 第一主成分主要由 $X_4$ (下边框) 主导.
  - 第二主成分由 $X_5$ (上边框) 主导.

$$\mathscr{G} = \begin{pmatrix} -0.0050 & -0.0011 & -0.0542 & 0.6325 & 0.7662 & -0.0999 \\ 0.0108 & 0.0128 & 0.1004 & 0.5352 & -0.3343 & 0.7690 \\ 0.0141 & 0.0155 & 0.0629 & 0.5569 & -0.5373 & -0.6299 \\ 0.9920 & -0.1172 & -0.0453 & -0.0063 & 0.0085 & 0.0020 \\ 0.1134 & 0.9905 & -0.0762 & -0.0118 & 0.0068 & 0.0030 \\ -0.0520 & -0.0687 & -0.9875 & 0.0564 & -0.1112 & 0.0432 \end{pmatrix}$$

  - 后面我们将讨论当变量尺度差异过大时，如何选择合理的变量标准化方法.

$$\mathscr{G} = \begin{pmatrix} -0.044 & 0.011 & -0.326 & 0.562 & 0.753 & 0.098 \\ 0.112 & 0.071 & -0.259 & 0.455 & -0.347 & -0.767 \\ 0.139 & 0.066 & -0.345 & 0.415 & -0.535 & 0.632 \\ 0.768 & -0.563 & -0.218 & -0.186 & 0.100 & -0.022 \\ 0.202 & 0.659 & -0.557 & -0.451 & 0.102 & -0.035 \\ -0.579 & -0.489 & -0.592 & -0.258 & -0.084 & -0.046 \end{pmatrix}$$

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
- 最具信息含量的标准线性组合 (SLC) 由第一个特征向量给出.
  - 对经过中心化处理的银行数据 $\boldsymbol{x}$，我们有

$$y_1 = -0.044x_1 + 0.112x_2 + 0.139x_3 + 0.768x_4 + 0.202x_5 - 0.579x_6$$

第一主成分主要反映底框 $(x_4)$ 与对角线 $(x_6)$ 之间的差异.

$$y_2 = 0.011x_1 + 0.071x_2 + 0.066x_3 - 0.563x_4 + 0.659x_5 - 0.489x_6$$

第二主成分主要可以通过顶框 $(x_5)$ 与底框 $(x_4)$ 和对角线 $(x_6)$ 之和的差值来描述.

$x_1$ = length
$x_2$ = left height
$x_3$ = right height
$x_4$ = bottom frame
$x_5$ = top frame
$x_6$ = diagonal

```
Centered_X <- scale(X, center = TRUE, scale = FALSE)
S_centered <- n * var(Centered_X) / (n-1)
eigen_S_centered <- eigen(S_centered)
lambda <- eigen_S_centered$values
round(lambda, digits = 3)
G_centered <- eigen_S_centered$vectors
round(G_centered, digits = 3)
```

```
> round(lambda, digits = 3)
[1] 3.015 0.940 0.245 0.196 0.086 0.036
```

```
> round(G_centered, digits = 3)
      [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.044  0.011 -0.326  0.562  0.753  0.098
[2,]  0.112  0.071 -0.259  0.455 -0.347 -0.767
[3,]  0.139  0.066 -0.345  0.415 -0.535  0.632
[4,]  0.768 -0.563 -0.218 -0.186  0.100 -0.022
[5,]  0.202  0.659 -0.557 -0.451  0.102 -0.035
[6,] -0.579 -0.489 -0.592 -0.258 -0.084 -0.046
```

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
- 最具信息含量的标准线性组合 (SLC) 由第一个特征向量给出.
  - 对经过中心化处理的银行数据 $\boldsymbol{x}$，我们有

$$y_1 = -0.044x_1 + 0.112x_2 + 0.139x_3 + 0.768x_4 + 0.202x_5 - 0.579x_6$$

主成分的权重告诉我们，在以原始坐标表示的哪些方向上，能够获得最佳的方差解释.

$$y_2 = 0.011x_1 + 0.071x_2 + 0.066x_3 - 0.563x_4 + 0.659x_5 - 0.489x_6$$

$x_1$ = length
$x_2$ = left height
$x_3$ = right height
$x_4$ = bottom frame
$x_5$ = top frame
$x_6$ = diagonal

```
Centered_X <- scale(X, center = TRUE, scale = FALSE)
S_centered <- n * var(Centered_X) / (n-1)
eigen_S_centered <- eigen(S_centered)
lambda <- eigen_S_centered$values
round(lambda, digits = 3)
G_centered <- eigen_S_centered$vectors
round(G_centered, digits = 3)
```

```
> round(lambda, digits = 3)
[1] 3.015 0.940 0.245 0.196 0.086 0.036
```

```
> round(G_centered, digits = 3)
      [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.044  0.011 -0.326  0.562  0.753  0.098
[2,]  0.112  0.071 -0.259  0.455 -0.347 -0.767
[3,]  0.139  0.066 -0.345  0.415 -0.535  0.632
[4,]  0.768 -0.563 -0.218 -0.186  0.100 -0.022
[5,]  0.202  0.659 -0.557 -0.451  0.102 -0.035
[6,] -0.579 -0.489 -0.592 -0.258 -0.084 -0.046
```

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
- 最具信息含量的标准线性组合 (SLC) 由第一个特征向量给出.
  - 对经过中心化处理的银行数据 $\boldsymbol{x}$，我们有

$$y_1 = -0.044x_1 + 0.112x_2 + 0.139x_3 + 0.768x_4 + 0.202x_5 - 0.579x_6$$

前 $q$ 个主成分对变异的解释程度可以用相对比例来衡量：

$$\psi_q = \frac{\sum_{j=1}^{q} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j} = \frac{\sum_{j=1}^{q} \mathrm{Var}\left(Y_j\right)}{\sum_{j=1}^{p} \mathrm{Var}\left(Y_j\right)}$$

$x_1$ = length
$x_2$ = left height
$x_3$ = right height
$x_4$ = bottom frame
$x_5$ = top frame
$x_6$ = diagonal

```
Centered_X <- scale(X, center = TRUE, scale = FALSE)
S_centered <- n * var(Centered_X) / (n-1)
eigen_S_centered <- eigen(S_centered)
lambda <- eigen_S_centered$values
round(lambda, digits = 3)
G_centered <- eigen_S_centered$vectors
round(G_centered, digits = 3)
```

```
> round(lambda, digits = 3)
[1] 3.015 0.940 0.245 0.196 0.086 0.036
```

```
> round(G_centered, digits = 3)
      [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.044  0.011 -0.326  0.562  0.753  0.098
[2,]  0.112  0.071 -0.259  0.455 -0.347 -0.767
[3,]  0.139  0.066 -0.345  0.415 -0.535  0.632
[4,]  0.768 -0.563 -0.218 -0.186  0.100 -0.022
[5,]  0.202  0.659 -0.557 -0.451  0.102 -0.035
[6,] -0.579 -0.489 -0.592 -0.258 -0.084 -0.046
```

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
  - 已解释方差的 (累积) 比例为

```
round(lambda, digits = 3)
round(cumsum(lambda) / sum(lambda), digits = 3) # cumulative propo
```

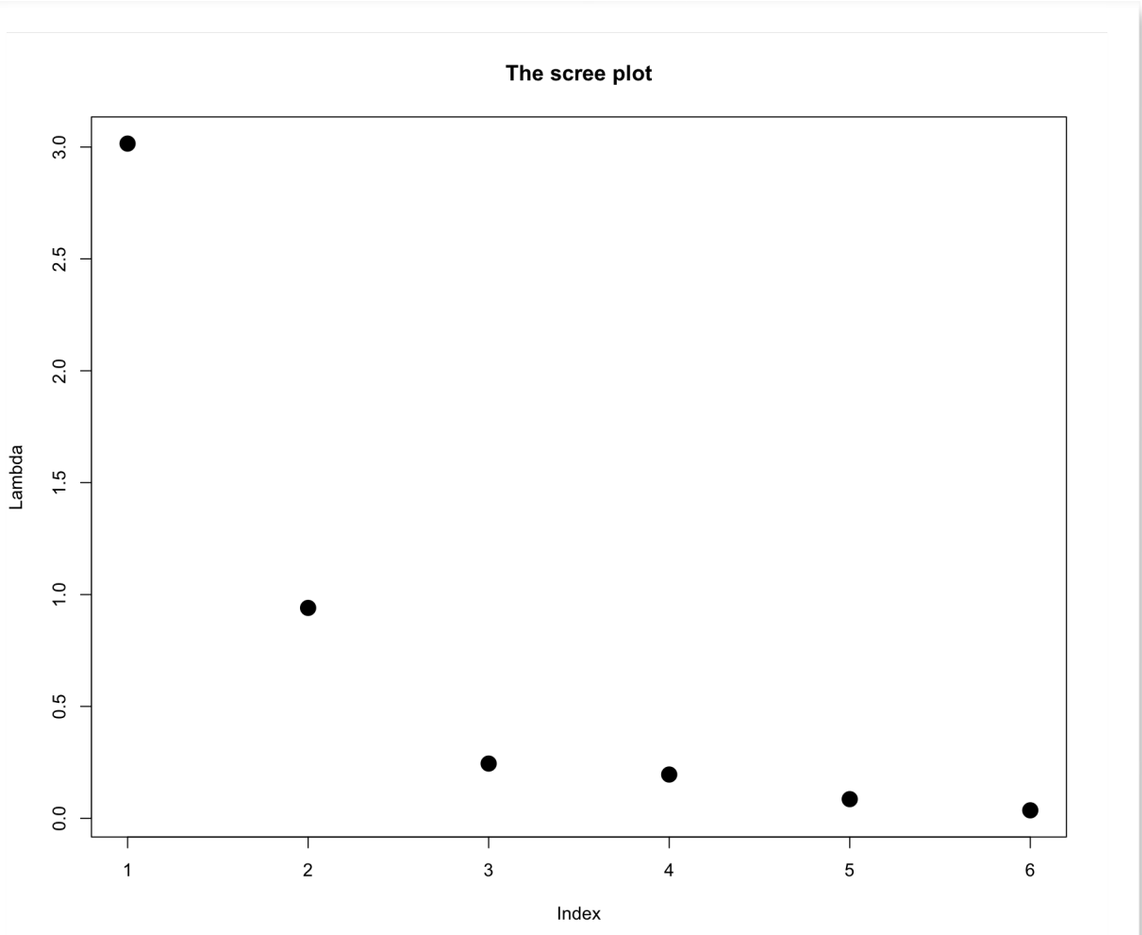
```
> round(lambda, digits = 3)
[1] 3.015 0.940 0.245 0.196 0.086 0.036
> round(cumsum(lambda) / sum(lambda), digits = 3)
[1] 0.668 0.876 0.930 0.973 0.992 1.000
```

  - 第一主成分 $(q = 1)$ 解释了 66.8% 的变异.
  - 前两个主成分 $(q = 2)$ 解释了 87.6% 的变异.
  - 前三个主成分 $(q = 3)$ 解释了 93.0% 的变异.
  - 注意: 主成分不具有尺度不变性，例如，从相关矩阵导出的主成分与从协方差矩阵导出的主成分会给出不同的结果.

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
  - 通过碎石图可以很好地以图形方式展示主成分解释数据变异的能力.

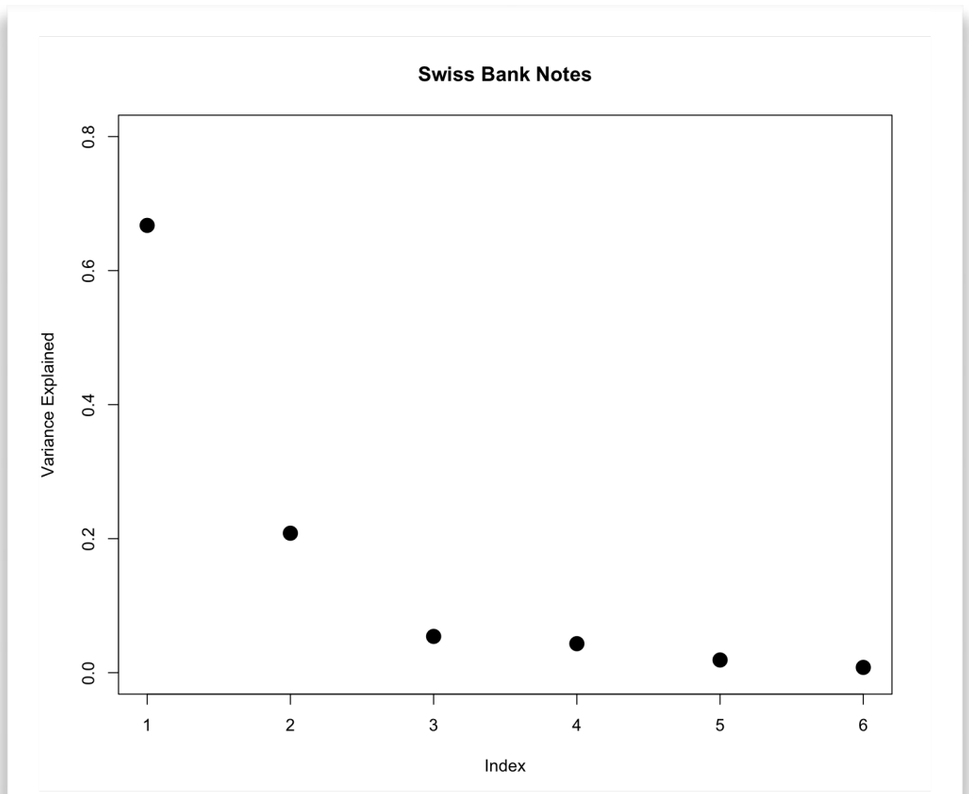
```
m <- dim(X)[2]
plot(1:m, lambda, xlab = 'Index', ylab = 'Lambda', main = 'The scree plot', cex = 2, pch = 16)
```



# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分变换的核心思想是找到能够使方差最大化的、最具信息含量的投影.
  - 通过碎石图可以很好地以图形方式展示主成分解释数据变异的能力.
  - 碎石图也可以通过使用相对比例来进行调整.

```
mp <- lambda / sum(lambda)
plot(1:m, mp, xlab = 'Index', ylab = 'Variance Explained', main = 'Swiss Bank Notes', cex = 2, pch = 16, ylim = c(0, 0.8))
```



# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分向量 $\boldsymbol{Y}$ 与初始向量 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵可计算如下：

$$
\begin{aligned}
\operatorname{Cov}(\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{Y}) &= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\right) - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \cdot \mathrm{E}\left(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\right) \\
&= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\right) \\
&= \mathrm{E}\left\{\boldsymbol{X}\left[\Gamma^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}\right)\right]^{\mathrm{T}}\right\} \\
&= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\Gamma - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\Gamma\right) \\
&= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\right)\Gamma - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\Gamma \\
&= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\right)\Gamma \\
&= \Sigma\Gamma \\
&= \left(\Gamma\Lambda\Gamma^{\mathrm{T}}\right)\Gamma \\
&= \Gamma\Lambda
\end{aligned}
$$

定理 11.1 对给定的 $\boldsymbol{X} \sim (\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$，设 $\boldsymbol{Y} = \Gamma^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu})$ 为主成分变换. 则

$$\mathrm{E}\left(Y_j\right) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

$$\operatorname{Var}\left(Y_j\right) = \lambda_j, \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

$$\operatorname{Cov}\left(Y_i, Y_j\right) = 0, \quad i \neq j$$

$$\operatorname{Var}(Y_1) \geq \operatorname{Var}(Y_2) \geq \cdots \geq \operatorname{Var}\left(Y_p\right) \geq 0$$

$$\sum_{j=1}^{p} \operatorname{Var}\left(Y_j\right) = \operatorname{tr}(\Sigma)$$

$$\prod_{j=1}^{p} \operatorname{Var}\left(Y_j\right) = |\Sigma|$$

- 定理 2.1 (Jordan 分解)

任一对称矩阵 $\mathscr{A}_{p\times p}$ 均可表示为

$$\mathscr{A} = \Gamma\,\Lambda\,\Gamma^{\mathrm{T}} = \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \gamma_j \gamma_j^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\Lambda = \operatorname{diag}\left(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p\right)$$

且

$$\Gamma = \left(\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_p\right)$$

是由 $\mathscr{A}$ 的特征向量构成的一个正交矩阵.

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分向量 $\boldsymbol{Y}$ 与初始向量 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵可计算如下： $\operatorname{Cov}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) = \Gamma \Lambda$
  - 因此，变量 $X_i$ 与 主成分 $Y_j$ 的相关系数 $\rho_{X_i Y_j}$ 为

$$\rho_{X_i Y_j} = \frac{\operatorname{Cov}\left(X_i, Y_j\right)}{\sqrt{\operatorname{Var}\left(X_i\right) \cdot \operatorname{Var}\left(Y_j\right)}} = \frac{\gamma_{ij}\,\lambda_j}{\sqrt{\sigma_{X_i X_i} \cdot \sigma_{Y_j Y_j}}} = \gamma_{ij}\,\frac{\lambda_j}{\sqrt{\sigma_{X_i X_i} \cdot \lambda_j}} = \gamma_{ij}\sqrt{\frac{\lambda_j}{\sigma_{X_i X_i}}}$$

  - 使用实际数据，这当然意味着

$$r_{X_i Y_j} = g_{ij}\sqrt{\frac{\ell_j}{s_{X_i X_i}}}$$

**定理 2.1** (Jordan 分解)

任一对称矩阵 $\mathcal{A}_{p\times p}$ 均可表示为

$$\mathcal{A} = \Gamma\,\Lambda\,\Gamma^{\mathrm{T}} = \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \gamma_j \gamma_j^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\Lambda = \operatorname{diag}\left(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p\right)$$

且

$$\Gamma = \left(\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_p\right)$$

是由 $\mathcal{A}$ 的特征向量构成的一个正交矩阵.

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分向量 $\boldsymbol{Y}$ 与初始向量 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵可计算如下： $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) = \Gamma\Lambda$
  - 相关性可用于评估主成分 $Y_j \ (j = 1, 2, \ldots, p)$ 与原始变量 $X_i \ (i = 1, 2, \ldots, p)$ 之间的关系.

spectral decomposition

$$\mathcal{S} = \mathcal{G}\mathcal{L}\mathcal{G}^{\mathrm{T}} \Longrightarrow \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{pmatrix} = \left(\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \ldots, \boldsymbol{g}_p\right) \begin{pmatrix} \ell_1 & & & \\ & \ell_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ell_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{g}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{g}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

$$= \left(\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \ldots, \boldsymbol{g}_p\right) \begin{pmatrix} \ell_1\boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}} \\ \ell_2\boldsymbol{g}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \ell_p\boldsymbol{g}_p^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & \cdots & g_{p1} \\ g_{12} & g_{22} & \cdots & g_{p2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_{1p} & g_{2p} & \cdots & g_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 g_{11} & \ell_1 g_{12} & \cdots & \ell_1 g_{1p} \\ \ell_2 g_{21} & \ell_2 g_{22} & \cdots & \ell_2 g_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \ell_p g_{p1} & \ell_p g_{p2} & \cdots & \ell_p g_{pp} \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad s_{11} = \sum_{j=1}^{p} \ell_j g_{1j}^2 , \ s_{22} = \sum_{j=1}^{p} \ell_j \ g_{2j}^2 , \ \cdots , s_{pp} = \sum_{j=1}^{p} \ell_j \ g_{pj}^2 \quad \Longrightarrow \quad s_{ii} = s_{X_i X_i} = \sum_{j=1}^{p} \ell_j g_{ij}^2$$

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 主成分向量 $\boldsymbol{Y}$ 与初始向量 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵可计算如下： $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) = \Gamma\Lambda$
  - 相关性可用于评估主成分 $Y_j \ (j = 1, 2, \ldots, p)$ 与原始变量 $X_i \ (i = 1, 2, \ldots, p)$ 之间的关系.

$$r_{X_iY_j} = g_{ij}\sqrt{\frac{\ell_j}{s_{X_iX_i}}} \Longrightarrow \sum_{j=1}^{p} r_{X_iY_j}^2 = \frac{\sum_{j=1}^{p}\left(\ell_j\, g_{ij}^2\right)}{s_{X_iX_i}} = \frac{s_{X_iX_i}}{s_{X_iX_i}} = 1$$

  - 所以，$r_{X_iY_j}^2$ 可以看作是 $X_i$ 的方差可以由 $Y_j$ 解释的比例.

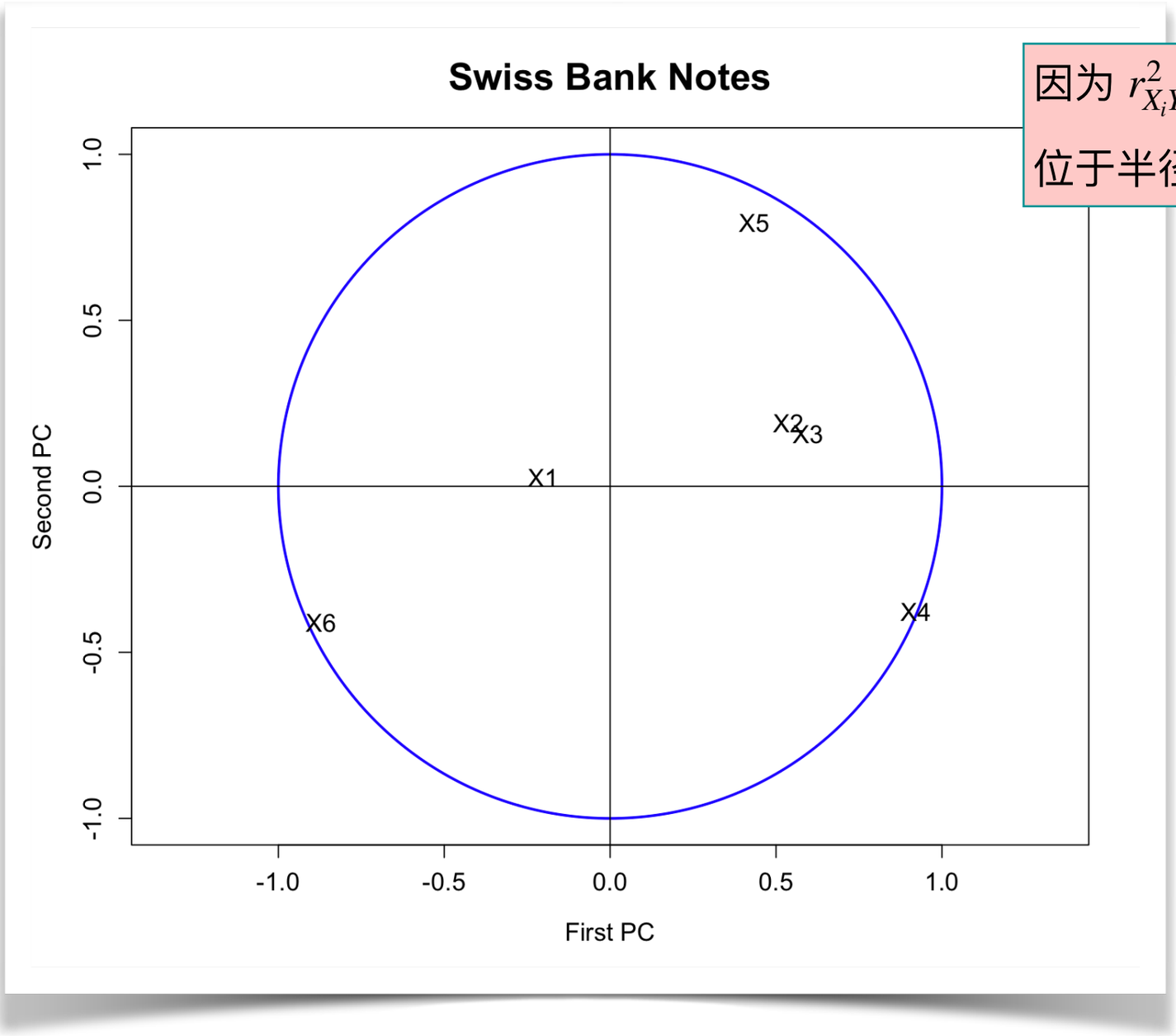
# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 在前两个主成分构成的空间，我们作解释比例，即 $r_{X_iY_1}$ 关于 $r_{X_iY_2}$ 的散点图.

```
library(mclust)
data(banknote)
x  = banknote[, 2:7]
n  = nrow(x)
e  = eigen((n - 1) * cov(x)/n)  # calculates eigenvalues and eigenvectors and sorts them by size
e1 = e$values/sum(e$values)

m    = apply(as.matrix(x), 2, mean)
temp = as.matrix(x - matrix(m, n, ncol(x), byrow = T))
r    = temp %*% e$vectors
r    = cor(cbind(r, x))  # correlation between PCs and variables
r1   = r[7:12, 1:2]      # correlation of the two most important PCs and variables

# plot for the correlation of the original variables with the PCs
ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlab = "First PC", ylab = "Second PC",
    main = "Swiss Bank Notes", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.8, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("X1", "X2", "X3", "X4", "X5", "X6")
text(r1, label, cex = 1.2)
```

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 在前两个主成分构成的空间，我们作解释比例，即 $r_{X_iY_1}$ 关于 $r_{X_iY_2}$ 的散点图.



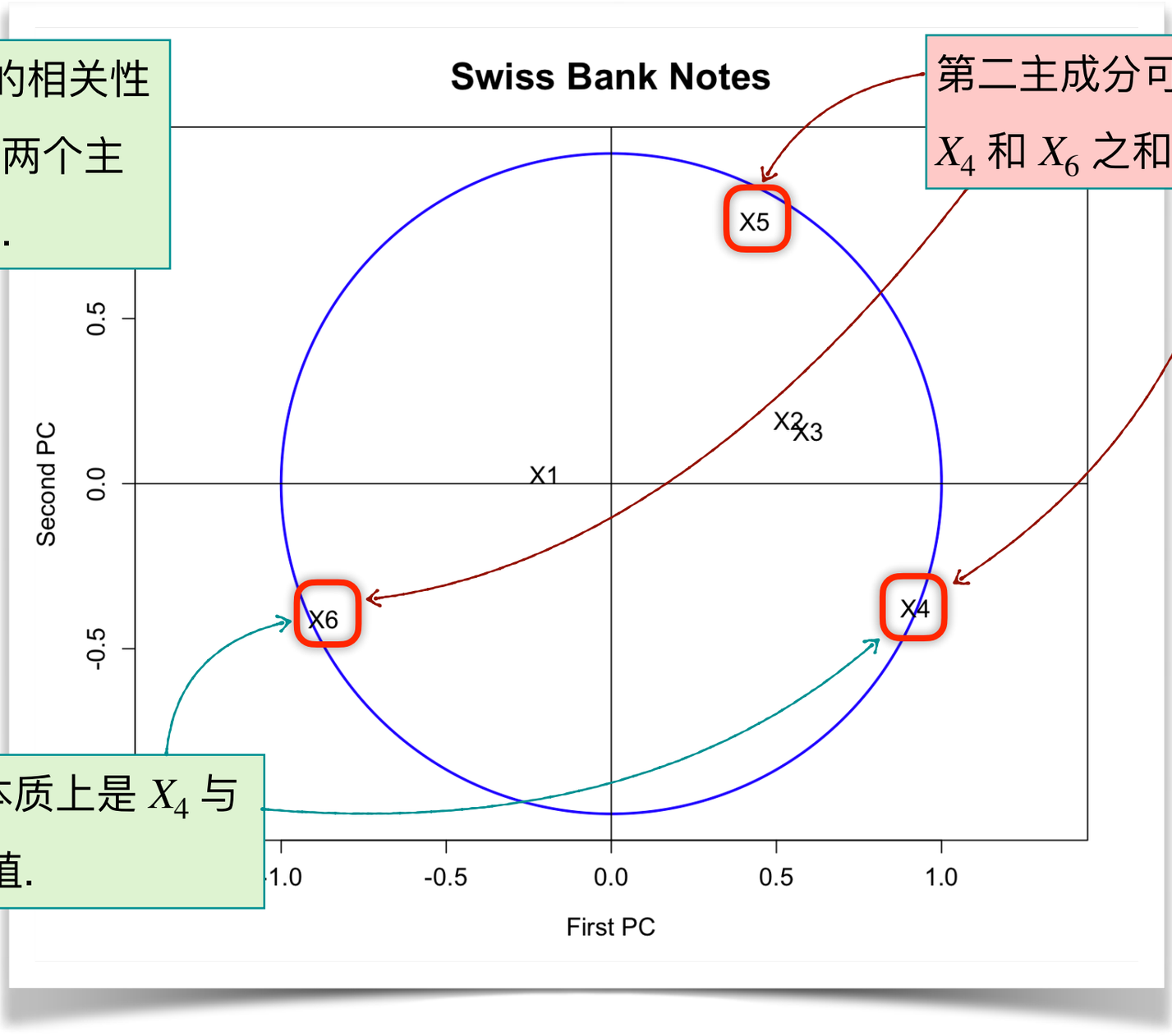

因为 $r^2_{X_iY_1} + r^2_{X_iY_2} \le 1$，散点总位于半径为 1 的单位圆内.

- 图形展示了哪些原始变量与主成分 $Y_1$ 和 $Y_2$ 的相关性最强.

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 在前两个主成分构成的空间，我们作解释比例，即 $r_{X_iY_1}$ 关于 $r_{X_iY_2}$ 的散点图.

变量 $X_4$, $X_5$ 和 $X_6$ 对应的相关性接近圆的边缘，说明前两个主成分能很好地解释它们.




第二主成分可以很好地用 $X_5$ 与 $X_4$ 和 $X_6$ 之和的差值来描述.

第一主成分本质上是 $X_4$ 与 $X_6$ 之间的差值.

- 图形展示了哪些原始变量与主成分 $Y_1$ 和 $Y_2$ 的相关性最强.

# 主成分的解释 (Interpretation of the PCs)

- 在前两个主成分构成的空间，我们作解释比例，即 $r_{X_iY_1}$ 关于 $r_{X_iY_2}$ 的散点图.
  - 初始变量 $X_i$ 与前两个主成分的相关系数是

```
srs <- array(0, dim = 6)
for (i in 1:6) srs[i] = r1[i, 1]^2 + r1[i, 2]^2
round(cbind(r1, ss = srs), digits = 3)
```

| | $r_{X_iY_1}$ | $r_{X_iY_2}$ | $r_{X_iY_1}^2 + r_{X_iY_2}^2$ |
|---|---|---|---|
| Length | -0.201 | 0.028 | 0.041 |
| Left | 0.538 | 0.191 | 0.326 |
| Right | 0.597 | 0.159 | 0.381 |
| Bottom | 0.921 | -0.377 | 0.991 |
| Top | 0.435 | 0.794 | 0.820 |
| Diagonal | -0.870 | -0.410 | 0.925 |

前两个主成分解释 $X_1$ (以及 $X_2$, $X_3$) 的方差的比例相对较小.

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 在实际应用中，主成分由样本数据求得. 下述定理给出了样本主成分的渐进分布.

**定理 11.4** 设 $\Sigma > 0$ 且有不同的特征值，再设 $\mathcal{S} \sim n^{-1} W_p(\Sigma, n-1)$，且有谱分解

$\Sigma = \Gamma \Lambda \Gamma^{\mathrm{T}}$ 与 $\mathcal{S} = \mathcal{G} \mathcal{L} \mathcal{G}^{\mathrm{T}}$. 则

(a) $\sqrt{n-1}\left(\boldsymbol{\ell} - \boldsymbol{\lambda}\right) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p\left(\mathbf{0}, 2\Lambda^2\right)$，其中 $\boldsymbol{\ell} = \left(\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_p\right)^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{\lambda} = \left(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p\right)^{\mathrm{T}}$ 是 $\mathcal{L}$ 与 $\Lambda$ 的对角元素.

(b) $\sqrt{n-1}\left(\boldsymbol{g}_j - \boldsymbol{\gamma}_j\right) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p\left(\mathbf{0}, \mathcal{V}_j\right)$，其中 $\mathcal{V}_j = \lambda_j \sum_{k \neq j} \frac{\lambda_k}{\left(\lambda_k - \lambda_j\right)^2} \boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\gamma}_k^{\mathrm{T}}$.

(c) $\boldsymbol{\ell}$ 中的元素与矩阵 $\mathcal{G}$ 中的元素渐近独立.

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 例: 如果 $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n$ 是来自 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 的样本，由于 $n\mathcal{S} \sim W_p(\Sigma, n-1)$，根据定理 4.11 知

$$\sqrt{n-1}\left(\ell_j - \lambda_j\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1\left(0, 2\lambda_j^2\right), \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

  - 设 $f(\ell_j) = \log(\ell_j)$, 则 $\left.\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell_j} f\right|_{\ell_j=\lambda_j} = \dfrac{1}{\lambda_j}$.

$\boldsymbol{t} = \ell_j$, $\boldsymbol{\mu} = \lambda_j$, $f = \log \boldsymbol{t}$, $\mathscr{D} = \dfrac{1}{\lambda_j}$

**定理 4.11** 设 $\sqrt{n}(\boldsymbol{t} - \boldsymbol{\mu}) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_p(\boldsymbol{0}, \Sigma)$, $f = \left(f_1, f_2, \ldots f_q\right)^{\mathrm{T}} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^q$ 为实值函数，且在 $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ 可微，则 $f(\boldsymbol{t})$ 渐近服从均值向量为 $f(\boldsymbol{\mu})$、协方差矩阵为 $\mathscr{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathscr{D}$ 的正态分布，即

$$\sqrt{n}\left[f(\boldsymbol{t}) - f(\boldsymbol{\mu})\right] \xrightarrow{\mathscr{L}} N_q\left(\boldsymbol{0}, \mathscr{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathscr{D}\right), \qquad n \longrightarrow \infty$$

其中

$$\mathscr{D} = \left.\left(\frac{\partial f_j}{\partial t_i}\right)(\boldsymbol{t})\right|_{\boldsymbol{t}=\boldsymbol{\mu}}$$

是所有偏导数的 $(p \times q)$ 矩阵.

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 例: 如果 $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n$ 是来自 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 的样本，由于 $n\mathcal{S} \sim W_p(\Sigma, n-1)$，根据定理 4.11 知

$$\sqrt{n-1}\left(\ell_j - \lambda_j\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1\left(0, 2\lambda_j^2\right), \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

  - 设 $f(\ell_j) = \log(\ell_j)$, 则 $\left.\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell_j} f\right|_{\ell_j=\lambda_j} = \dfrac{1}{\lambda_j}$.

$$\sqrt{n-1}\left(\log \ell_j - \log \lambda_j\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1(0, 2)$$

$$\Longrightarrow \quad \sqrt{\frac{n-1}{2}}\left(\log \ell_j - \log \lambda_j\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1(0, 1)$$

$$\Longrightarrow \quad \mathrm{P}\left(-z_{\alpha/2} \le \sqrt{\frac{n-1}{2}}\left(\log \ell_j - \log \lambda_j\right) \le z_{\alpha/2}\right) \approx 1 - \alpha$$

$z_{0.025} = 1.96$

$$\Longrightarrow \quad \mathrm{P}\left(\log \ell_j - 1.96\sqrt{\frac{2}{n-1}} \le \log \lambda_j \le \log \ell_j + 1.96\sqrt{\frac{2}{n-1}}\right) \approx 0.95$$

**定理 4.11** 设 $\sqrt{n}(\boldsymbol{t} - \boldsymbol{\mu}) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_p(\boldsymbol{0}, \Sigma)$, $f = \left(f_1, f_2, \ldots f_q\right)^{\mathrm{T}} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^q$ 为实值函数，且在 $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ 可微，则 $f(\boldsymbol{t})$ 渐近服从均值向量为 $f(\boldsymbol{\mu})$、协方差矩阵为 $\mathscr{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathscr{D}$ 的正态分布，即

$$\sqrt{n}\left[f(\boldsymbol{t}) - f(\boldsymbol{\mu})\right] \xrightarrow{\mathscr{L}} N_q\left(\boldsymbol{0}, \mathscr{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathscr{D}\right), \quad n \longrightarrow \infty$$

其中

$$\mathscr{D} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial t_i}\right)(\boldsymbol{t})\Big|_{t=\mu}$$

是所有偏导数的 $(p \times q)$ 矩阵.

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 例: 如果 $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n$ 是来自 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 的样本，由于 $n\mathcal{S} \sim W_p(\Sigma, n-1)$，根据定理 4.11 知

$$\sqrt{n-1}\left(\ell_j - \lambda_j\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1\left(0, 2\lambda_j^2\right), \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

  - 在银行钞票数据的例子中，我们有 $\ell_1 = 2.98$, 所以

$$\mathrm{P}\left(\log(2.98) - 1.96\sqrt{\frac{2}{200-1}} \le \log\lambda_1 \le \log(2.98) + 1.96\sqrt{\frac{2}{200-1}}\right) \approx 0.95$$

$$\Longrightarrow \quad \mathrm{P}\left[\lambda_1 \in (2.448\ ,\ 3.62)\right] \approx 0.95$$

$$\Longrightarrow \quad \mathrm{P}\left(\log\ell_j - 1.96\sqrt{\frac{2}{n-1}} \le \log\lambda_j \le \log\ell_j + 1.96\sqrt{\frac{2}{n-1}}\right) \approx 0.95$$

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 前 $q$ 个主成分解释的方差
  - 前 $q$ 个主成分所解释方差的比例由下式给出

$$\psi = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_q}{\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_p}$$

  - 在实际应用中，可由下式估计

$$\widehat{\psi} = \frac{\ell_1 + \ell_2 + \cdots + \ell_q}{\ell_1 + \ell_2 + \cdots + \ell_p}$$

**定理 11.4** 设 $\Sigma > 0$ 且有不同的特征值，再设 $\mathcal{S} \sim n^{-1}W_p(\Sigma, n-1)$，且有谱分解 $\Sigma = \Gamma\Lambda\Gamma^{\mathrm{T}}$ 与 $\mathcal{S} = \mathcal{G}\mathcal{L}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}$. 则

(a) $\sqrt{n-1}\,(\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\lambda}) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p(\mathbf{0}, 2\Lambda^2)$，其中 $\boldsymbol{\ell} = (\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_p)^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p)^{\mathrm{T}}$ 是 $\mathcal{L}$ 与 $\Lambda$ 的对角元素.

(b) $\sqrt{n-1}\,(\boldsymbol{g}_j - \boldsymbol{\gamma}_j) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p(\mathbf{0}, \mathcal{V}_j)$，其中 $\mathcal{V}_j = \lambda_j \sum_{k \neq j} \frac{\lambda_k}{(\lambda_k - \lambda_j)^2} \boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\gamma}_k^{\mathrm{T}}$.

(c) $\boldsymbol{\ell}$ 中的元素与矩阵 $\mathcal{G}$ 中的元素渐近独立.

**定理 4.11** 设 $\sqrt{n}(\boldsymbol{t}-\boldsymbol{\mu}) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$，$f = (f_1, f_2, \ldots f_q)^{\mathrm{T}} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^q$ 为实值函数，且在 $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ 可微，则 $f(\boldsymbol{t})$ 渐近服从均值向量为 $f(\boldsymbol{\mu})$、协方差矩阵为 $\mathcal{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathcal{D}$ 的正态分布，即

$$\sqrt{n}\,[f(\boldsymbol{t}) - f(\boldsymbol{\mu})] \xrightarrow{\mathcal{L}} N_q(\mathbf{0}, \mathcal{D}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathcal{D}), \qquad n \longrightarrow \infty$$

其中

$$\mathcal{D} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial t_i}\right)(\boldsymbol{t})\Big|_{\boldsymbol{t}=\boldsymbol{\mu}}$$

是所有偏导数的 $(p \times q)$ 矩阵.

$$\Longrightarrow \quad \sqrt{n-1}\,(\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\lambda}) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p(\mathbf{0}, 2\Lambda^2)$$

$$\boldsymbol{t} = \boldsymbol{\ell}, \ \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\lambda}, \ f = \widehat{\psi}$$

$$\sqrt{n-1}\,(\widehat{\psi} - \psi) \xrightarrow{\mathcal{L}} N_p(\mathbf{0}, 2\mathcal{D}^{\mathrm{T}}\mathcal{V}\mathcal{D})$$

$$\mathcal{V} = 2\Lambda^2$$

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_p \end{pmatrix}$$

$$d_j = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda_j} = \begin{cases} \dfrac{1-\psi}{\mathrm{tr}(\Sigma)}, & 1 \le j \le q \\ \dfrac{-\psi}{\mathrm{tr}(\Sigma)}, & q+1 \le j \le p \end{cases}$$

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 前 $q$ 个主成分解释的方差

定理 11.5

$$\sqrt{n-1}\left(\widehat{\psi}-\psi\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1\left(0,\, \omega^2\right)$$

其中

$$\omega^2 = \mathscr{D}^{\mathrm{T}}\mathscr{V}\mathscr{D} = \frac{2}{\left[\mathrm{tr}(\Sigma)\right]^2}\left[\left(1-\psi^2\right)\left(\lambda_1^2+\cdots+\lambda_q^2\right)+\psi^2\left(\lambda_{q+1}^2+\cdots+\lambda_p^2\right)\right]$$

$$= \frac{2\mathrm{tr}(\Sigma^2)}{\left[\mathrm{tr}(\Sigma)\right]^2}\left(\psi^2-2\beta\psi+\beta\right)$$

以及

$$\beta = \frac{\lambda_1^2+\lambda_2^2+\cdots+\lambda_q^2}{\lambda_1^2+\lambda_2^2+\cdots+\lambda_p^2}$$

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 例: 对于瑞士银行纸币数据集，已知第一主成分能解释 67% 的变异.
  - 检验 $H_0: \psi = 0.75 \leftrightarrow H_1: \psi \neq 0.75.$

$$\hat{\beta} = \frac{\ell_1^2}{\ell_1^2 + \ell_2^2 + \cdots + \ell_p^2} = \frac{2.985^2}{2.985^2 + 0.931^2 + 0.242^2 + 0.194^2 + 0.085^2 + 0.035^2} = 0.902$$

$$\operatorname{tr}(\mathcal{S}) = \sum_{j=1}^{p} \ell_j = 4.472$$

$$\operatorname{tr}(\mathcal{S}^2) = \sum_{j=1} \ell_j^2 = 9.883$$

$$\widehat{\omega}^2 = \frac{2\operatorname{tr}\left(\mathcal{S}^2\right)}{\left[\operatorname{tr}(\mathcal{S})\right]^2}\left(\widehat{\psi}^2 - 2\hat{\beta}\,\widehat{\psi} + \hat{\beta}\right)$$

$$= \frac{2 \times 9.883}{4.472^2}\left(0.668^2 - 2 \times 0.902 \times 0.668 + 0.902\right)$$

$$= 0.142$$

# 主成分的渐进性质 (Asymptotic Properties of the PCs)

- 例: 对于瑞士银行纸币数据集，已知第一主成分能解释 67% 的变异.
  - 检验 $H_0: \psi = 0.75 \leftrightarrow H_1: \psi \neq 0.75.$
  - $\psi$ 的 $1-\alpha = 0.95$ 置信区间为

定理 11.5

$$\sqrt{n-1}\left(\widehat{\psi}-\psi\right) \xrightarrow{\mathscr{L}} N_1\left(0, \omega^2\right)$$

其中

$$\omega^2 = \mathscr{D}^{\mathrm{T}}\mathscr{V}\mathscr{D} = \frac{2}{\left[\mathrm{tr}(\Sigma)\right]^2}\left[\left(1-\psi^2\right)\left(\lambda_1^2+\cdots+\lambda_q^2\right)+\psi^2\left(\lambda_{q+1}^2+\cdots+\lambda_p^2\right)\right]$$
$$= \frac{2\mathrm{tr}(\Sigma^2)}{\left[\mathrm{tr}(\Sigma)\right]^2}\left(\psi^2-2\beta\psi+\beta\right)$$

以及

$$\beta = \frac{\lambda_1^2+\lambda_2^2+\cdots+\lambda_q^2}{\lambda_1^2+\lambda_2^2+\cdots+\lambda_p^2}$$

$$\left(0.668-1.96\sqrt{\frac{0.142}{200-1}}\ ,\ 0.668+1.96\sqrt{\frac{0.142}{200-1}}\right) = (0.615\ ,\ 0.720)$$

  - 结论: 拒绝假设 $H_0: \psi = 0.75.$

# 归一化主成分分析 (Normalized Principal Components Analysis)

- 在某些情况下，原始变量在方差方面可能存在差异.
  - 当变量是在不同尺度 (如年、千克、美元等) 上进行测量时，这种情况尤为明显.
  - 在这种情况下，需要提供一种对数据所含信息的描述，该描述对于尺度的选择应具有稳健性.
  - 这可以通过对变量进行标准化来实现

$$\mathcal{X}_{\mathcal{S}} = \mathcal{H}\mathcal{X}\mathcal{D}^{-1/2}$$

$$\mathcal{D} = \operatorname{diag}\left(s_{X_1X_1},\ s_{X_2X_2},\ \ldots,\ s_{X_pX_p}\right)$$

$$\Longrightarrow \quad \bar{\boldsymbol{x}}_{\mathcal{S}} = \mathbf{0}\ , \quad S_{\mathcal{X}_{\mathcal{S}}} = \mathcal{R}$$

$\mathcal{X}$ 的相关矩阵

  - 矩阵 $\mathcal{X}_{\mathcal{S}}$ 的主成分变换被称为归一化主成分 (NPCs).

# 归一化主成分分析 (Normalized Principal Components Analysis)

- 设 $\mathscr{R}$ 的谱分解为

$$\mathscr{R} = \mathscr{G}_{\mathscr{R}}\, \mathscr{L}_{\mathscr{R}}\, \mathscr{G}_{\mathscr{R}}^{\mathrm{T}}$$

$$\mathscr{L}_{\mathscr{R}} = \mathrm{diag}\left(\ell_1^{\mathscr{R}}, \ell_2^{\mathscr{R}}, \ldots, \ell_p^{\mathscr{R}}\right)$$

$\mathscr{R}$ 的特征值: $\ell_1^{\mathscr{R}} \geq \ell_2^{\mathscr{R}} \geq \cdots \geq \ell_p^{\mathscr{R}}$

对应的特征向量: $\left(\boldsymbol{g}_1^{\mathscr{R}}, \boldsymbol{g}_2^{\mathscr{R}}, \ldots, \boldsymbol{g}_p^{\mathscr{R}}\right) = \mathscr{G}_{\mathscr{R}}$

$$\Longrightarrow \quad \sum_{j=1}^{p} \ell_j^{\mathscr{R}} = \mathrm{tr}\left(\mathscr{R}\right) = p$$

- 归一化主成分，即 $Z_j$，为每个个体提供一种表征，由以下方式得出

$$\mathscr{Z} = \mathscr{X}_{\mathcal{S}}\, \mathscr{G}_{\mathscr{R}} = \left(\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \ldots, \boldsymbol{z}_p\right)$$

$$\Longrightarrow \quad \bar{\boldsymbol{z}} = \mathbf{0}$$

$$\mathcal{S}_{\mathscr{Z}} = \mathscr{G}_{\mathscr{R}}^{\mathrm{T}}\, \mathcal{S}_{\mathscr{X}_{\mathcal{S}}}\, \mathscr{G}_{\mathscr{R}} = \mathscr{G}_{\mathscr{R}}^{\mathrm{T}}\, \mathscr{R}\, \mathscr{G}_{\mathscr{R}} = \mathscr{L}_{\mathscr{R}}$$

# 归一化主成分分析 (Normalized Principal Components Analysis)

归一化主成分 (NPCs) 提供了与主成分 (PCs) 类似的视角，但就个体的相对位置而言，NPC 给每个变量赋予相同的权重 (而在主成分分析中，方差最大的变量获得最大权重).

- 计算 $X_i$ 和 $Z_j$ 之间的协方差与相关性很简单：

$$\mathcal{S}_{X_S,\,Z} = \frac{1}{n}\mathcal{X}_{\mathcal{S}}^{\mathrm{T}}\,\mathcal{Z} = \mathcal{G}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}$$

$$\mathcal{R}_{X_S,\,Z} = \mathcal{G}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}^{-1/2} = \mathcal{G}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}^{1/2}$$

  - 原始变量 $X_i$ 与归一化主成分 $Z_j$ 之间的相关系数为

$$r_{X_i Z_j} = \sqrt{\ell_j}\, g_{R,\,ij}$$

$$\sum_{j=1}^{p} r_{X_i Z_j}^2 = 1$$

  - 由此得到的归一化主成分，即 $Z_j$，可以从原始变量的角度进行解释，并且可以评估每个主成分在解释变量 $X_i$ 的变异方面所起的作用.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 事实证明，经验主成分 (无论是否归一化) 等同于通过将适当的数据矩阵分解为因子而得到的因子 (第10章).
  - 我们将证明，主成分就是代表经过中心化处理的数据矩阵行向量的因子.
  - 我们将证明，归一化主成分是代表标准化数据矩阵行的因子.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 假设我们想在更低维度的空间中得到观测值 (即 $\mathscr{X}$ 的行) 和变量 (即 $\mathscr{X}$ 的列) 的表示.
  - 由于原点在观测值空间中没有特殊的统计意义，我们首先将原点平移到数据点的重心 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处.
  - 这与分析经过中心化的数据矩阵 $\mathscr{X}_C = \mathscr{H}\mathscr{X}$ 是一样的.
  - 现在所有变量的均值都为零；因此，第 10 章中使用的方法可应用于矩阵 $\mathscr{X}_C$.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 假设我们想在更低维度的空间中得到观测值 (即 $\mathcal{X}$ 的行) 和变量 (即 $\mathcal{X}$ 的列) 的表示.
  - 注意到矩阵 $\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{X}_C$ 的谱分解与矩阵 $\mathcal{S}_X$ 的谱分解相关,

$$\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{X}_C = (\mathcal{H}\mathcal{X})^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X} = \mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X} = n\mathcal{S}_X = n\mathcal{G}\mathcal{L}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}$$

$\mathcal{S}_X$ 的谱分解

  - 因子变量是通过将 $\mathcal{X}_C$ 投影到 $\mathcal{G}$ 上得到的

$$\mathcal{Y} = \mathcal{X}_C\mathcal{G} = \left(y_1, y_2, \ldots, y_p\right)$$

$$\mathcal{Y} = \left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n\bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right)\mathcal{G}$$

与上述得到的主成分相同

$$\Longrightarrow \quad \bar{\boldsymbol{y}} = \frac{1}{n}\mathcal{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_n = \frac{1}{n}\left[\left(\mathcal{X} - \mathbf{1}_n\bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\right)\mathcal{G}\right]^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_n = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\,\frac{1}{n}\left(\mathcal{X}^{\mathrm{T}} - \bar{\boldsymbol{x}}\mathbf{1}_n^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{1}_n$$

$$= \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{n}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_n - \frac{1}{n}\bar{\boldsymbol{x}}\mathbf{1}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_n\right) = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{x}} - \bar{\boldsymbol{x}}) = \mathbf{0}$$

$$\Longrightarrow \quad \mathcal{S}_Y = \frac{1}{n}\mathcal{Y}^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{Y} = \frac{1}{n}\left(\mathcal{X}_C\mathcal{G}\right)^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X}_C\mathcal{G} = \frac{1}{n}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\,\mathcal{H}\mathcal{X}_C\,\mathcal{G} = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{n}\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{X}_C\right)\mathcal{G}$$

$\mathcal{H}\mathcal{X}_C = \mathcal{X}_C$

$$= \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{n}\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{H}\mathcal{X}_C\right)\mathcal{G} = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\mathcal{S}_X\mathcal{G} = \mathcal{G}^{\mathrm{T}}\,\mathcal{G}\,\mathcal{L}\,\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\,\mathcal{G} = \mathcal{L} = \mathrm{diag}\left(\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_p\right)$$

$\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\mathcal{G} = \mathcal{I}_p$

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 假设我们想在更低维度的空间中得到观测值 (即 $\mathcal{X}$ 的行) 和变量 (即 $\mathcal{X}$ 的列) 的表示.
  - 因此，观测值在因子轴上的散点图以原点为中心.
  - 观测值的散点图在第一个方向 (第一主成分的方差为 $\ell_1$) 上比在第二个方向(第二主成分的方差为 $\ell_2$) 上分布得更分散.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 变量的表示形式可以通过对偶关系得到.

定理 10.4 (对偶关系) 设 $\mathcal{X}$ 的秩为 $r$. 对于 $k \le r$，$\mathcal{X}^{\mathrm{T}}\mathcal{X}$ 与 $\mathcal{X}\mathcal{X}^{\mathrm{T}}$ 的第 $k$ 个特征值 $\lambda_k$ 相同，对应的特征向量 (分别记为 $\boldsymbol{u}_k$ 与 $\boldsymbol{v}_k$) 之间的关系如下

$$\boldsymbol{u}_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \mathcal{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}_k\,, \quad \boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \mathcal{X}\, \boldsymbol{u}_k\,.$$

- $\mathcal{X}_C$ 的列在 $\mathcal{X}_C\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}$ 的特征向量 $\boldsymbol{v}_k$ 上的投影为

$$\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\sqrt{n\ell_k}}\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{X}_C\boldsymbol{g}_k = \frac{1}{\sqrt{n\ell_k}}\left(n\mathcal{S}_X\right)\boldsymbol{g}_k = \frac{n}{\sqrt{n\ell_k}}\mathcal{S}_X\boldsymbol{g}_k = \frac{n\ell_k}{\sqrt{n\ell_k}}\boldsymbol{g}_k = \sqrt{n\ell_k}\,\boldsymbol{g}_k$$

- 因此，变量在前 $p$ 个轴上的投影就是该矩阵的列

$$\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{V} = \sqrt{n}\mathcal{G}\mathcal{L}^{1/2}$$

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 对于矩阵 $\mathcal{X}_C$ 两列之间夹角，存在一种很好的统计学解释.

$$s_{X_jX_k} = \frac{1}{n}\boldsymbol{x}_{C[j]}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{C[k]} \Longrightarrow \boldsymbol{x}_{C[j]}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{C[k]} = ns_{X_jX_k}$$

$$\Longrightarrow \left\| \boldsymbol{x}_{C[j]} \right\|^2 = ns_{X_jX_j}$$

$$\mathcal{X}_C = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1j} & \cdots & x_{1k} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & \cdots & x_{2j} & \cdots & x_{2k} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nj} & \cdots & x_{nk} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{x}_{C[j]}$ $\boldsymbol{x}_{C[k]}$

  - 用 $\theta_{jk}$ 表示两个变量 $\boldsymbol{x}_{C[j]}$ 与 $\boldsymbol{x}_{C[k]}$ 的夹角，则

$$\cos\theta_{jk} = \frac{\boldsymbol{x}_{C[j]}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{C[k]}}{\left\| \boldsymbol{x}_{C[j]} \right\| \cdot \left\| \boldsymbol{x}_{C[k]} \right\|} = r_{X_jX_k}$$

  - 在矩阵 $\mathcal{X}_C^{\mathrm{T}}\mathcal{V}$ 第一列的散点图中，变量的相对位置可以根据它们之间的相关性来解释，该图展示了原始数据集的相关结构.
  - 显然，在评估相关性时，应该考虑所选因子轴所解释的方差百分比.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 归一化主成分 (NPC) 也可被视为一种用于降维的因子方法.
  - 对变量进行标准化处理，使得每个变量的均值为零、方差为一，从而与变量的度量单位无关.
  - 对 $\mathscr{X}_S$ 的因子分析可得出归一化主成分.
  - 矩阵 $\mathscr{X}_S^{\mathrm{T}}\mathscr{X}_S$ 的谱分解与矩阵 $\mathscr{R}$ 的谱分解相关.

$$\mathscr{X}_S^{\mathrm{T}}\mathscr{X}_S = \mathscr{D}^{-1/2}\mathscr{X}^{\mathrm{T}}\mathscr{H}\mathscr{X}\mathscr{D}^{-1/2} = n\mathscr{R} = n\mathscr{G}_{\mathscr{R}}\mathscr{L}_{\mathscr{R}}\mathscr{G}_{\mathscr{R}}^{\mathrm{T}}$$

  - 归一化主成分 $\mathbf{Z}_j$ 可被视为 $\mathscr{X}_S$ 的行向量在 $\mathscr{G}_{\mathscr{R}}$ 上的投影.

$$\mathscr{Z} = \mathscr{X}_S\mathscr{G}_{\mathscr{R}} = \left(z_1, z_2, \ \ldots, z_p\right)$$

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 归一化主成分 (NPC) 也可被视为一种用于降维的因子方法.
  - 变量的表示形式同样可以由下述矩阵的列给出

$$\mathcal{X}_S^{\mathrm{T}}\mathcal{V}_{\mathcal{R}} = \sqrt{n}\,\mathcal{G}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}^{1/2} \qquad \mathcal{R}_{\mathcal{X}_S,\,\mathcal{Z}} = \mathcal{G}_{\mathcal{R}}\,\mathcal{L}_{\mathcal{R}}^{1/2}$$

  - 在因子分析中，变量的投影给出了归一化主成分 (NPC) $\mathcal{Z}_k$ 与原始变量 $\boldsymbol{x}_{[j]}$ 之间的相关性 (相差因子 $\sqrt{n}$，该因子可能是坐标轴的尺度).

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 这意味着，通过同时查看绘制有变量的图形，可以对观测值的表征进行更深入的解读.

$$r_{X_jX_k} = \frac{1}{n}\boldsymbol{x}_{S[j]}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{S[k]} \Longrightarrow \boldsymbol{x}_{S[j]}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{S[k]} = n\, r_{X_jX_k}$$

$$\Longrightarrow \left\| \boldsymbol{x}_{S[j]} \right\|^2 = n$$

$$\mathcal{X}_S = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1j} & \cdots & x_{1k} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & \cdots & x_{2j} & \cdots & x_{2k} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nj} & \cdots & x_{nk} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{x}_{S[j]}$ $\boldsymbol{x}_{S[k]}$

- 因此，在整个空间中，所有标准化变量 ($\mathcal{X}_S$ 的列）都包含在 $\mathbb{R}^n$ 中的“球体” 内，该球体以原点为中心，半径为 $\sqrt{n}$ (图形的尺度).
- 设 $\theta_{jk}$ 表示两个变量 $\boldsymbol{x}_{S[j]}$ 与 $\boldsymbol{x}_{S[k]}$ 之间的夹角，则 $\cos\theta_{jk} = r_{X_jX_k}$.
- 因此，当观察降维空间 (例如，前两个因子) 中变量的表示时，我们能从变量间夹角的角度，了解原始变量 $X_i$ 之间的相关结构.
- 当然，这些子空间中表示的质量必须予以考虑，下一节将对此进行阐述.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 表示的质量
  - 表示质量的总体衡量指标由下式给出

$$\psi = \frac{\ell_1 + \ell_2 + \cdots + \ell_q}{\sum_{j=1}^{p} \ell_j}$$

  - 在实际应用当中，$q$ 往往取 1、2 或 3.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 表示的质量
  - 检查每个个体是否能通过主成分得到良好呈现会很有用.
  - 显然，在投影空间中两组观测值的接近程度不一定与在完整的原始空间 $\mathbb{R}^p$ 中的接近程度一致，这可能会导致对图示的错误解读.
  - 基于此，计算个体 $i$ 的表示与第 $k$ 个主成分 (PC) 或归一化主成分 (NPC) 轴之间的夹角 $\vartheta_{ik}$ 是有意义的.

$$\cos\vartheta_{ik} = \frac{\boldsymbol{y}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_k}{\|\boldsymbol{y}_i\|\ \|\boldsymbol{e}_k\|} = \frac{y_{ik}}{\|\boldsymbol{x}_{C[i]}\|}$$

$$\cos\zeta_{ik} = \frac{\boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_k}{\|\boldsymbol{z}_i\|\ \|\boldsymbol{e}_k\|} = \frac{z_{ik}}{\|\boldsymbol{x}_{S[i]}\|}$$

  - 如果个体 $i$ 与第 $k$ 个主成分轴对应的夹角较小，即对于 $k = 1, 2, \ldots, p$，$\cos^2\vartheta_{ik}$ 接近 1，那么个体 $i$ 将在第 $k$ 个主成分轴上得到体现.

$$\boldsymbol{e}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 表示的质量
  - 因为对每个 $i$ 有

$$\sum_{k=1}^{p} \cos^2 \vartheta_{ik} = \frac{\boldsymbol{y}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}_i}{\boldsymbol{x}_{C[i]}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_{C[i]}} = \frac{\boldsymbol{x}_{C[i]}^{\mathrm{T}} \mathcal{G}\mathcal{G}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_{C[i]}}{\boldsymbol{x}_{C[i]}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_{C[i]}} = 1$$

  - $\cos^2 \vartheta_{ik}$ 的值有时被称为第 $k$ 轴对第 $i$ 个观测值表示的相对贡献.
  - 例如，如果 $\cos^2 \vartheta_{i1} + \cos^2 \vartheta_{i2}$ 的值较大 (接近 1)，那么第 $i$ 个观测值在前两个主轴所构成的平面上能得到很好的呈现，这是因为它与该平面的对应夹角的余弦值接近 1.
  - 我们已经知道，变量表示的质量可以通过主成分 (PC) 对 $X_i$ 方差的解释百分比来评估，该百分比分别由 $r^2_{X_i X_j}$ 或 $r^2_{X_i Z_j}$ 给出.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.

```
rm(list = ls(all = TRUE)) # clear all variables
graphics.off()
setwd("~/Desktop/2023_Applied Multivariate Statistical Analysis/R Codes with data/Data")
library(readr)
x = read_csv("food.csv")
x
```

```
> x
# A tibble: 12 × 8
   family bread veget fruit  meat poult  milk  wine
   <chr>  <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
 1 MA2      332   428   354  1437   526   247   427
 2 EM2      293   559   388  1527   567   239   258
 3 CA2      372   767   562  1948   927   235   433
 4 MA3      406   563   341  1507   544   324   407
 5 EM3      386   608   396  1501   558   319   363
 6 CA3      438   843   689  2345  1148   243   341
 7 MA4      534   660   367  1620   638   414   407
 8 EM4      460   699   484  1856   762   400   416
 9 CA4      385   789   621  2366  1149   304   282
10 MA5      655   776   423  1848   759   495   486
11 EM5      584   995   548  2056   893   518   319
12 CA5      515  1097   887  2630  1167   561   284
```

```
p  = ncol(x)
n  = nrow(x)
x  = x[, 2:p]
x1 = sqrt((n - 1) * apply(x, 2, var)/n)
x2 = x - matrix(apply(as.matrix(x), 2, mean), nrow = n, ncol = p - 1, byrow = T) # centered da
x  = as.matrix(x2/matrix(x1, nrow = n, ncol = p - 1, byrow = T))  # standardizes the data matri
round(x, digits = 3)
```

```
> round(x, digits = 3)
       bread  veget  fruit   meat  poult   milk   wine
 [1,] -1.118 -1.678 -0.955 -1.187 -1.160 -0.992  0.850
 [2,] -1.498 -0.955 -0.740 -0.949 -0.988 -1.063 -1.609
 [3,] -0.728  0.193  0.361  0.162  0.518 -1.099  0.937
 [4,] -0.396 -0.933 -1.038 -1.002 -1.085 -0.305  0.559
 [5,] -0.591 -0.685 -0.690 -1.018 -1.026 -0.350 -0.081
 [6,] -0.084  0.613  1.164  1.209  1.443 -1.028 -0.401
 [7,]  0.851 -0.398 -0.873 -0.704 -0.691  0.497  0.559
 [8,]  0.130 -0.182 -0.133 -0.081 -0.172  0.372  0.690
 [9,] -0.601  0.315  0.734  1.265  1.447 -0.484 -1.260
[10,]  2.031  0.243 -0.519 -0.102 -0.185  1.219  1.708
[11,]  1.339  1.452  0.272  0.447  0.376  1.425 -0.721
[12,]  0.666  2.015  2.417  1.962  1.523  1.808 -1.231
```

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.

```
R  = t(x) %*% x / n # correlation matrix
round(R, digits = 3)

e  = eigen(R) # eigenvalues and eigenvectors of correlation matrix
e1 = e$values
round(e1, digits = 3) # eigenvalues
round(e1 / sum(e1), digits = 4) # proportions of each NPC
round(cumsum(e1) / sum(e1), digits = 4) # cumulative proportions

e2 = e$vectors
round(e2, digits = 3) # eigenvecto
```

```
> round(R, digits = 3)
       bread  veget  fruit   meat  poult  milk   wine
bread  1.000  0.593  0.196  0.321  0.248 0.856  0.304
veget  0.593  1.000  0.856  0.881  0.827 0.663 -0.356
fruit  0.196  0.856  1.000  0.959  0.926 0.332 -0.486
meat   0.321  0.881  0.959  1.000  0.982 0.375 -0.437
poult  0.248  0.827  0.926  0.982  1.000 0.233 -0.400
milk   0.856  0.663  0.332  0.375  0.233 1.000  0.007
wine   0.304 -0.356 -0.486 -0.437 -0.400 0.007  1.000
```

```
> round(e1, digits = 3) # eigenvalues
[1] 4.333 1.830 0.631 0.128 0.058 0.019 0.001
> round(e1 / sum(e1), digits = 4) # proportions of each NPC
[1] 0.6190 0.2615 0.0901 0.0183 0.0082 0.0027 0.0001
> round(cumsum(e1) / sum(e1), digits = 4) # cumulative proportions of each NPCs
[1] 0.6190 0.8805 0.9706 0.9890 0.9972 0.9999 1.0000
```

$$\mathscr{G}_{\mathscr{R}} =$$

```
> round(e2, digits = 3) # eigenvectors
       [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]   [,7]
[1,] -0.240  0.622  0.011 -0.544 -0.036  0.508 -0.024
[2,] -0.466  0.098  0.062 -0.023  0.809 -0.301  0.156
[3,] -0.446 -0.205 -0.145  0.548  0.067  0.625 -0.205
[4,] -0.462 -0.141 -0.207 -0.053 -0.411 -0.093  0.737
[5,] -0.438 -0.197 -0.356 -0.324 -0.224 -0.350 -0.605
[6,] -0.281  0.523  0.444  0.450 -0.341 -0.332 -0.151
[7,]  0.206  0.479 -0.780  0.306  0.069 -0.138  0.045
```

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 通过查看原始变量 $X_i$ 与主成分之间的相关性，对主成分的解读会最为透彻.
  - 由于前两个主成分解释了 88.1% 的方差，因此我们只关注前两个主成分.

$$r_{X_i Z_j} = \sqrt{\ell_j}\, g_{R,\,ij}$$

```
# correlations between original variables and NPCs
a  = e2[, 1:2]
w  = a * sqrt(matrix(e1[1:2], nrow(a), ncol(a), byrow = TRUE))
round(w, digits = 3)

# sum of squared correlations between original variables and first two NPCs
round(as.matrix(apply(w^2, 1, sum)), digits = 3)
```

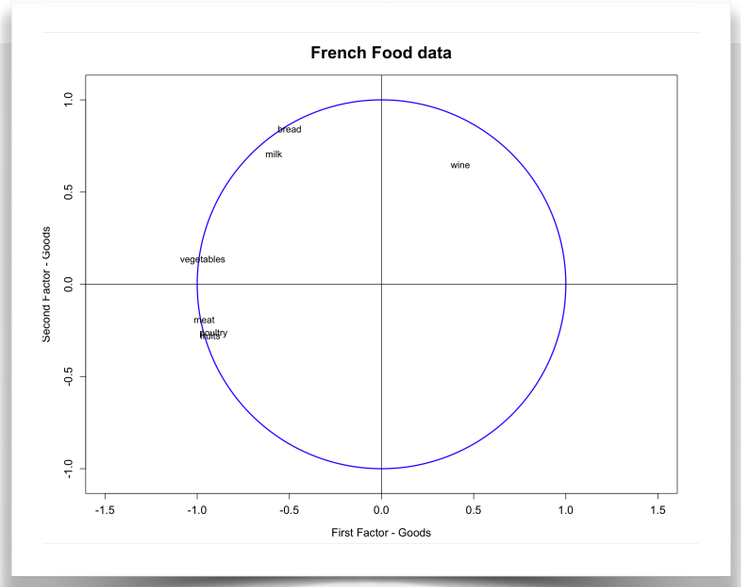
```
> round(w, digits = 3)
       [,1]   [,2]
[1,] -0.499  0.842
[2,] -0.970  0.133
[3,] -0.929 -0.278
[4,] -0.962 -0.191
[5,] -0.911 -0.266
[6,] -0.584  0.707
[7,]  0.428  0.648
```

```
> round(as.matrix(apply(w^2, 1, sum)), digits = 3)
      [,1]
[1,] 0.957
[2,] 0.958
[3,] 0.941
[4,] 0.962
[5,] 0.901
[6,] 0.841
[7,] 0.603
```

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变量的二维图形表示.

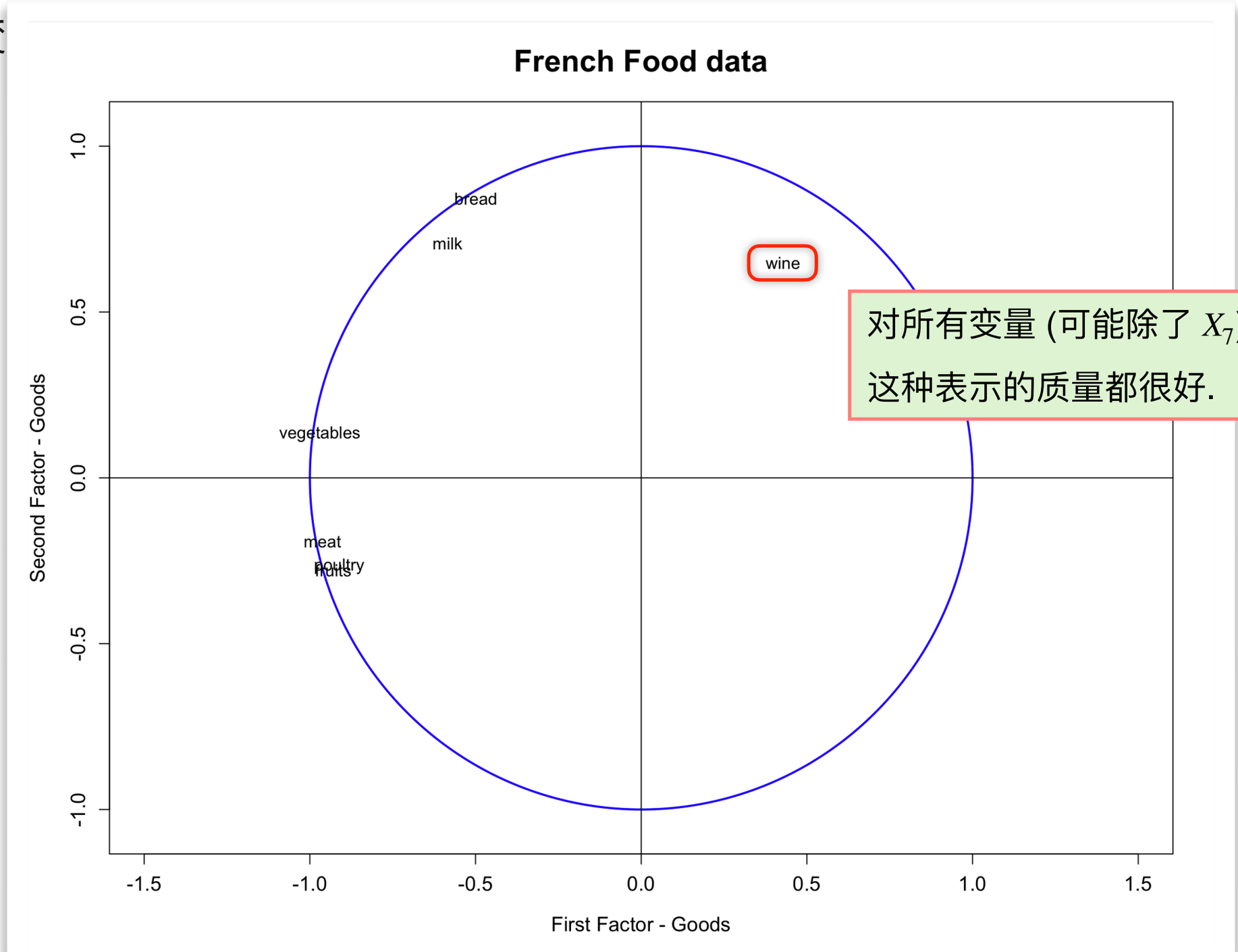
```
g  = eigen(t(x) %*% x/n)
g1 = g$values
g2 = g$vectors
b  = g2[, 1:2]
z  = b * sqrt(matrix(g1[1:2], nrow(b), ncol(b), byrow = TRUE))

graphics.off()
ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlim = c(-1.05, 1.05), ylim = c(-1.05, 1.05),
    xlab = "First Factor - Goods", ylab = "Second Factor - Goods", main = "French Food data",
    cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.8, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("bread", "vegetables", "fruits", "meat", "poultry", "milk", "wine")
text(z, label)
```




- 图形是变量在二维空间 $\mathbb{R}^2$ 中的投影.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变



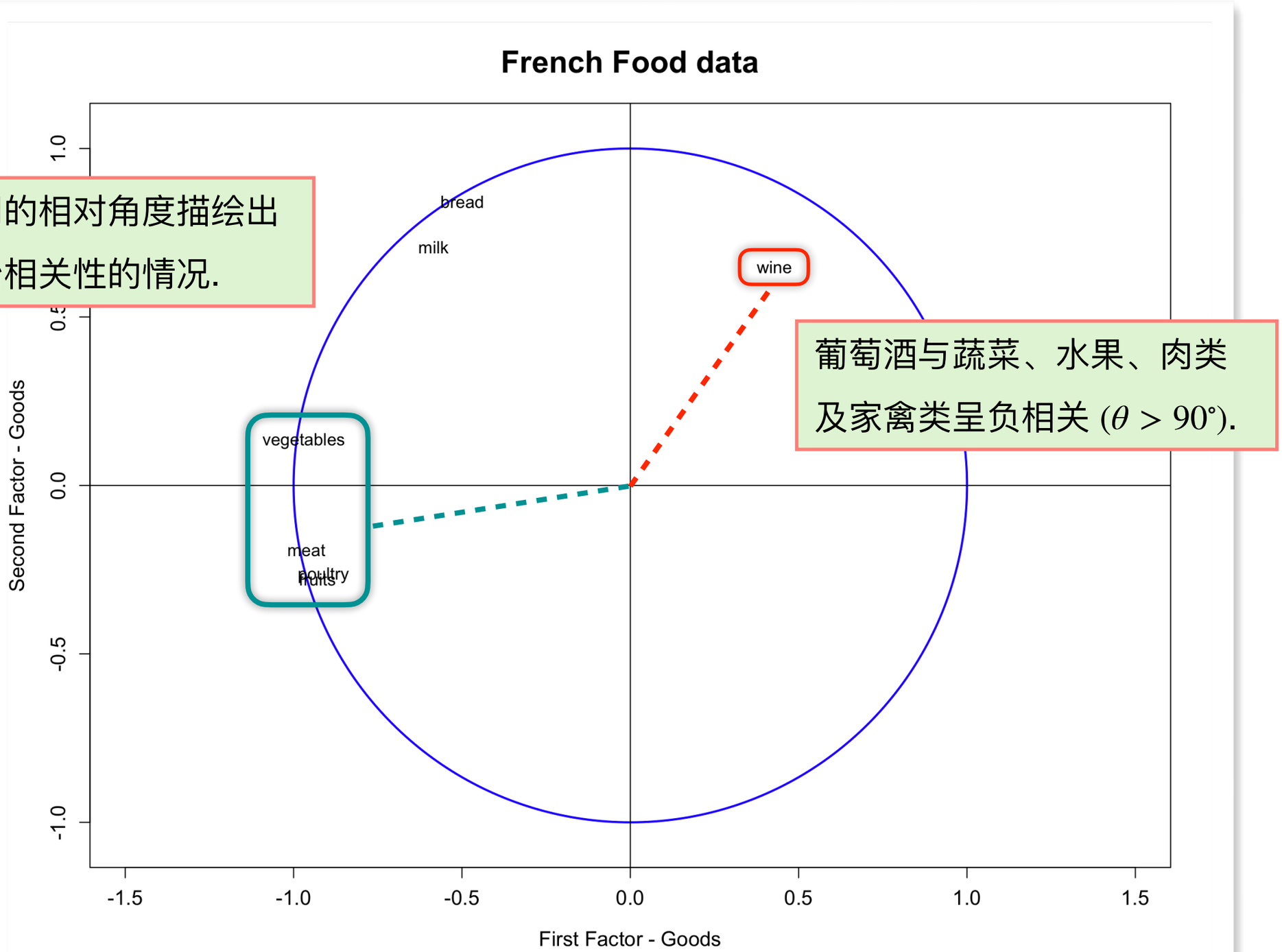

对所有变量 (可能除了 $X_7$) 来说,
这种表示的质量都很好.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变

它们之间的相对角度描绘出了其原始相关性的情况.

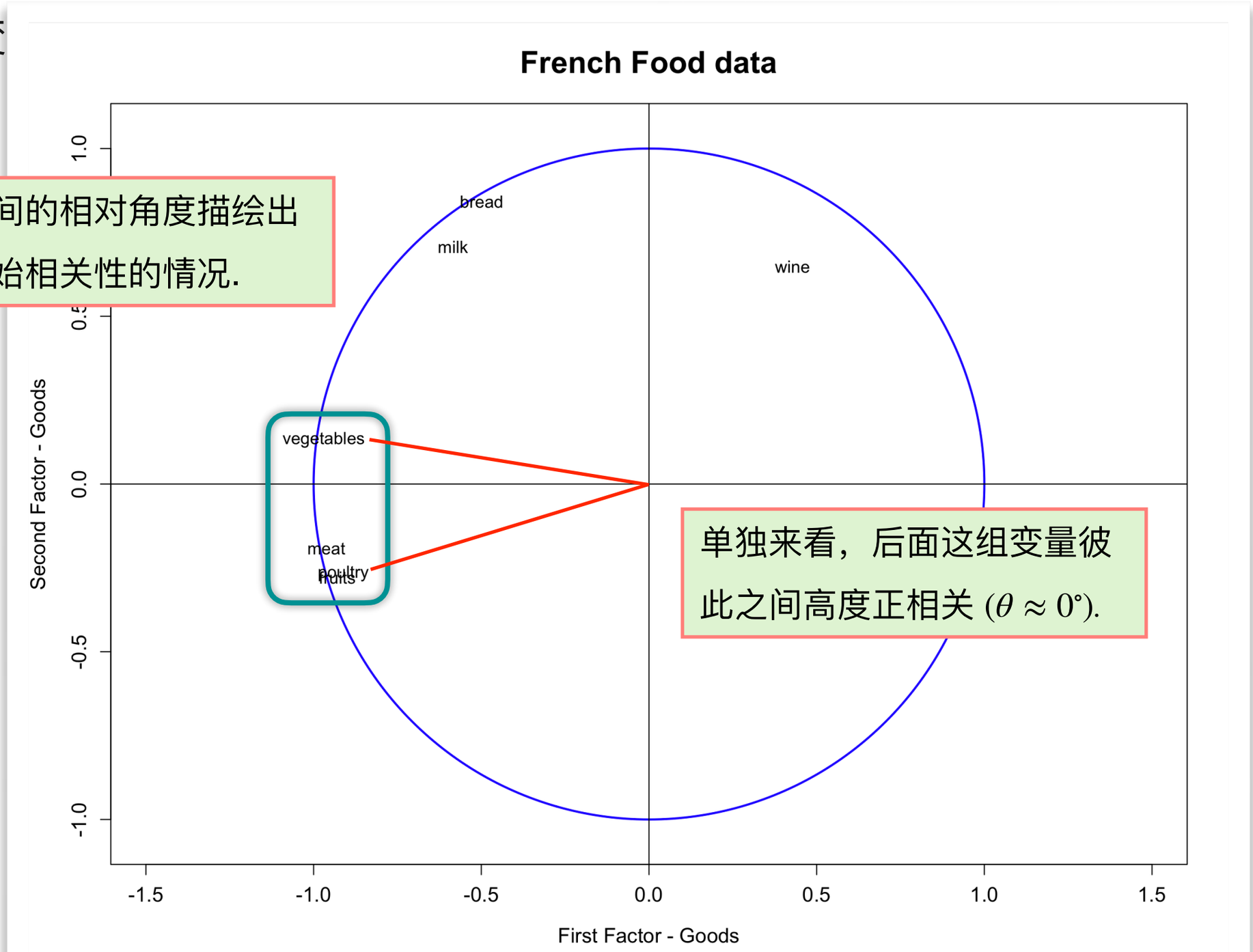
葡萄酒与蔬菜、水果、肉类及家禽类呈负相关 ($\theta > 90°$).



# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变

它们之间的相对角度描绘出了其原始相关性的情况.

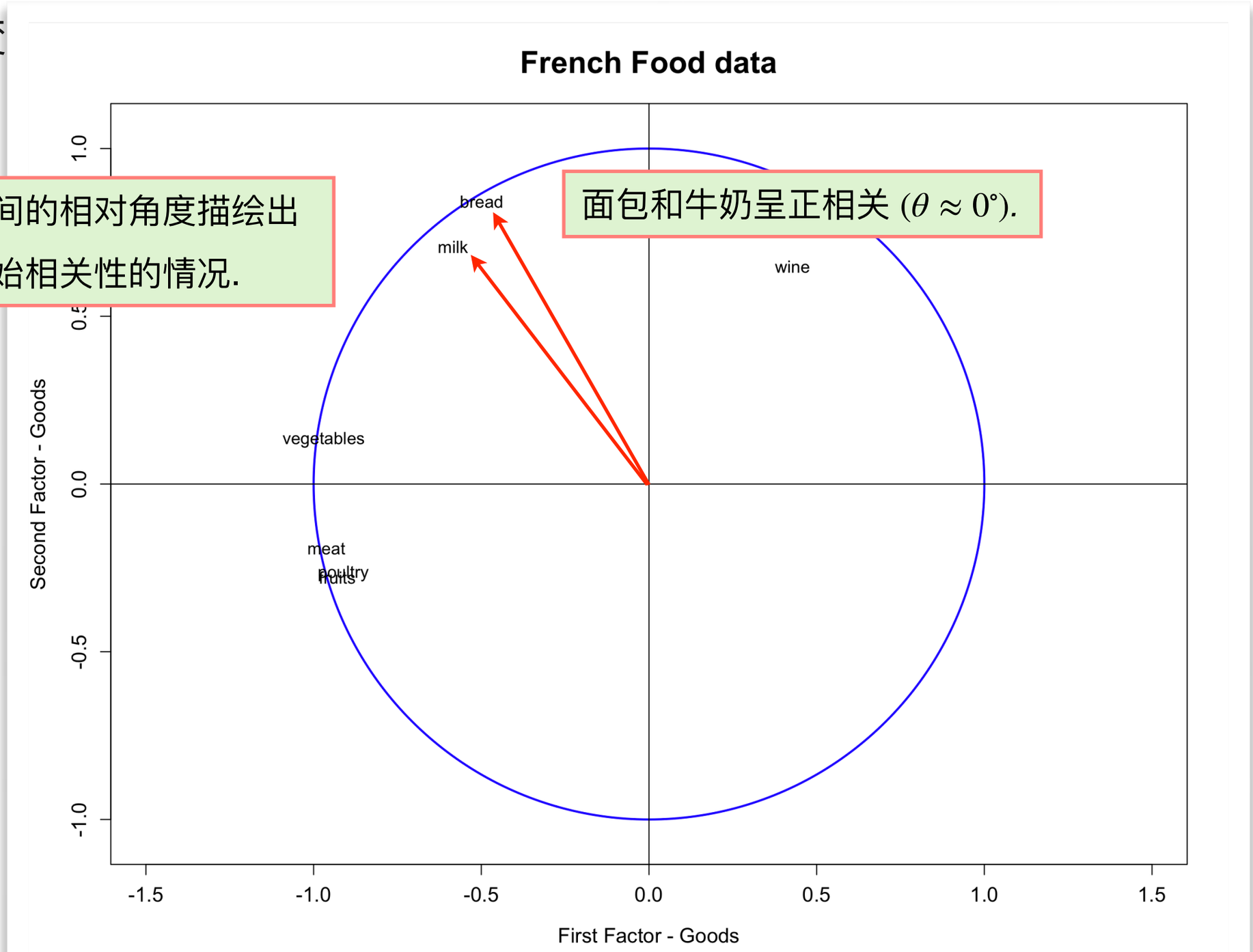


# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变

它们之间的相对角度描绘出了其原始相关性的情况.

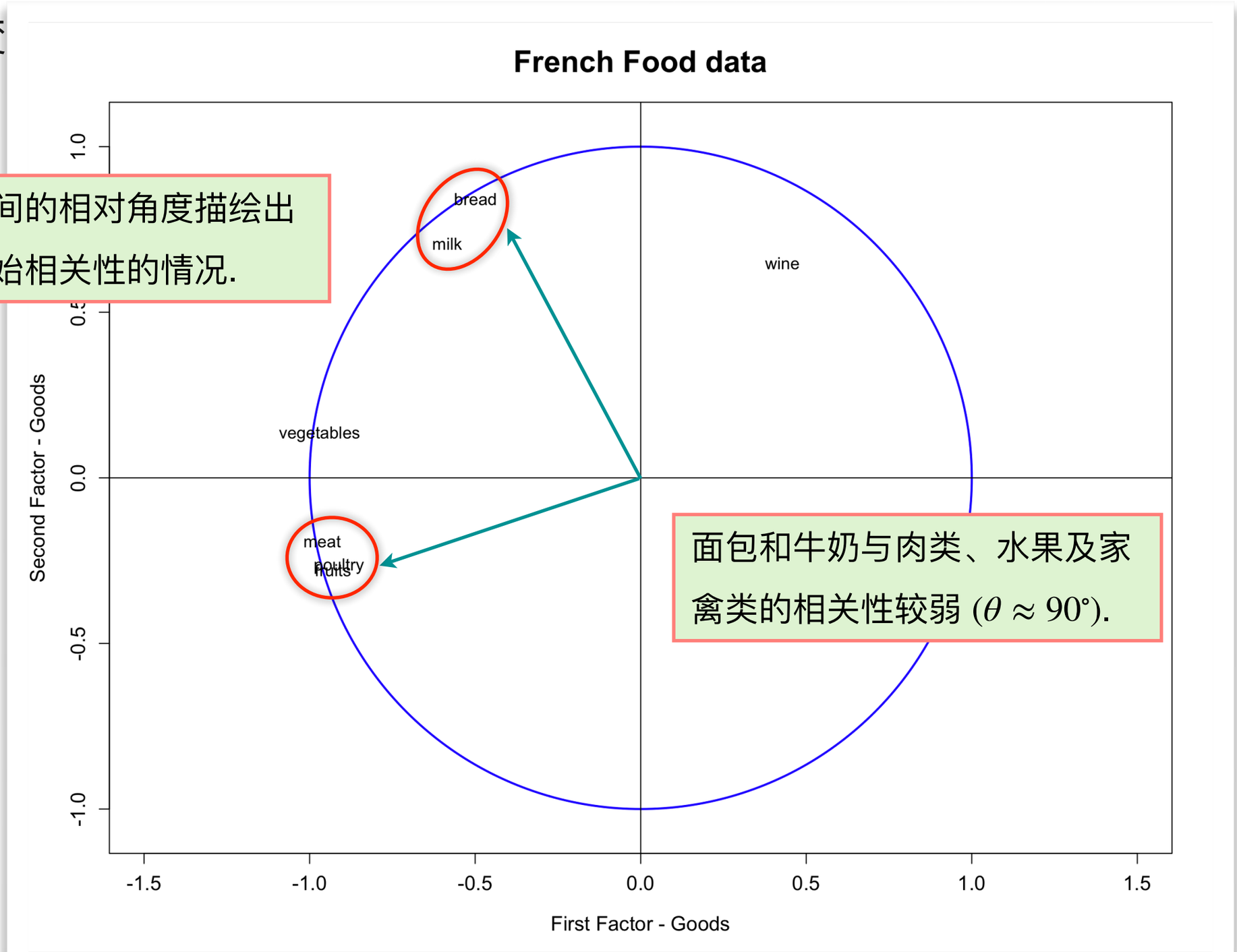
面包和牛奶呈正相关 $(\theta \approx 0^{\circ})$.



# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 变

它们之间的相对角度描绘出了其原始相关性的情况.



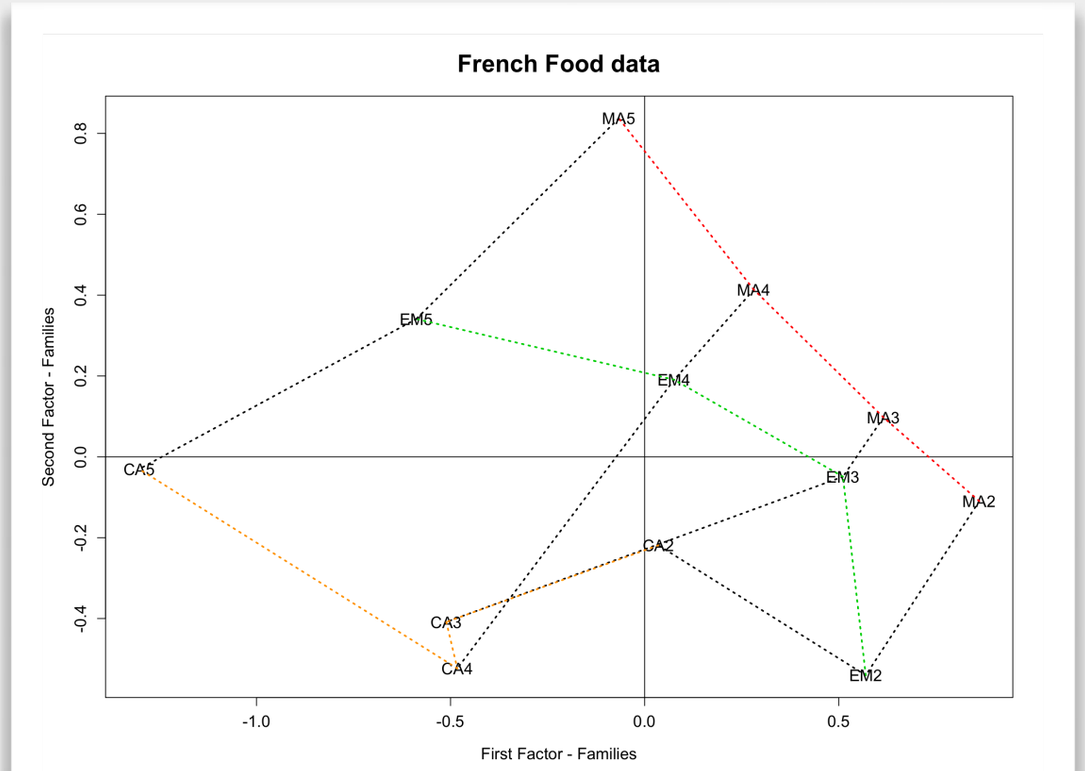

面包和牛奶与肉类、水果及家禽类的相关性较弱 ($\theta \approx 90°$).

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 观测值的可视化.

```
e  = eigen(x %*% t(x)/n)
e1 = e$values
e2 = e$vectors
a  = e2[, 1:2]
w  = -a * sqrt(matrix(e1[1:2], nrow(a), ncol(a), byrow = TRUE))

plot(w, type = "n", xlab = "First Factor - Families", ylab = "Second Factor - Families",
    main = "French Food data", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.8, lwd = 2)
text(w, c("MA2", "EM2", "CA2", "MA3", "EM3", "CA3", "MA4", "EM4", "CA4", "MA5", "EM5",
        "CA5"), cex = 1.2)
abline(h = 0, v = 0)
segments(w[1, 1], w[1, 2], w[2, 1], w[2, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[2, 1], w[2, 2], w[3, 1], w[3, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[1, 1], w[1, 2], w[4, 1], w[4, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'red')
segments(w[2, 1], w[2, 2], w[5, 1], w[5, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'green3')
segments(w[4, 1], w[4, 2], w[5, 1], w[5, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[5, 1], w[5, 2], w[6, 1], w[6, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[3, 1], w[3, 2], w[6, 1], w[6, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'orange')
segments(w[6, 1], w[6, 2], w[9, 1], w[9, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'orange')
segments(w[8, 1], w[8, 2], w[9, 1], w[9, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[5, 1], w[5, 2], w[8, 1], w[8, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'green3')
segments(w[7, 1], w[7, 2], w[8, 1], w[8, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[4, 1], w[4, 2], w[7, 1], w[7, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'red')
segments(w[7, 1], w[7, 2], w[10, 1], w[10, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'red')
segments(w[8, 1], w[8, 2], w[11, 1], w[11, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'green3')
segments(w[9, 1], w[9, 2], w[12, 1], w[12, 2], lty = 3, lwd = 2, col = 'orange')
segments(w[10, 1], w[10, 2], w[11, 1], w[11, 2], lty = 3, lwd = 2)
segments(w[11, 1], w[11, 2], w[12, 1], w[12, 2], lty = 3, lwd = 2)
```

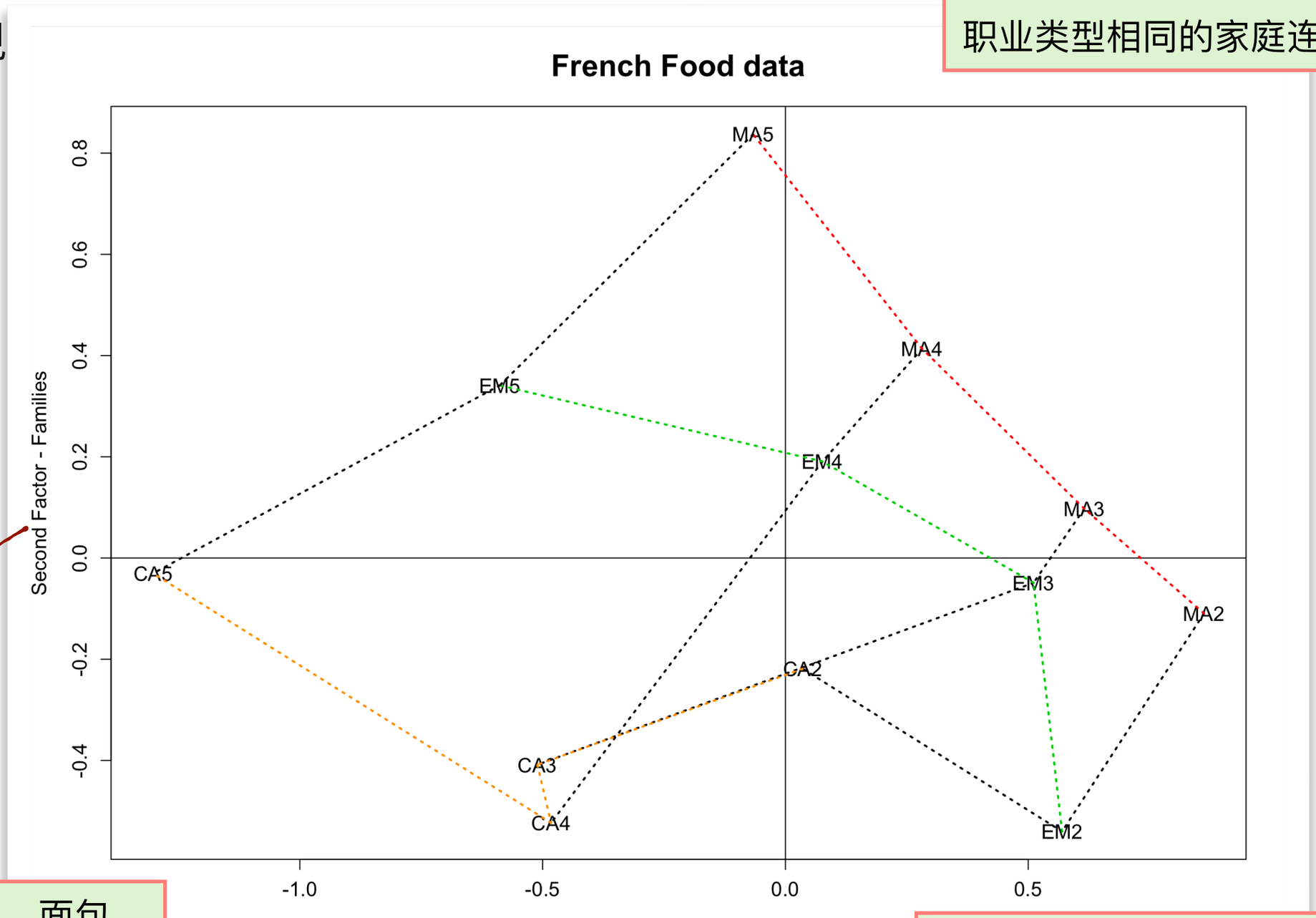
图形是观测值在二维空间 $\mathbb{R}^2$ 中的投影.



# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.
  - 观

绘制线条将规模相同的家庭以及职业类型相同的家庭连接起来.



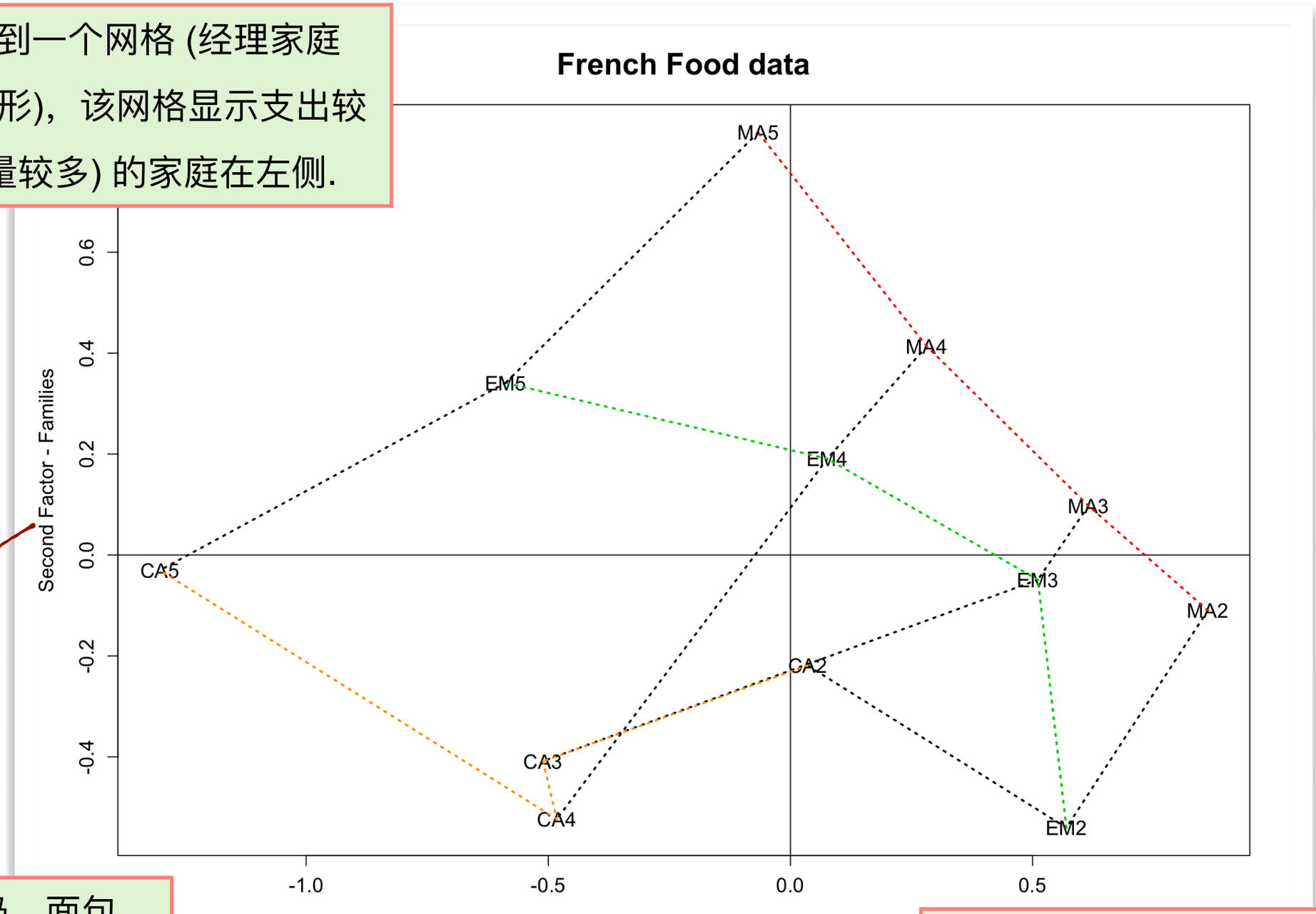

$Z_2$ 是牛奶、面包、葡萄酒因子.

$Z_1$ 是与蔬菜、肉类、家禽和水果相关的因子.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.

可以清晰看到一个网格 (经理家庭使其略有变形)，该网格显示支出较高 (孩子数量较多) 的家庭在左侧.

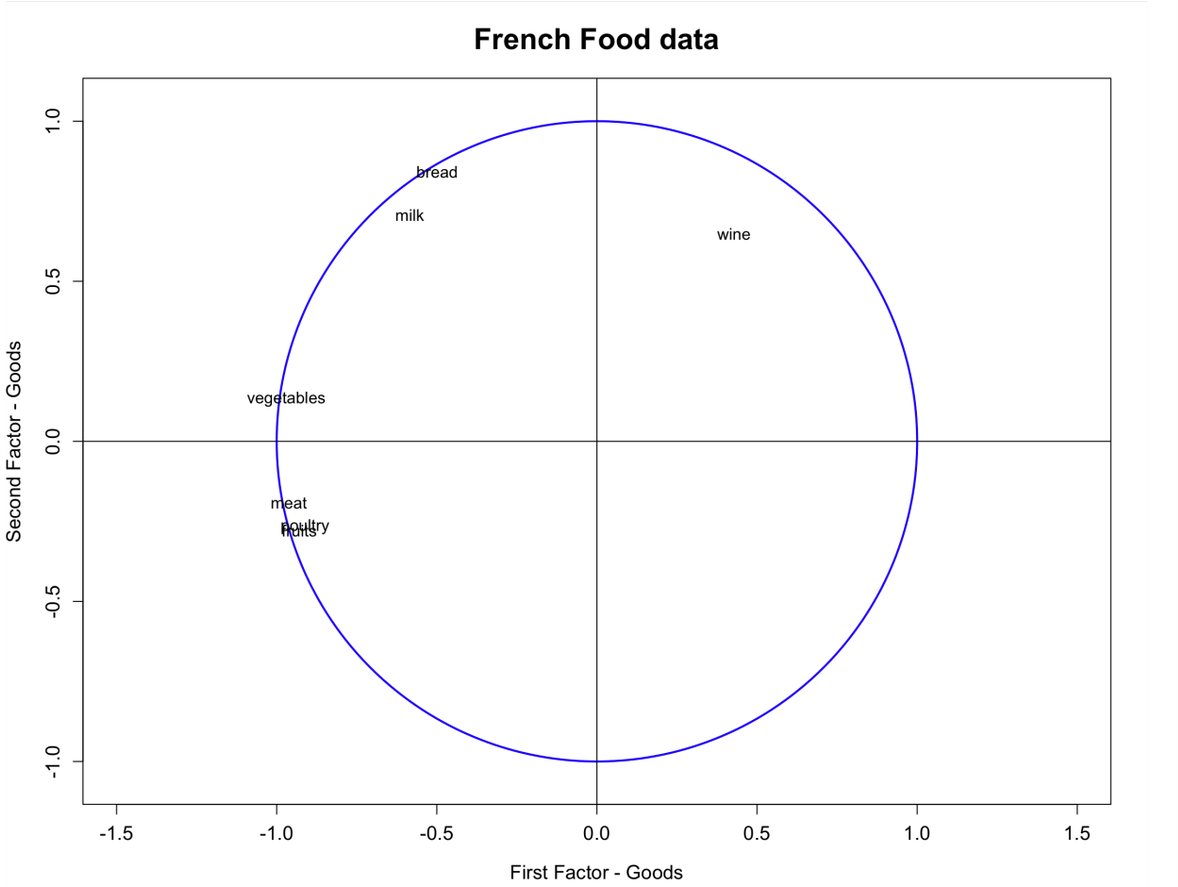


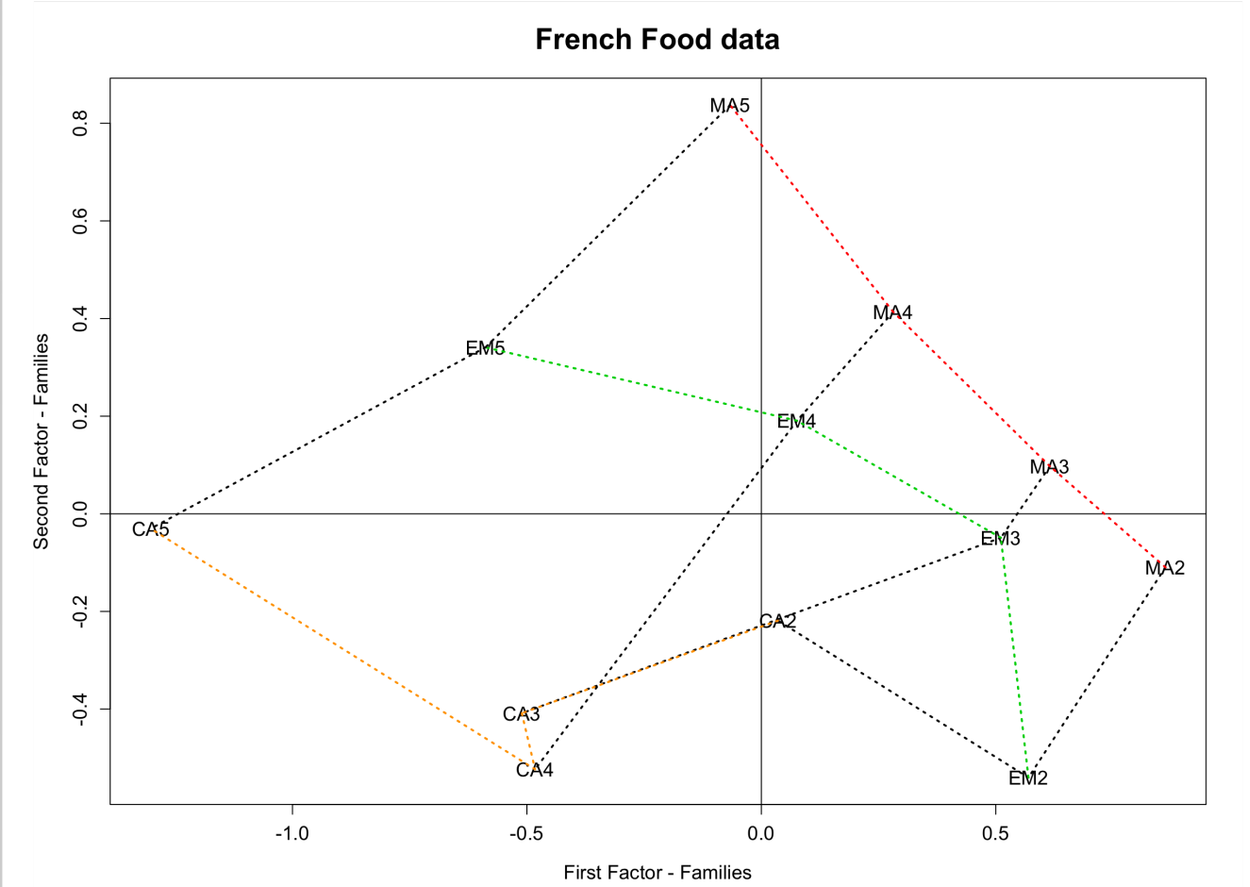

$Z_2$ 是牛奶、面包、葡萄酒因子.

$Z_1$ 是与蔬菜、肉类、家禽和水果相关的因子.

# 主成分作为一种因子方法 (Principal Components as a Factorial Method)

- 例: 法国食品支出数据集.




- 综合考虑这两张图，就能说明是哪些类型的支出导致了食品支出的相似性.
- 面包、牛奶和葡萄酒的支出，在体力劳动者和雇员之间情况相近.
- 经理家庭的特点是在蔬菜、水果、肉类和禽类上的支出较高.

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

$X_1$ : 人均犯罪率

$X_2$ : 划定用于大片住宅用地的比例

$X_3$ : 非零售商业用地的比例

$X_4$ : 查尔斯河 (与河相邻为 1，否则为 0)

$X_5$ : 一氧化氮浓度

$X_6$ : 每套住宅的平均房间数

由于 $X_4$ 是一个离散的 0 – 1 变量，我们将其剔除.

$X_7$ : 1940年之前建造的自住房屋比例

$X_8$ : 到波士顿五个就业中心的加权距离

$X_9$ : 辐射状公路可达性指数

$X_{10}$ : 每 10000 美元房产的全额税率

$X_{11}$ : 学生与教师的比例

$X_{12}$ : $1000(B-0.63)^2\ \mathrm{I}(B<0.63)$ 其中 $B$ 是非洲裔美国人的比例

$X_{13}$ : 人口中较低社会地位群体的占比

$X_{14}$ : 自有住房的中位价值 (单位：1000 美元)

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
library(MASS)
data = Boston
head(data)
```

```
> head(data)
       crim  zn     indus        nox       rm      age      dis       rad      tax   ptratio  black    lstat     medv
1 -5.064036 1.8 0.8372475 -0.6198967 1.883275 3.432567 1.408545 0.0000000 5.690359 0.4548647 3.9690 2.231591 3.178054
2 -3.600502 0.0 1.9558605 -0.7571525 1.859574 5.529585 1.602836 0.6931472 5.488938 1.2364504 3.9690 3.023243 3.072693
3 -3.601235 0.0 1.9558605 -0.7571525 1.971996 2.918119 1.602836 0.6931472 5.488938 1.2364504 3.9283 2.007486 3.546740
4 -3.430523 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.945624 1.419592 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9463 1.714643 3.508556
5 -2.672924 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.966693 2.162710 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9690 2.308679 3.589059
6 -3.511570 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.860975 2.639947 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9412 2.282542 3.356897
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.
  - 由于大多数变量呈现出不对称性，因此进行以下变换：

$$\widetilde{X}_1 = \log X_1, \qquad \widetilde{X}_8 = \log X_8$$
$$\widetilde{X}_2 = \frac{X_2}{10}, \qquad \widetilde{X}_9 = \log X_9$$
$$\widetilde{X}_3 = \log X_3, \qquad \widetilde{X}_{10} = \log X_{10}$$
$$\widetilde{X}_4 = X_4, \qquad \widetilde{X}_{11} = \frac{\mathrm{e}^{0.4\times X_{11}}}{100}$$
$$\widetilde{X}_5 = \log X_5, \qquad \widetilde{X}_{12} = \frac{X_{12}}{100}$$
$$\widetilde{X}_6 = \log X_6, \qquad \widetilde{X}_{13} = \sqrt{X_{13}}$$
$$\widetilde{X}_7 = \frac{X_7^{2.5}}{10000}, \qquad \widetilde{X}_{14} = \log X_{14}$$

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
# transform data
xt      = data
xt[, 1]  = log(data[, 1])
xt[, 2]  = data[, 2]/10
xt[, 3]  = log(data[, 3])
xt[, 5]  = log(data[, 5])
xt[, 6]  = log(data[, 6])
xt[, 7]  = (data[, 7]^(2.5))/10000
xt[, 8]  = log(data[, 8])
xt[, 9]  = log(data[, 9])
xt[, 10] = log(data[, 10])
xt[, 11] = exp(0.4 * data[, 11])/1000
xt[, 12] = data[, 12]/100
xt[, 13] = sqrt(data[, 13])
xt[, 14] = log(data[, 14])
data     = xt[, -4]
head(data)
```

```
> head(data)
       crim  zn     indus        nox       rm      age      dis       rad      tax   ptratio  black    lstat     medv
1 -5.064036 1.8 0.8372475 -0.6198967 1.883275 3.432567 1.408545 0.0000000 5.690359 0.4548647 3.9690 2.231591 3.178054
2 -3.600502 0.0 1.9558605 -0.7571525 1.859574 5.529585 1.602836 0.6931472 5.488938 1.2364504 3.9690 3.023243 3.072693
3 -3.601235 0.0 1.9558605 -0.7571525 1.971996 2.918119 1.602836 0.6931472 5.488938 1.2364504 3.9283 2.007486 3.546740
4 -3.430523 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.945624 1.419592 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9463 1.714643 3.508556
5 -2.672924 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.966693 2.162710 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9690 2.308679 3.589059
6 -3.511570 0.0 0.7793249 -0.7808861 1.860975 2.639947 1.802073 1.0986123 5.402677 1.7722408 3.9412 2.282542 3.356897
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
n1 = nrow(data)
n2 = ncol(data)
# standardizes the data
x = (data - matrix(apply(data, 2, mean), n1, n2, byrow = T)) / matrix(sqrt((n1 - 1) * apply(data, 2, var)/n1), n1, n2, byrow = T)
round(head(x), digits = 4)
```

```
> round(head(x), digits = 4)
     crim      zn   indus     nox     rm     age    dis     rad     tax ptratio  black   lstat   medv
1 -1.9832  0.2848 -1.7043 -0.0490 0.4581 -0.4570 0.4091 -2.1370 -0.6087 -1.2440 0.4411 -1.2027 0.3515
2 -1.3056 -0.4877 -0.2632 -0.7309 0.2469  0.1316 0.7696 -1.3439 -1.1174 -0.6705 0.4411 -0.4000 0.0935
3 -1.3060 -0.4877 -0.2632 -0.7309 1.2488 -0.6014 0.7696 -1.3439 -1.1174 -0.6705 0.3964 -1.4299 1.2544
4 -1.2269 -0.4877 -1.7790 -0.8489 1.0138 -1.0219 1.1392 -0.8800 -1.3353 -0.2773 0.4162 -1.7269 1.1609
5 -0.8762 -0.4877 -1.7790 -0.8489 1.2015 -0.8134 1.1392 -0.8800 -1.3353 -0.2773 0.4411 -1.1245 1.3580
6 -1.2645 -0.4877 -1.7790 -0.8489 0.2594 -0.6794 1.1392 -0.8800 -1.3353 -0.2773 0.4106 -1.1510 0.7895
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
# spectral decomposition
eig = eigen((n1 - 1) * cov(x)/n1)
e = eig$values # eigenvalues
perc = e/sum(e) # explained variance
cum = cumsum(e)/sum(e) # cumulative explained percentages
evpc = data.frame(eigenvalues = e, percent = perc, cumpercent = cum)
round(evpc, digits = 4)
```

```
> round(evpc, digits = 4)
   eigenvalues percent cumpercent
1       7.2852  0.5604      0.5604
2       1.3517  0.1040      0.6644
3       1.1266  0.0867      0.7510
4       0.7802  0.0600      0.8111
5       0.6359  0.0489      0.8600
6       0.5290  0.0407      0.9007
7       0.3397  0.0261      0.9268
8       0.2628  0.0202      0.9470
9       0.1936  0.0149      0.9619
10      0.1547  0.0119      0.9738
11      0.1405  0.0108      0.9846
12      0.1100  0.0085      0.9931
13      0.0900  0.0069      1.0000
```

第一主成分解释了总方差的56%.

前三个主成分加起来能解释超过 75% 的方差.

这些结果表明，研究 2 个，最多 3 个主成分就足够了.

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
v = eig$vectors
round(v, digits = 4) # eigenvectors
```

```
> round(v, digits = 4) # eigenvectors
        [,1]    [,2]    [,3]    [,4]    [,5]    [,6]    [,7]    [,8]    [,9]   [,10]   [,11]   [,12]   [,13]
 [1,]  0.3363  0.1933  0.1373  0.0459  0.1084 -0.0882  0.0861  0.2047  0.0154 -0.2098  0.3262 -0.2388  0.7430
 [2,] -0.2371 -0.0251  0.4765 -0.0981  0.4405  0.5190 -0.3205 -0.1946  0.0851 -0.2847  0.0774 -0.0877 -0.0244
 [3,]  0.3179  0.0352 -0.1738  0.0753 -0.0466 -0.2477 -0.1635 -0.7175  0.4110 -0.2527  0.1132 -0.0663 -0.0824
 [4,]  0.3237  0.2057 -0.1677 -0.1356  0.1037  0.1222 -0.1289 -0.0560 -0.5291 -0.1539  0.3923  0.5251 -0.1669
 [5,] -0.1891  0.6052  0.0819  0.0961 -0.2884  0.3207  0.5312 -0.2899 -0.0475 -0.1109 -0.1150  0.0290  0.0350
 [6,]  0.2964  0.1338 -0.2778 -0.1141  0.0235  0.5206  0.0298  0.2278  0.5005  0.3668  0.2521 -0.0748 -0.1599
 [7,] -0.3060 -0.2498  0.2810  0.1206 -0.0558 -0.1563  0.2993 -0.0452  0.2982  0.1296  0.5670  0.4502  0.0376
 [8,]  0.2790  0.2457  0.3584  0.2227  0.2489 -0.2888  0.2165  0.3307  0.1270 -0.2297 -0.0102 -0.0967 -0.5511
 [9,]  0.3006  0.1415  0.3459  0.1959  0.2685 -0.0474 -0.0666 -0.2473 -0.0411  0.6317 -0.3017  0.2612  0.1778
[10,]  0.2102 -0.2294  0.1411  0.6836 -0.4683  0.3196 -0.2405  0.1023 -0.0565 -0.1361 -0.0158  0.0646 -0.0073
[11,] -0.1818 -0.0895 -0.4870  0.5618  0.5757  0.0831  0.2277 -0.0606 -0.0827 -0.0349  0.0168 -0.0374  0.0495
[12,]  0.2963 -0.3658 -0.0236 -0.2109  0.0963  0.1796  0.3610  0.0659  0.2089 -0.3542 -0.4397  0.4157  0.1481
[13,] -0.2729  0.4438 -0.1646  0.1096  0.0181 -0.1465 -0.4272  0.2746  0.3613 -0.1633 -0.1939  0.4360  0.1573
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

```
# principal components - projections of the individuals
xv   = as.matrix(x) %*% v
round(head(xv), digits = 4)
```

```
> round(head(xv), digits = 4)
     [,1]    [,2]    [,3]    [,4]    [,5]    [,6]    [,7]    [,8]    [,9]  [,10]   [,11]   [,12]   [,13]
1 -3.2125 -0.1160 -0.9491 -1.0005 -0.1491  0.6016 -0.2317 -0.1843 -1.1462 1.2367 -0.0798  0.3718 -0.2497
2 -1.9628 -0.6111 -1.2270 -0.4652 -0.6344  0.0433  0.4074 -0.2832  0.3274 0.5174  0.1874 -0.0152 -0.2738
3 -2.9835  0.7931 -1.0865  0.0342 -1.0445 -0.3756  0.0398 -0.4871  0.1210 0.3143  0.1144  0.1485 -0.0939
4 -3.5896  0.4982 -0.4317  0.4026 -1.0863 -0.4097  0.2406  0.7798 -0.5793 0.4407  0.2567  0.1180 -0.1727
5 -3.3252  0.5725 -0.4849  0.3214 -1.0216 -0.1905  0.5156  0.9371 -0.2835 0.1764  0.0995  0.3595  0.1826
6 -3.0851 -0.2948 -0.5435  0.1239 -0.8193 -0.3126  0.2121  1.0052 -0.3861 0.5148  0.2363  0.1571 -0.2552
```

```
# correlations of the first 3 PC's with the origi
corr = cor(x, xv)[, 1:3]
colnames(corr) = c('PC1', 'PC2', 'PC3')
round(corr, digits = 4)
```

```
> round(corr, digits = 4)
            PC1     PC2     PC3
crim     0.9076  0.2247  0.1457
zn      -0.6399 -0.0292  0.5058
indus    0.8580  0.0409 -0.1845
nox      0.8737  0.2391 -0.1780
rm      -0.5104  0.7037  0.0869
age      0.7999  0.1556 -0.2949
dis     -0.8259 -0.2904  0.2982
rad      0.7531  0.2857  0.3804
tax      0.8114  0.1645  0.3672
ptratio  0.5674 -0.2667  0.1498
black   -0.4906 -0.1041 -0.5170
lstat    0.7996 -0.4253 -0.0251
medv    -0.7366  0.5160 -0.1747
```

```
# proportions of variables explained by first 3
cumr2 = apply(corr^2, 1, sum)
round(as.matrix(cumr2), digits = 4)
```

```
> round(as.matrix(cumr2), digits = 4)
         [,1]
crim   0.8955
zn     0.6661
indus  0.7719
nox    0.8521
rm     0.7632
age    0.7510
dis    0.8554
rad    0.7935
tax    0.8203
ptratio 0.4155
black  0.5188
lstat  0.8209
medv   0.8394
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

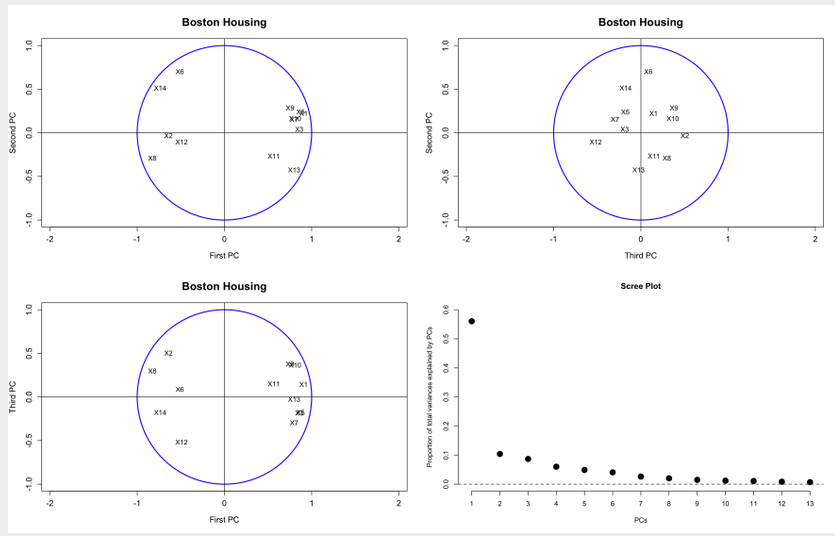
```
x1 = as.matrix(x - matrix(mean(as.matrix(x)), nrow(x), ncol(x), byrow = T))
# projections of individuals into PCs
r1 = x1 %*% v
# correlation matrix of PCs and original variables
r = cor(cbind(r1, x))
round(r, digits = 2)
```

```
> round(r, digits = 2)
           1     2     3     4     5     6     7     8     9    10    11    12    13  crim    zn indus   nox    rm   age   dis   rad   tax ptratio black lstat  medv
1       1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.91 -0.64  0.86  0.87 -0.51  0.80 -0.83  0.75  0.81    0.57 -0.49  0.80 -0.74
2       0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.22 -0.03  0.04  0.24  0.70  0.16 -0.29  0.29  0.16   -0.27 -0.10 -0.43  0.52
3       0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.15  0.51 -0.18 -0.18  0.09 -0.29  0.30  0.38  0.37    0.15 -0.52 -0.03 -0.17
4       0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.04 -0.09  0.07 -0.12  0.08 -0.10  0.11  0.20  0.17    0.60  0.50 -0.19  0.10
5       0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.09  0.35 -0.04  0.08 -0.23  0.02 -0.04  0.20  0.21   -0.37  0.46  0.08  0.01
6       0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00 -0.06  0.38 -0.18  0.09  0.23  0.38 -0.11 -0.21 -0.03    0.23  0.06  0.13 -0.11
7       0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.05 -0.19 -0.10 -0.08  0.31  0.02  0.17  0.13 -0.04   -0.14  0.13  0.21 -0.25
8       0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.10 -0.10 -0.37 -0.03 -0.15  0.12 -0.02  0.17 -0.13    0.05 -0.03  0.03  0.14
9       0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.01  0.04  0.18 -0.23 -0.02  0.22  0.13  0.06 -0.02   -0.02 -0.04  0.09  0.16
10      0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.00 -0.08 -0.11 -0.10 -0.06 -0.04  0.14  0.05 -0.09  0.25   -0.05 -0.01 -0.14 -0.06
11      0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00  0.00  0.12  0.03  0.04  0.15 -0.04  0.09  0.21  0.00 -0.11   -0.01  0.01 -0.16 -0.07
12      0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.00 -0.08 -0.03 -0.02  0.17  0.01 -0.02  0.15 -0.03  0.09    0.02 -0.01  0.14  0.14
13      0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  0.00  1.00  0.22 -0.01 -0.02 -0.05  0.01 -0.05  0.01 -0.17  0.05    0.00  0.01  0.04  0.05
crim    0.91  0.22  0.15  0.04  0.09 -0.06  0.05  0.10  0.01 -0.08  0.12 -0.08  0.22  1.00 -0.52  0.74  0.81 -0.32  0.70 -0.74  0.84  0.81    0.45 -0.48  0.62 -0.57
zn     -0.64 -0.03  0.51 -0.09  0.35  0.38 -0.19 -0.10  0.04 -0.11  0.03 -0.03 -0.01 -0.52  1.00 -0.66 -0.57  0.31 -0.53  0.59 -0.35 -0.31   -0.35  0.18 -0.45  0.36
indus   0.86  0.04 -0.18  0.07 -0.04 -0.18 -0.10 -0.37  0.18 -0.10  0.04 -0.02 -0.02  0.74 -0.66  1.00  0.75 -0.43  0.66 -0.73  0.58  0.66    0.45 -0.33  0.62 -0.55
nox     0.87  0.24 -0.18 -0.12  0.08  0.09 -0.08 -0.03 -0.23 -0.06  0.15  0.17 -0.05  0.81 -0.57  0.75  1.00 -0.32  0.78 -0.86  0.61  0.67    0.34 -0.38  0.61 -0.52
rm     -0.51  0.70  0.09  0.08 -0.23  0.23  0.31 -0.15 -0.02 -0.04 -0.04  0.01  0.01 -0.32  0.31 -0.43 -0.32  1.00 -0.28  0.28 -0.21 -0.31   -0.32  0.13 -0.64  0.61
age     0.80  0.16 -0.29 -0.10  0.02  0.38  0.02  0.12  0.22  0.14  0.09 -0.02 -0.05  0.70 -0.53  0.66  0.78 -0.28  1.00 -0.80  0.47  0.54    0.38 -0.29  0.64 -0.48
dis    -0.83 -0.29  0.30  0.11 -0.04 -0.11  0.17 -0.02  0.13  0.05  0.21  0.15  0.01 -0.74  0.59 -0.73 -0.86  0.28 -0.80  1.00 -0.54 -0.60   -0.32  0.32 -0.56  0.41
rad     0.75  0.29  0.38  0.20  0.20 -0.21  0.13  0.17  0.06 -0.09  0.00 -0.03 -0.17  0.84 -0.35  0.58  0.61 -0.21  0.47 -0.54  1.00  0.82    0.40 -0.41  0.46 -0.43
tax     0.81  0.16  0.37  0.17  0.21 -0.03 -0.04 -0.13 -0.02  0.25 -0.11  0.09  0.05  0.81 -0.31  0.66  0.67 -0.31  0.54 -0.60  0.82  1.00    0.48 -0.43  0.53 -0.56
ptratio 0.57 -0.27  0.15  0.60 -0.37  0.23 -0.14  0.05 -0.02 -0.05 -0.01  0.02  0.00  0.45 -0.35  0.45  0.34 -0.32  0.38 -0.32  0.40  0.48    1.00 -0.20  0.43 -0.51
black  -0.49 -0.10 -0.52  0.50  0.46  0.06  0.13 -0.03 -0.04 -0.01  0.01 -0.01  0.01 -0.48  0.18 -0.33 -0.38  0.13 -0.29  0.32 -0.41 -0.43   -0.20  1.00 -0.36  0.40
lstat   0.80 -0.43 -0.03 -0.19  0.08  0.13  0.21  0.03  0.09 -0.14 -0.16  0.14  0.04  0.62 -0.45  0.62  0.61 -0.64  0.64 -0.56  0.46  0.53    0.43 -0.36  1.00 -0.83
medv   -0.74  0.52 -0.17  0.10  0.01 -0.11 -0.25  0.14  0.16 -0.06 -0.07  0.14  0.05 -0.57  0.36 -0.55 -0.52  0.61 -0.48  0.41 -0.43 -0.56   -0.51  0.40 -0.83  1.00
```

# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

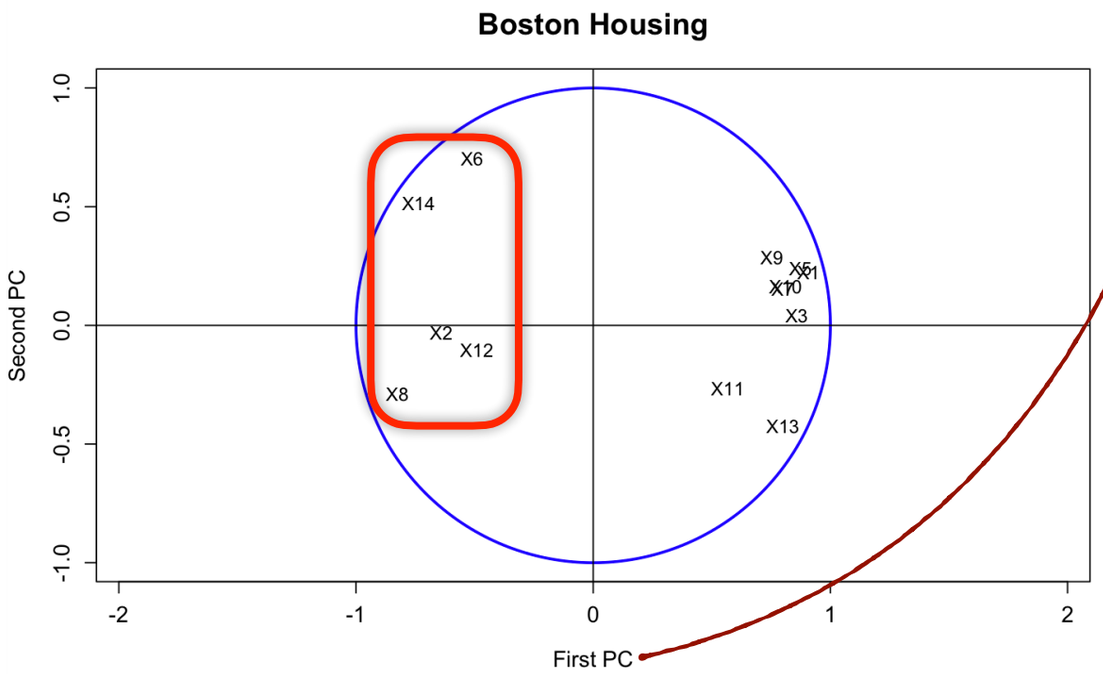
```
graphics.off()
par(mfrow = c(2, 2))
ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlab = "First PC", ylab = "Second PC",
    main = "Boston Housing", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.6, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("X1", "X2", "X3", "X5", "X6", "X7", "X8", "X9", "X10", "X11", "X12", "X13", "X14")
text(corr[, 1], corr[, 2], label)

ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlab = "Third PC", ylab = "Second PC",
    main = "Boston Housing", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.6, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("X1", "X2", "X3", "X5", "X6", "X7", "X8", "X9", "X10", "X11", "X12", "X13", "X14")
text(corr[, 3], corr[, 2], label)

ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlab = "First PC", ylab = "Third PC",
    main = "Boston Housing", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.6, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("X1", "X2", "X3", "X5", "X6", "X7", "X8", "X9", "X10", "X11", "X12", "X13", "X14")
text(corr[, 1], corr[, 3], label)

plot(perc, xlab = 'PCs', ylab = 'Proportion of total variances explained by PCs', main = 'Scree Plot', pch = 16,
    cex = 2, axes = FALSE, ylim = c(0, 0.6))
axis(1, at = 1:13)
axis(2, at = c(0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6))
abline(h=0, lty=2)
```

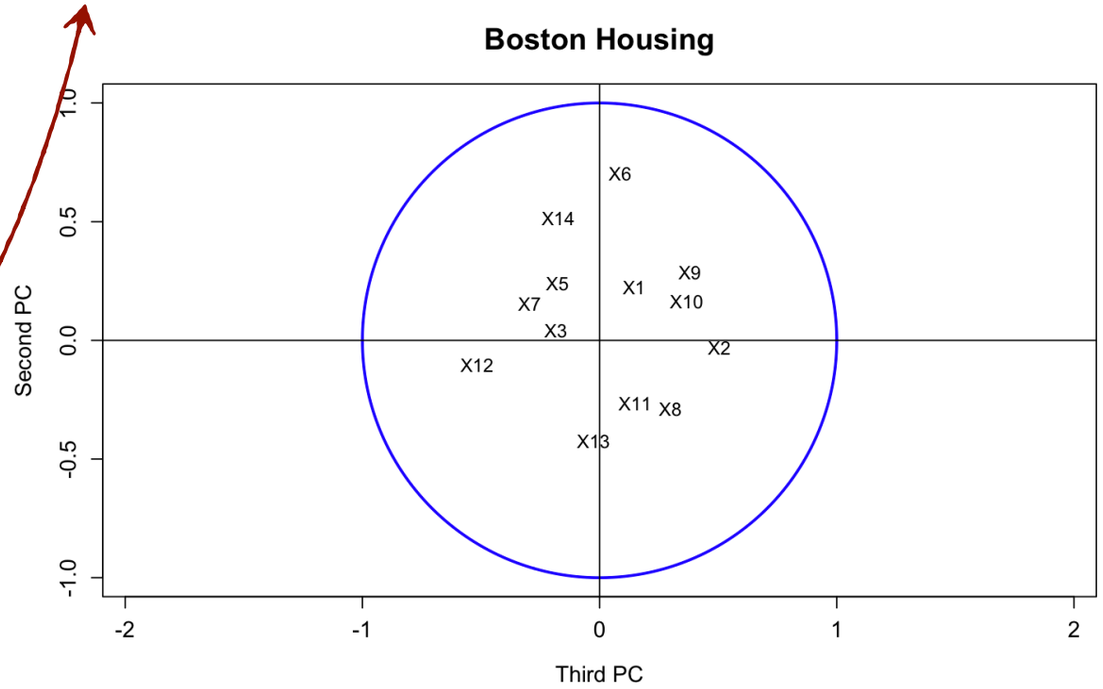


# Boston Housing

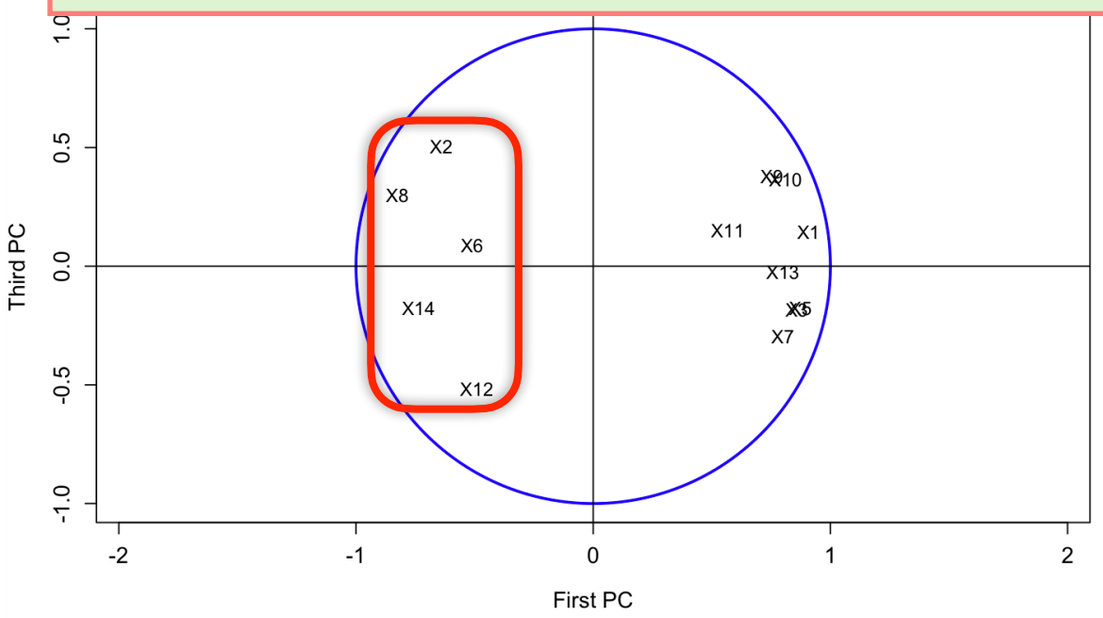
- 波士顿住房数据集的 NPCA.

生活质量与住房指标.



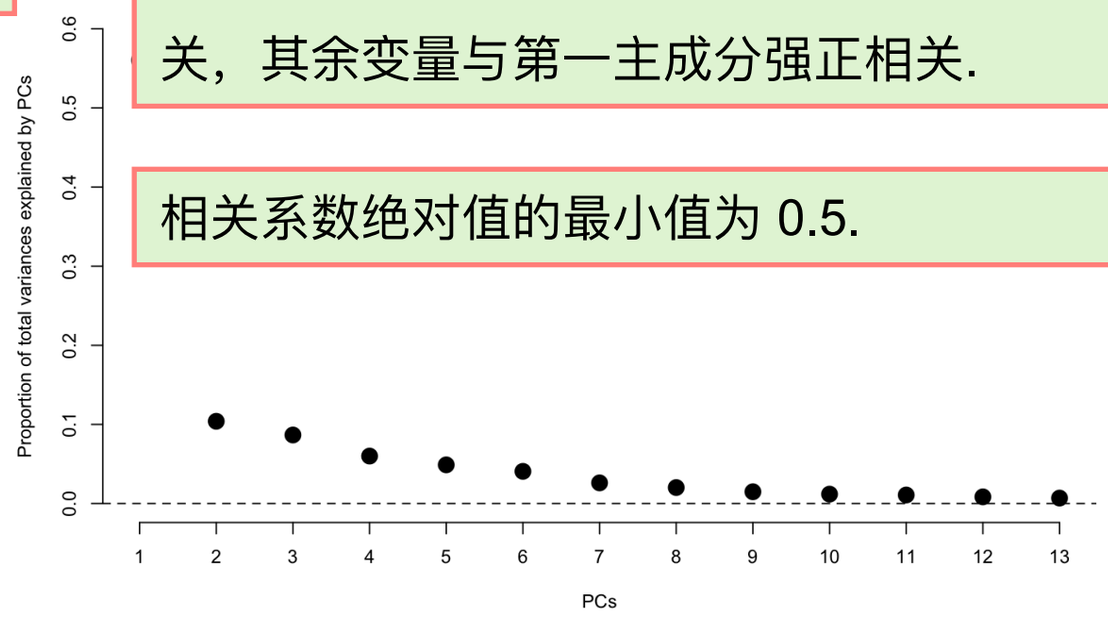




与第一主成分的相关性呈现出非常清晰的模式.




变量 $X_2$, $X_6$, $X_8$, $X_{12}$, $X_{14}$ 与第一主成分强负相关，其余变量与第一主成分强正相关.

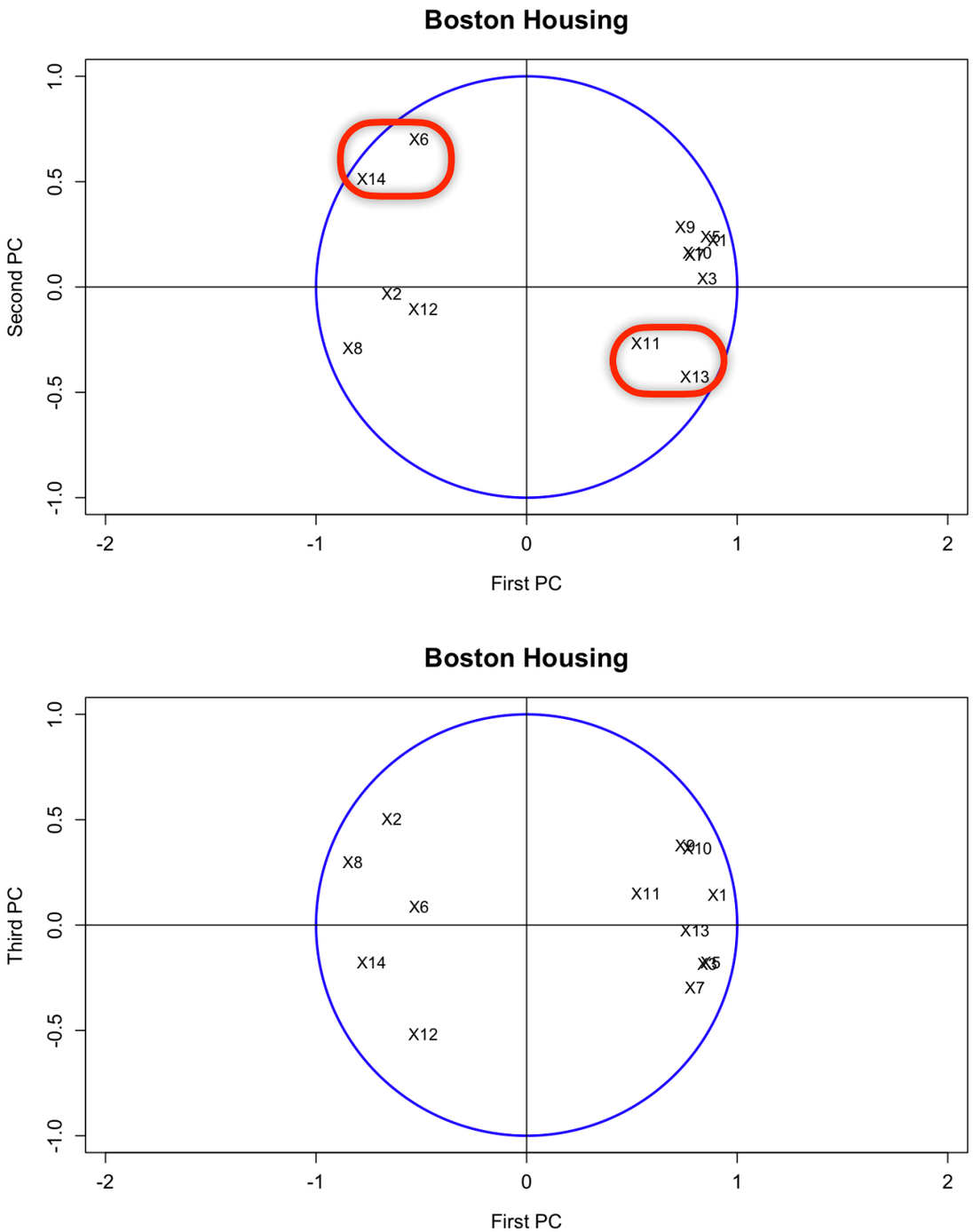
相关系数绝对值的最小值为 0.5.

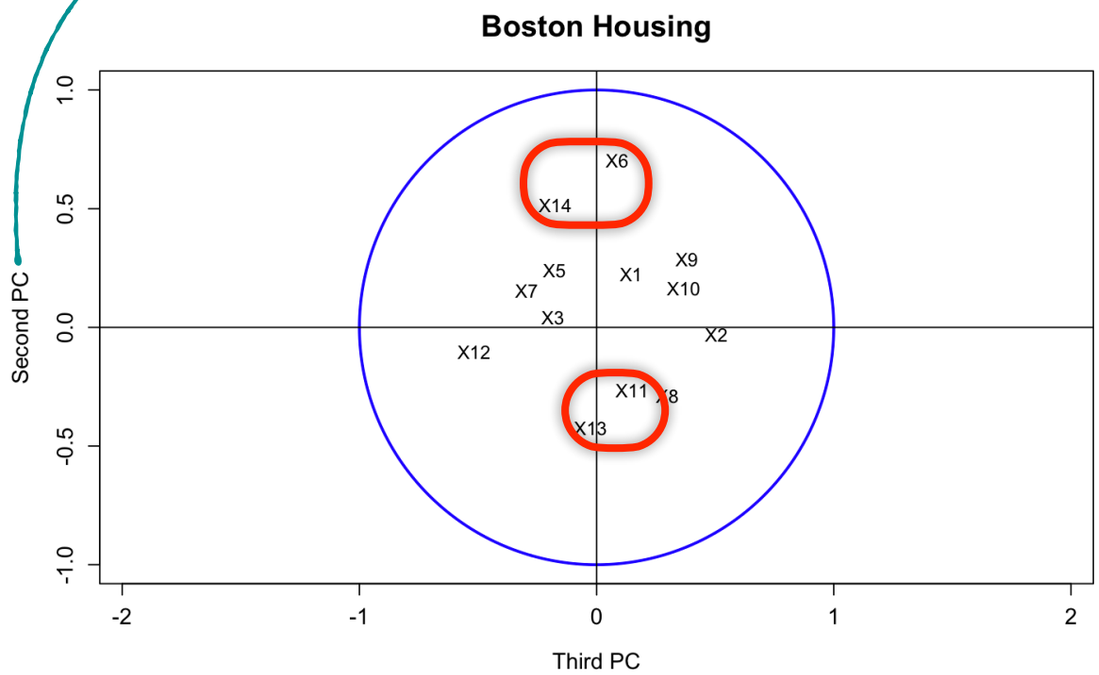


# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.

*A social factor.*



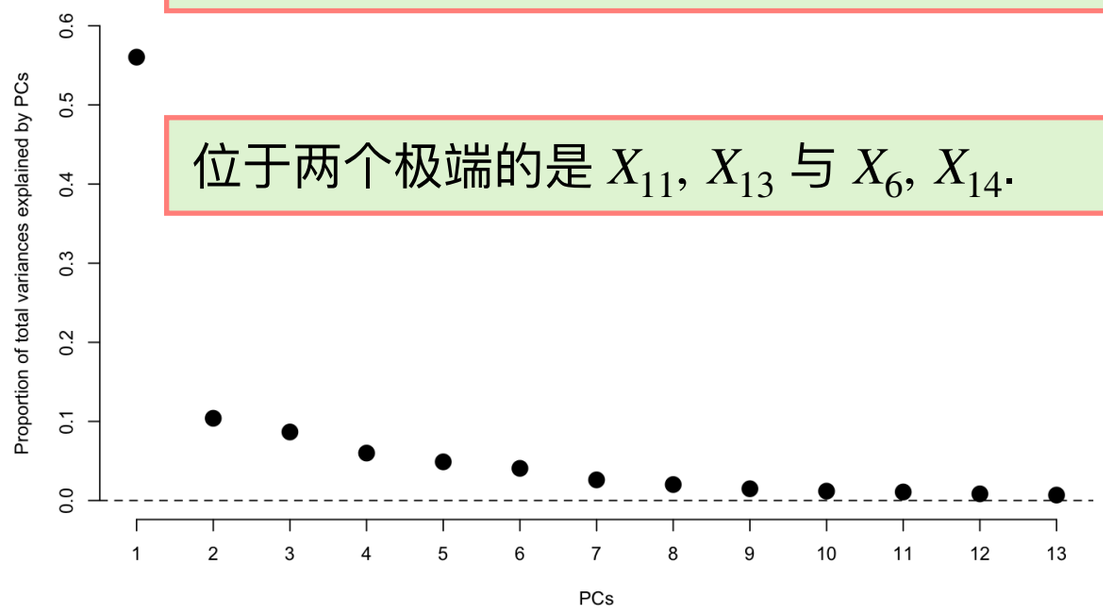







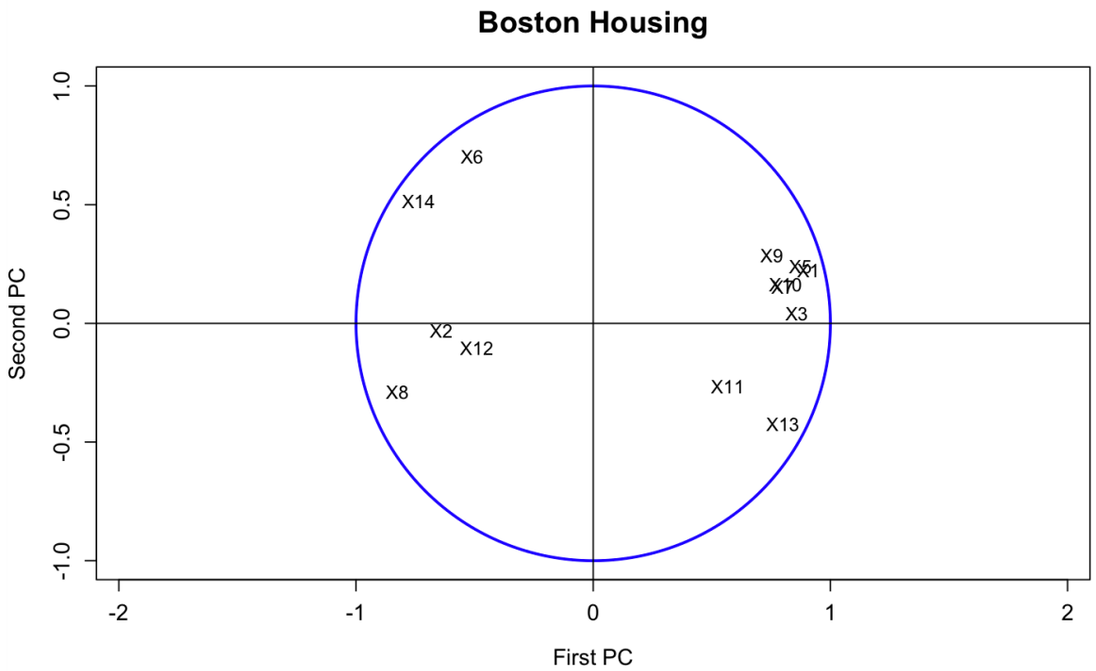
第二主成分仅解释了总方差的 10%.

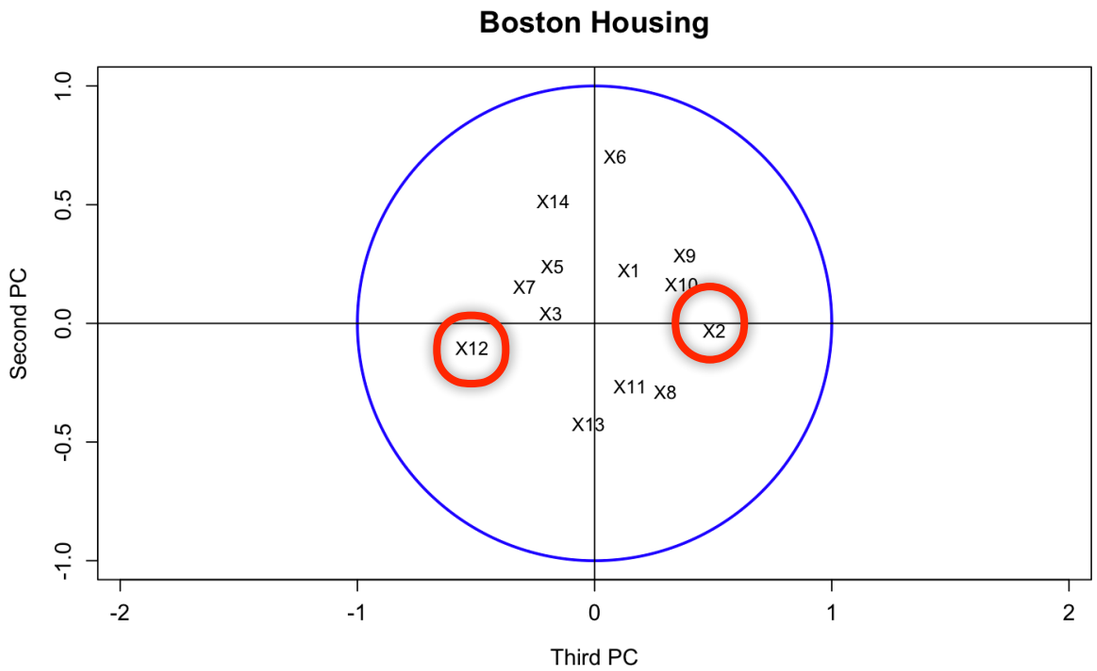
位于两个极端的是 $X_{11}$, $X_{13}$ 与 $X_6$, $X_{14}$.

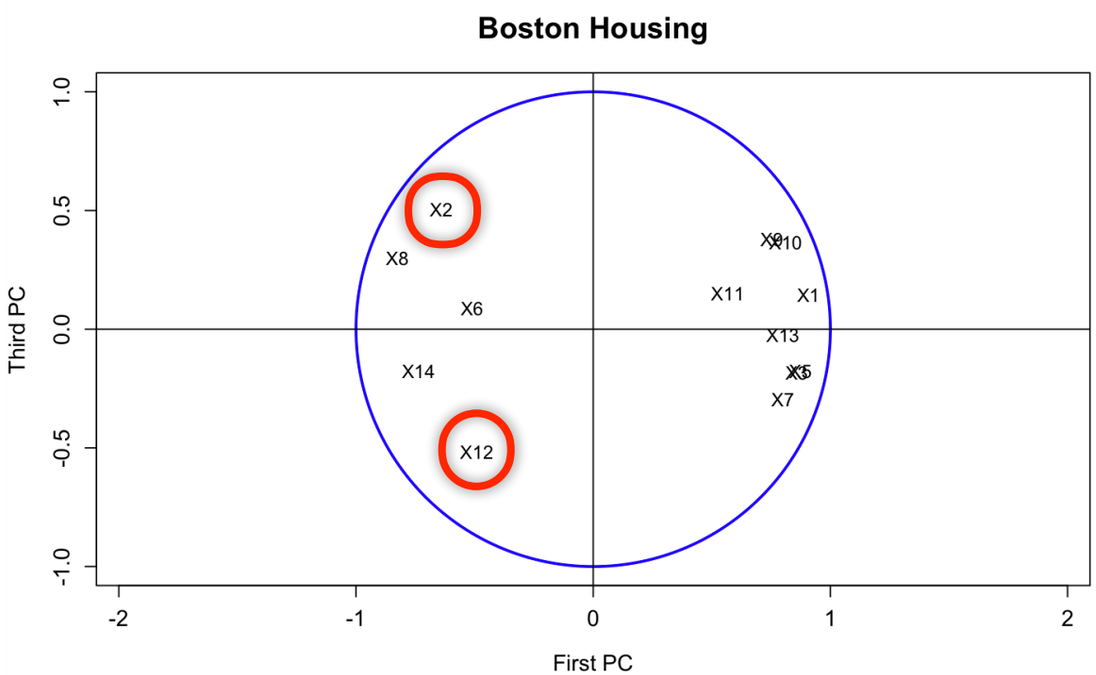


# Boston Housing

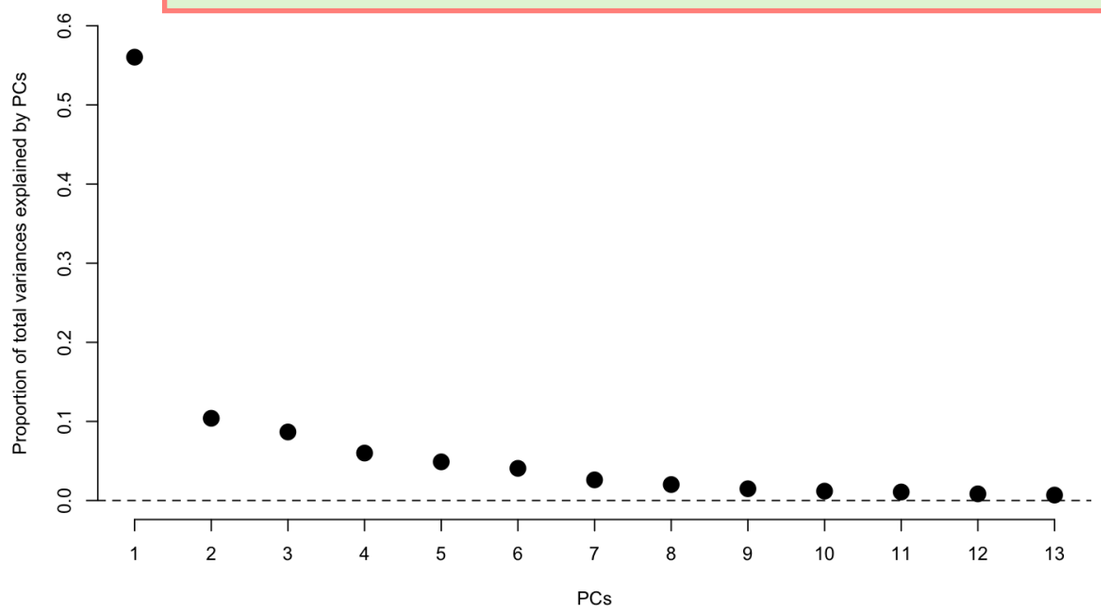
- 波士顿住房数据集的 NPCA.



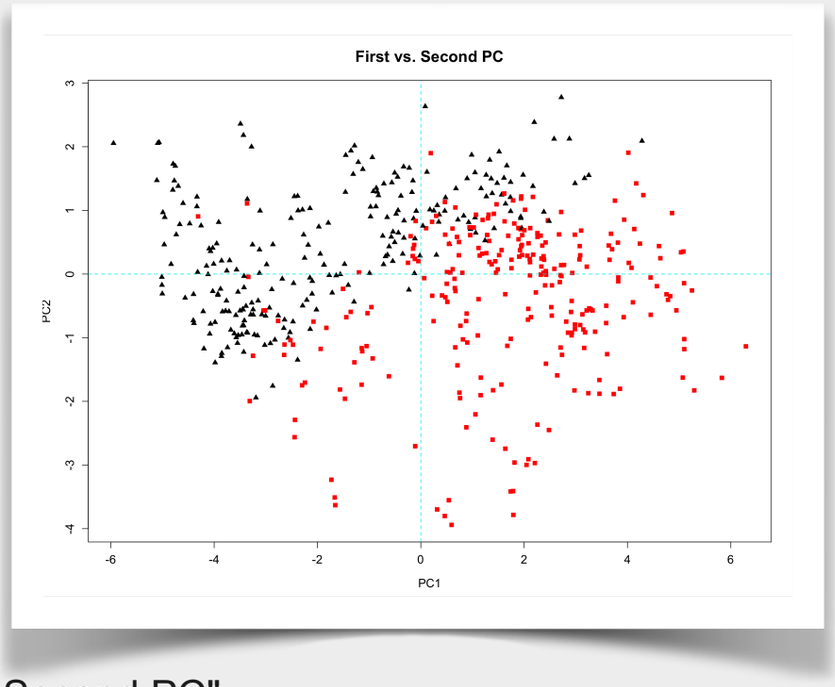

第三主成分主要由 $X_2$ 和 $X_{12}$ 之间的差异主导.



# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.
  - 观测数据投影到前两个主成分上的图形.

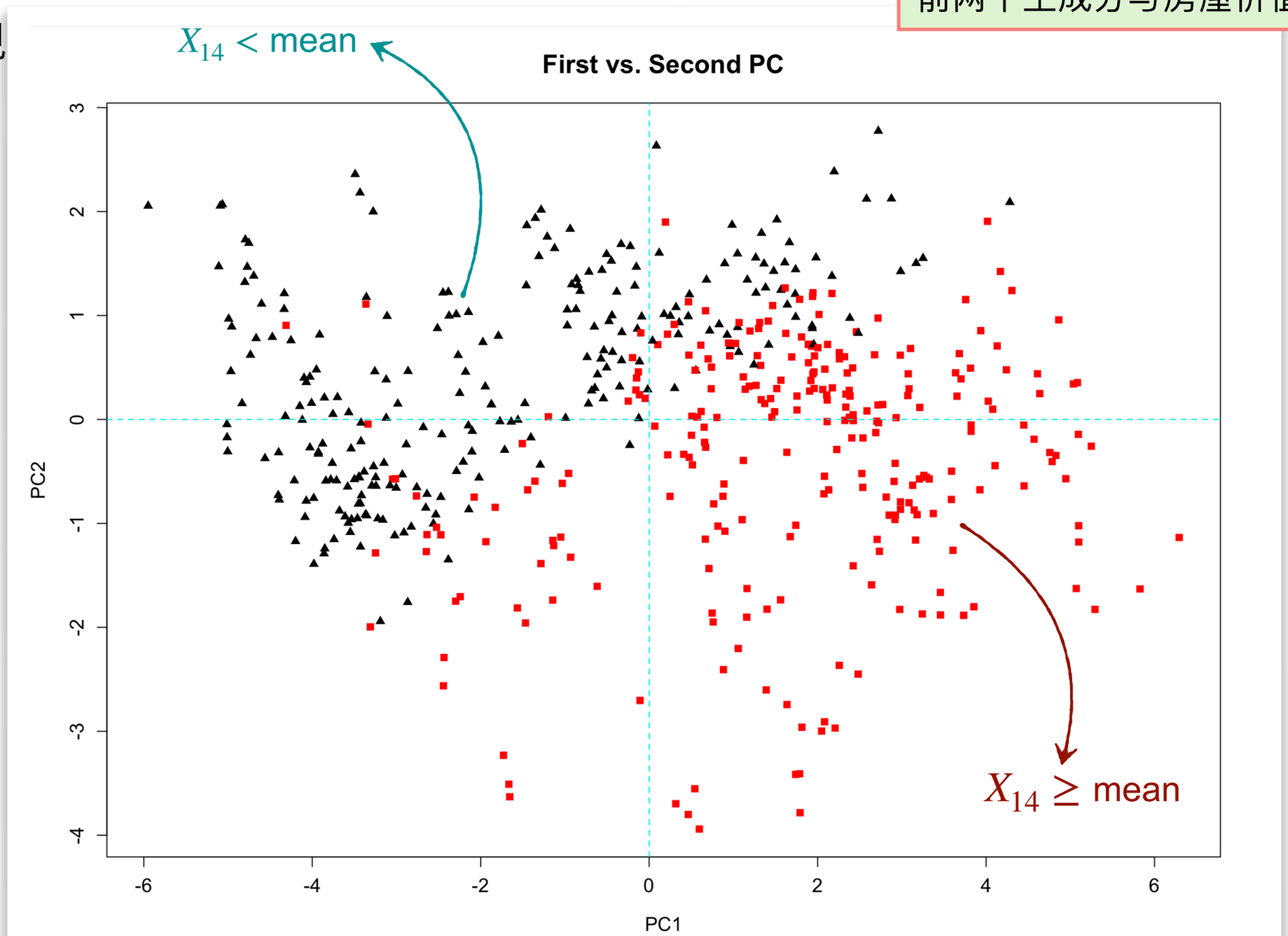
```
# price x[, 13] greater or less than average, 15 is >= average, 17 is < average, stored in h1
h = x[, 13]
h[h >= mean(h)] = 15
h1   = h
h1[h1 < mean(x[, 13])] = 17

hr = h1
# mark more expensive houses with red square
hr[hr == 15] = "red"
# mark cheaper houses with black triangle
hr[hr == 17] = "black"
# correction for signs of eigenvectors
xv = xv * (-1)

plot(xv[, 1], xv[, 2], pch = h1, col = hr, xlab = "PC1", ylab = "PC2", main = "First vs. Second PC",
    cex.axis = 1.2, cex.lab = 1.2, cex.main = 1.6)
```



# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.
  - 观

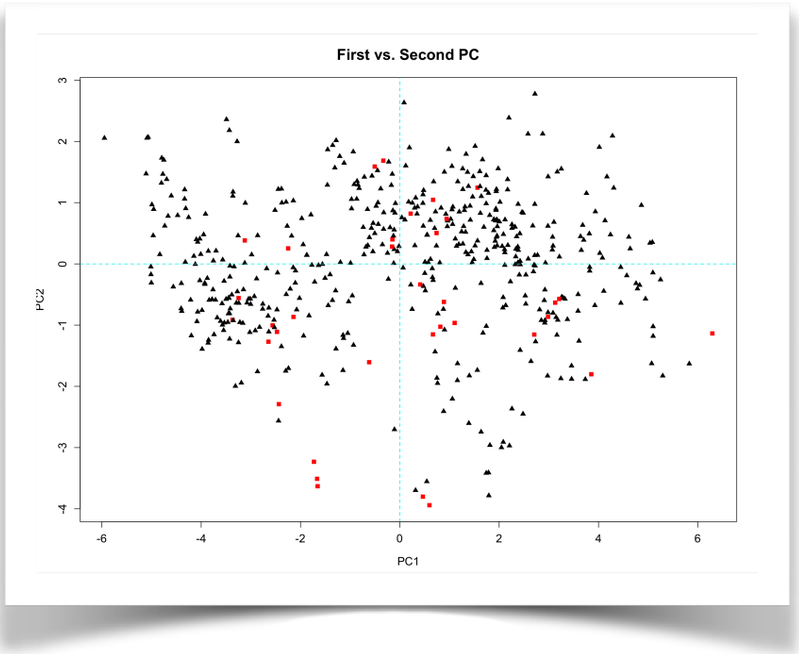
前两个主成分与房屋价值相关.



# Boston Housing

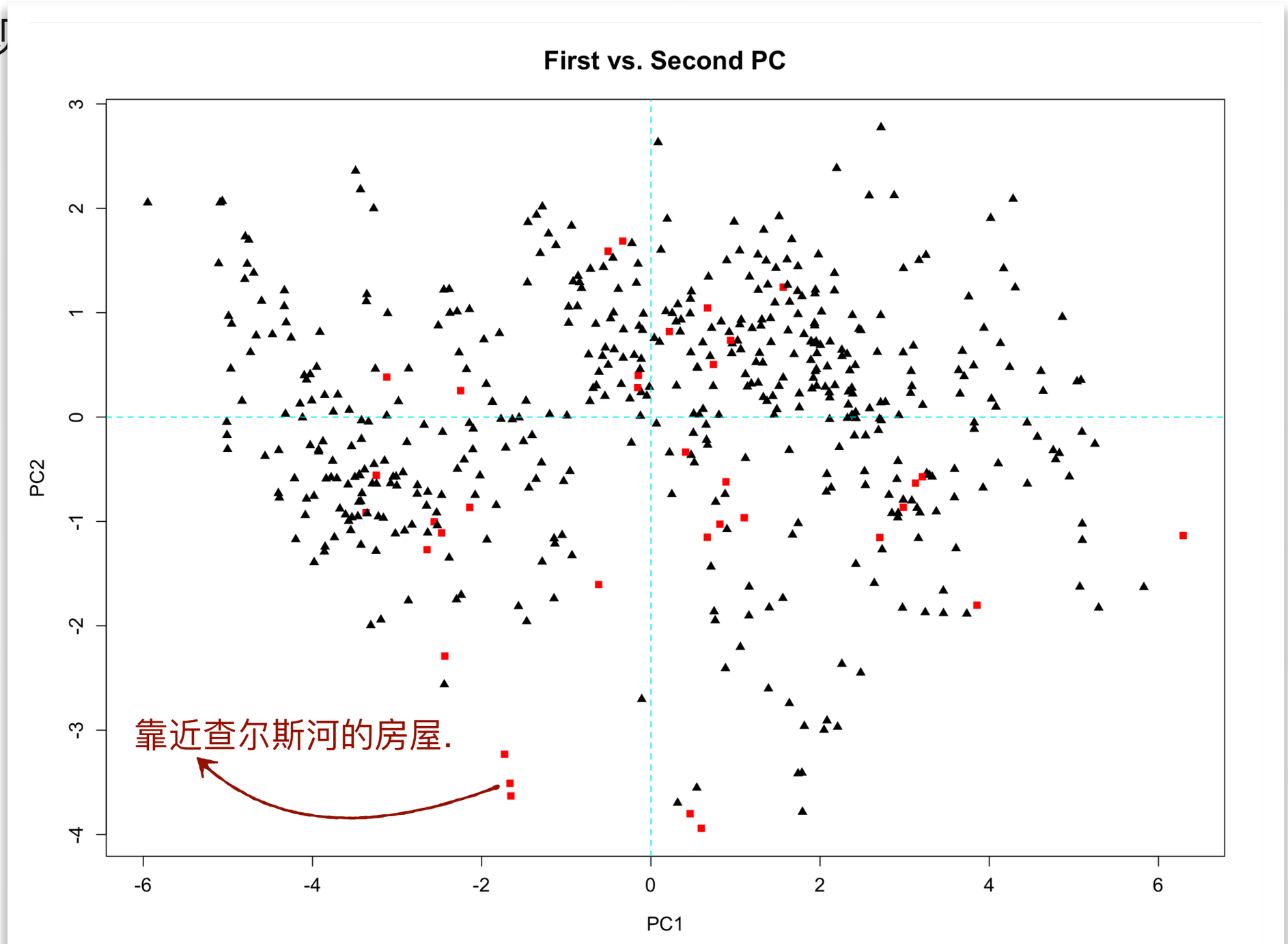
- 波士顿住房数据集的 NPCA.
  - 观测数据投影到前两个主成分上的图形.

```
# houses close to the Charles River are indicated with red squares
col = xt[, 4]
col[col == 1] = "red"
col[col == 0] = "black"

h2 = xt[, 4]
h2[h2 == 1] = 15
h2[h2 == 0] = 17
graphics.off()
plot(xv[, 1], xv[, 2], pch = h2, col = col, xlab = "PC1", ylab = "PC2", main = "First vs. Second PC",
    cex.axis = 1.2, cex.lab = 1.2, cex.main = 1.6)
abline(h=0, v=0, lty=2, col = ‘cyan2')
```



# Boston Housing

- 波士顿住房数据集的 NPCA.
  - 对



# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.

```
rm(list = ls(all = TRUE)) # clear all variables
graphics.off()
setwd("~/Desktop/2025_Multivariate Statistical Analysis/R_Code/Data")
library(readr)
x = read_table("uscomp2.txt", col_name = FALSE)
colnames(x) = c("Company", "A", "S", "MV", "P", "CF", "E", "Sector")
attach(x)
Sector = as.character(Sector)
Sector[1:2]   = "H"
Sector[3:17]  = "E"
Sector[18:34] = "F"
Sector[35:42] = "H"
Sector[43:52] = "M"
Sector[53:63] = "*"
Sector[64:73] = "R"
Sector[74:79] = "*"
detach(x)
head(x)
```

assets $(X_1)$ market value $(X_3)$ cash flow $(X_5)$

```
> head(x)
# A tibble: 6 × 8
  Company                          A     S    MV     P     CF     E Sector
  <chr>                        <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>  <dbl> <dbl> <chr>
1 BellAtlantic                 19788  9084 10636 1093.  2577.   79.4 Communication
2 ContinentalTelecom            5074  2557  1892  240.   578.   21.9 Communication
3 AmericanElectricPower        13621  4848  4572  485    899.   23.4 Energy
4 BrooklynUnionGas              1117  1038   478   59.7   91.7   3.8 Energy
5 CentralIllinoisPublicService  1633   701   679   74.3  136.    2.8 Energy
6 ClevelandElectricIlluminating 5651  1254  2002  311.   408.    6.2 Energy
```

sales $(X_2)$ profits $(X_4)$ employees $(X_6)$

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 通过减去均值并除以标准差，首先对数据进行标准化处理.

```
# standardizes the data
x = as.matrix(x[, 2:7])
n = nrow(x)  # number of rows
x = (x - matrix(apply(x, 2, mean), n, 6, byrow = T))/matrix(sqrt((n - 1) * apply(x, 2, var)/n), n, 6, byrow = T)
round(head(x), digits = 4)
```

```
> round(head(x), digits = 4)
             A       S      MV       P      CF       E
[1,]  1.5219  0.7041  0.6558  1.1151  1.8164  0.6522
[2,] -0.0952 -0.2327 -0.1227  0.0380  0.1481 -0.2449
[3,]  0.8441  0.0961  0.1159  0.3475  0.4157 -0.2215
[4,] -0.5301 -0.4507 -0.2486 -0.1896 -0.2582 -0.5273
[5,] -0.4734 -0.4991 -0.2307 -0.1712 -0.2213 -0.5429
[6,] -0.0318 -0.4197 -0.1129  0.1274  0.0058 -0.4899
```

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 计算特征值和对应的特征向量.

```
# spectral decomposition
eig = eigen((n - 1) * cov(x)/n)
e = eig$values
round(as.matrix(e), digits = 3)
v = eig$vectors
round(v, digits = 3)
```

## eigenvalues

```
> round(as.matrix(e), digits = 3)
      [,1]
[1,] 5.039
[2,] 0.517
[3,] 0.359
[4,] 0.050
[5,] 0.029
[6,] 0.007
```

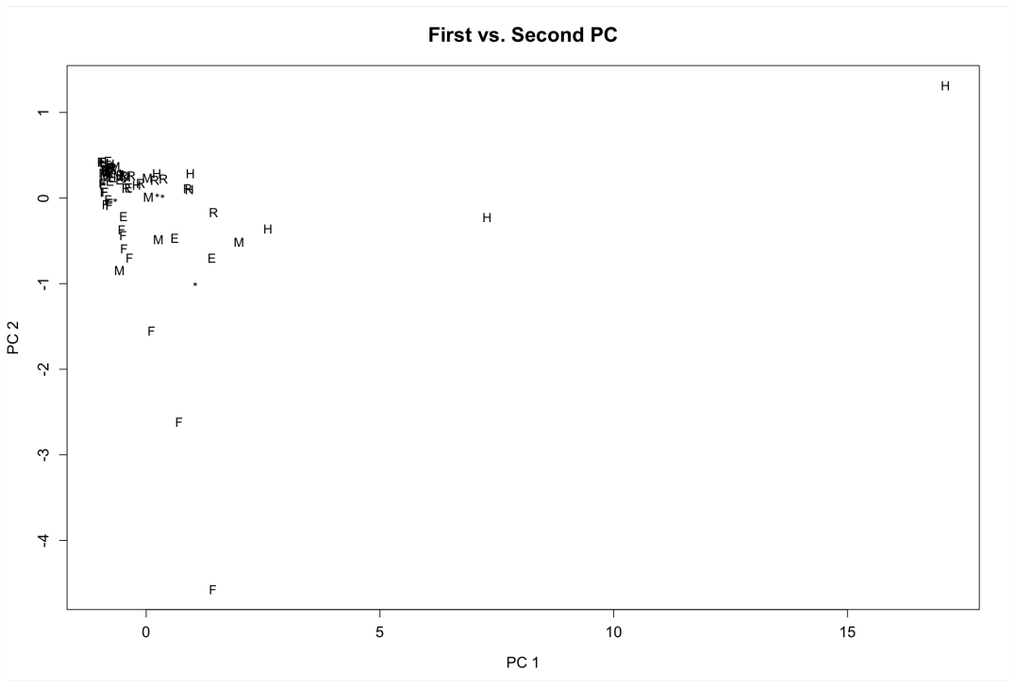
## corresponding eigenvectors

```
> round(v, digits = 3)
       [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.340  0.849 -0.339 -0.205 -0.077  0.006
[2,] -0.423  0.170  0.379  0.783  0.006  0.186
[3,] -0.434 -0.190 -0.192 -0.071  0.844 -0.149
[4,] -0.420 -0.364 -0.324 -0.156 -0.261  0.703
[5,] -0.428 -0.285 -0.267  0.121 -0.452 -0.667
[6,] -0.397 -0.010  0.726 -0.548 -0.098 -0.065
```

# 79 家美国公司

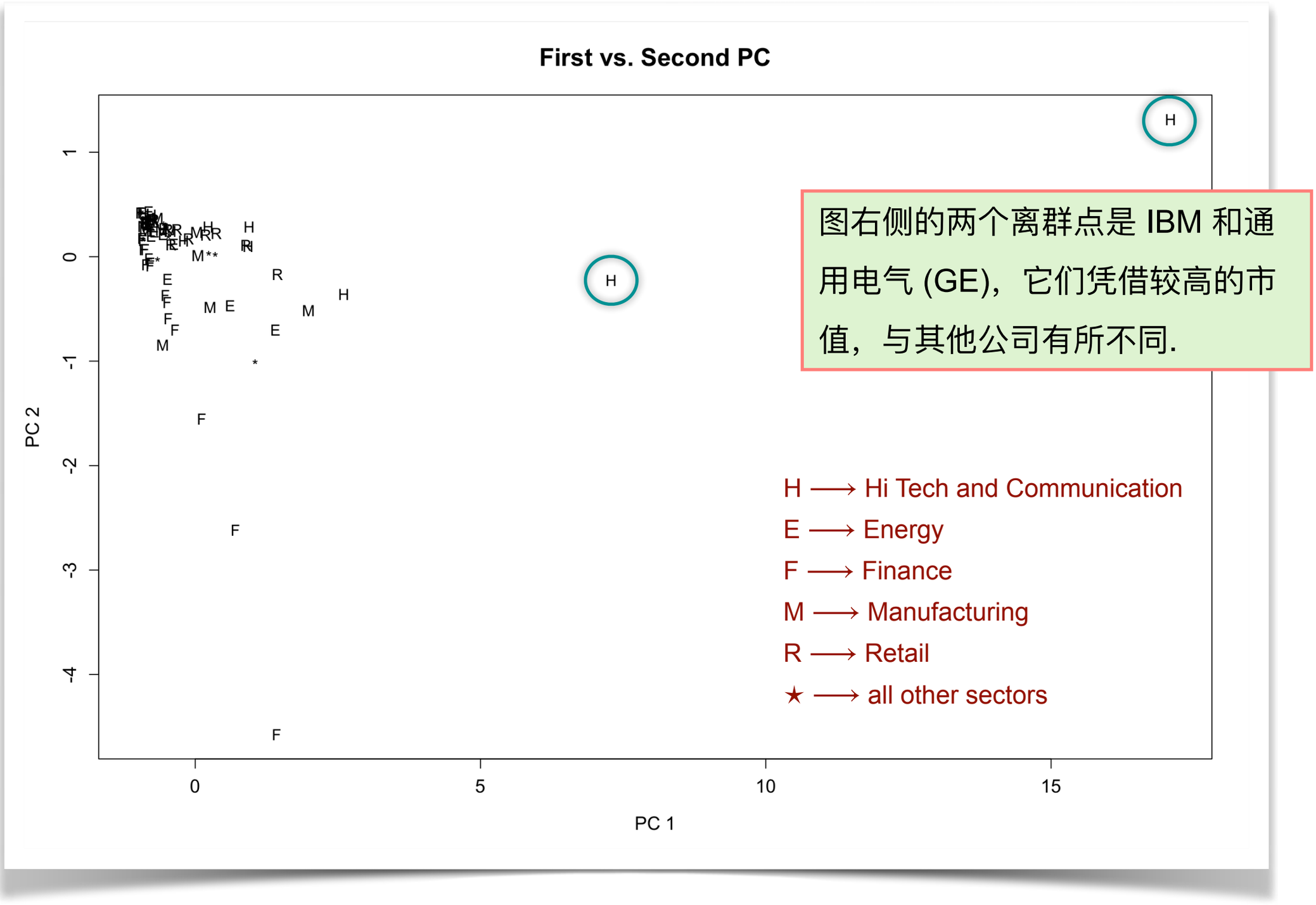
- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 前两个主成分的图形表示如下

```
# principal components
x = as.matrix(x) %*% v
graphics.off()
plot(cbind(-x[, 1], -x[, 2]), type = "n", xlab = "PC 1", ylab = "PC 2", main = "First vs. Second PC",
    cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.6)
text(cbind(-x[, 1], -x[, 2]), Sector)
```



# 79 家美国公司

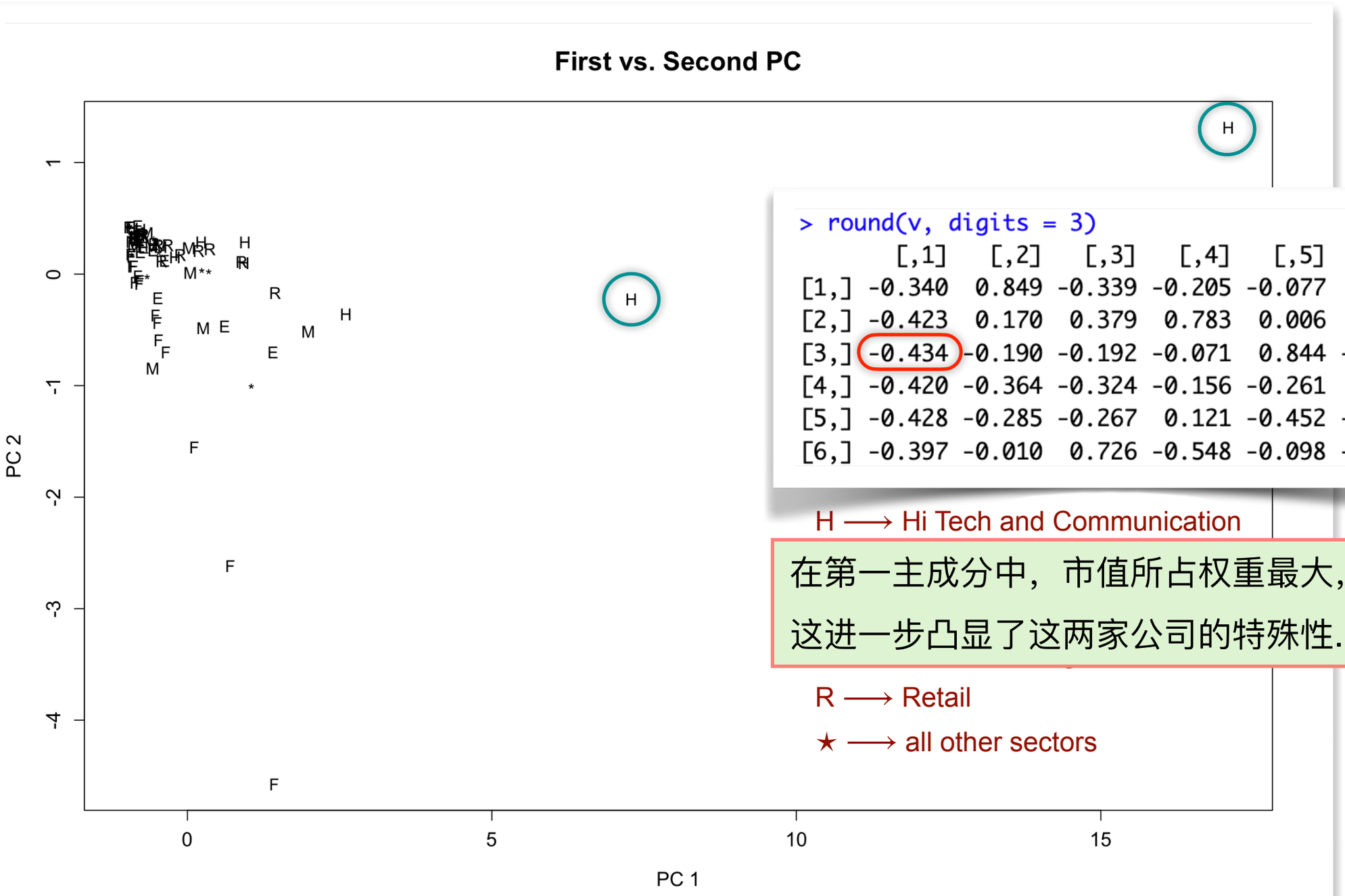
- 考虑 79 家美国公司的数据集.




图右侧的两个离群点是 IBM 和通用电气 (GE)，它们凭借较高的市值，与其他公司有所不同.

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.




```
> round(v, digits = 3)
       [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.340  0.849 -0.339 -0.205 -0.077  0.006
[2,] -0.423  0.170  0.379  0.783  0.006  0.186
[3,] -0.434 -0.190 -0.192 -0.071  0.844 -0.149
[4,] -0.420 -0.364 -0.324 -0.156 -0.261  0.703
[5,] -0.428 -0.285 -0.267  0.121 -0.452 -0.667
[6,] -0.397 -0.010  0.726 -0.548 -0.098 -0.065
```

H ⟶ Hi Tech and Communication

在第一主成分中，市值所占权重最大，这进一步凸显了这两家公司的特殊性.

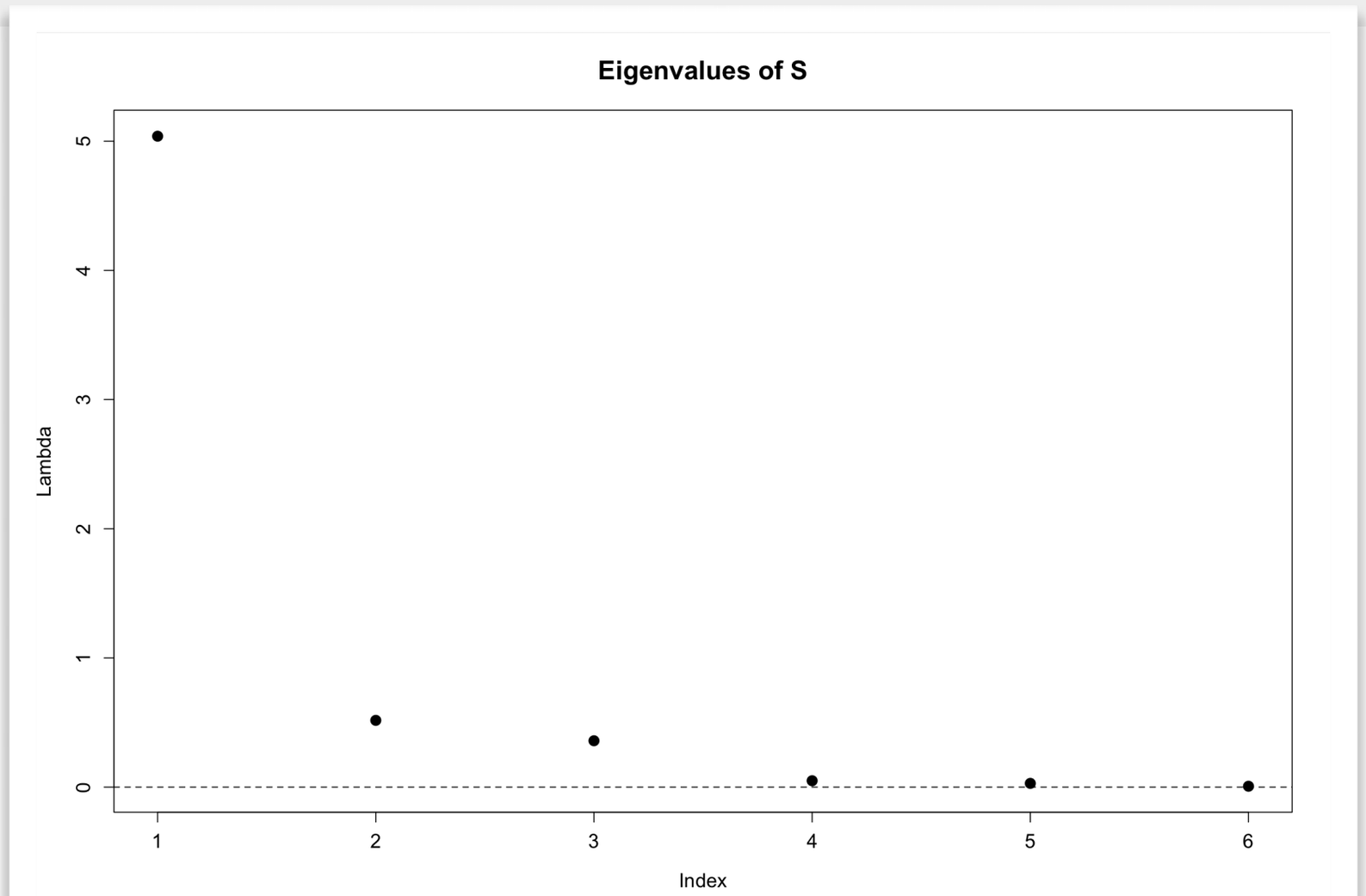
R ⟶ Retail

★ ⟶ all other sectors

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 碎石图.

```
# scree plot
plot(e, xlab = "Index", ylab = "Lambda", main = "Eigenvalues of S", cex.lab = 1.2,
                  cex.axis = 1.2, cex.main = 1.6, pch = 16, cex = 1.5)
abline(h = 0, lty = 2)
```



# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 如果将IBM和通用电气从数据集中剔除，将会呈现出截然不同的情形.

```
rm(list = ls(all = TRUE)) # clear all variables
graphics.off()
setwd("~/Desktop/2023_Applied Multivariate Statistical Analysis/R Codes with data/Data")
library(readr)
x = read_table("uscomp2.txt", col_name = FALSE)
x = rbind(x[1:37, ], x[39, ], x[41:79, ])
colnames(x) = c("Company", "A", "S", "MV", "P", "CF", "E", "Sector")
attach(x)
Sector = as.character(Sector)
Sector[1:2]   = "H"
Sector[3:17]  = "E"
Sector[18:34] = "F"
Sector[35:40] = "H"
Sector[41:50] = "M"
Sector[51:61] = "*"
Sector[62:71] = "R"
Sector[72:77] = "*"
detach(x)
```

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 此时的特征值和对应的特征向量为

```
x = x[, 2:7]
n = nrow(x)
# standardizes the data
x = (x - matrix(apply(x, 2, mean), n, 6, byrow = T))/matrix(sqrt((n - 1) * apply(x, 2, var)/n), n, 6, byrow = T)
# spectral decomposition
eig = eigen((n - 1) * cov(x)/n)
e = eig$values
round(as.matrix(e), digits = 3)
v = eig$vectors
round(v, digits = 3)
```

## eigenvalues

```
> round(as.matrix(e), digits = 3)
      [,1]
[1,] 3.191
[2,] 1.535
[3,] 0.791
[4,] 0.292
[5,] 0.149
[6,] 0.041
```

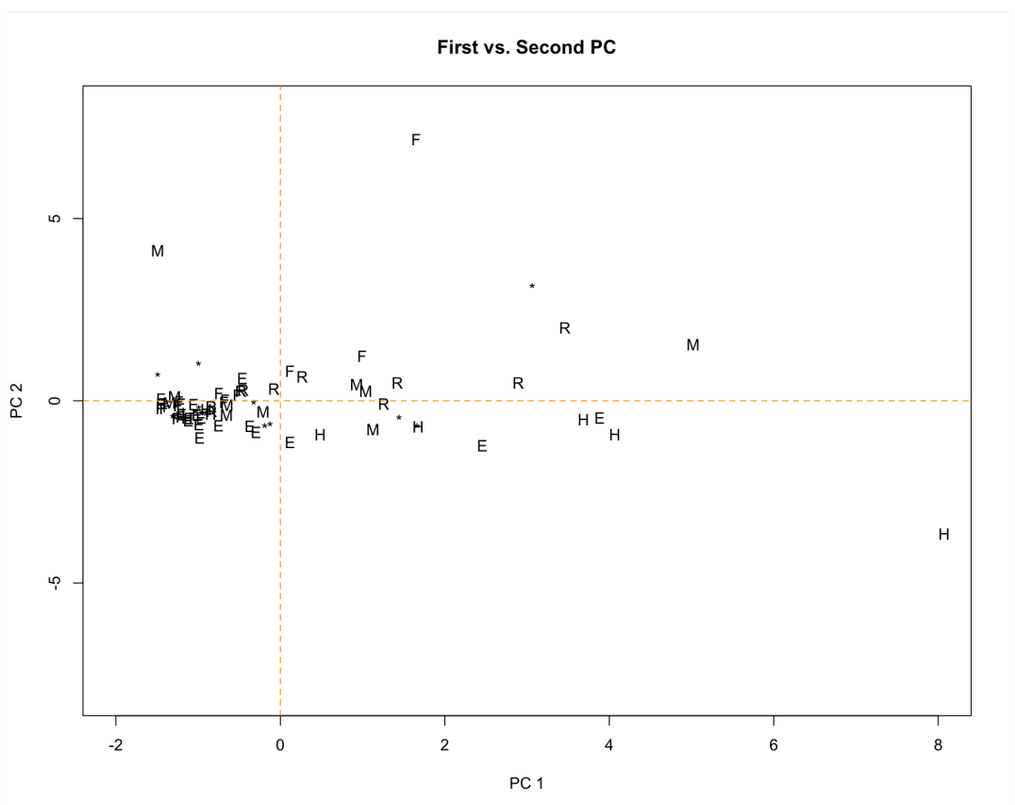
## corresponding eigenvectors

```
> round(v, digits = 3)
       [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
[1,] -0.263  0.408  0.800  0.067 -0.333 -0.099
[2,] -0.438  0.407 -0.162  0.509  0.441  0.403
[3,] -0.500  0.003  0.035 -0.801  0.264  0.190
[4,] -0.331 -0.623  0.080  0.192 -0.426  0.526
[5,] -0.443 -0.450  0.123  0.238  0.335 -0.646
[6,] -0.427  0.277 -0.558 -0.021 -0.575 -0.313
```

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 美国公司数据 (不含 IBM 和通用电气) 的主成分.

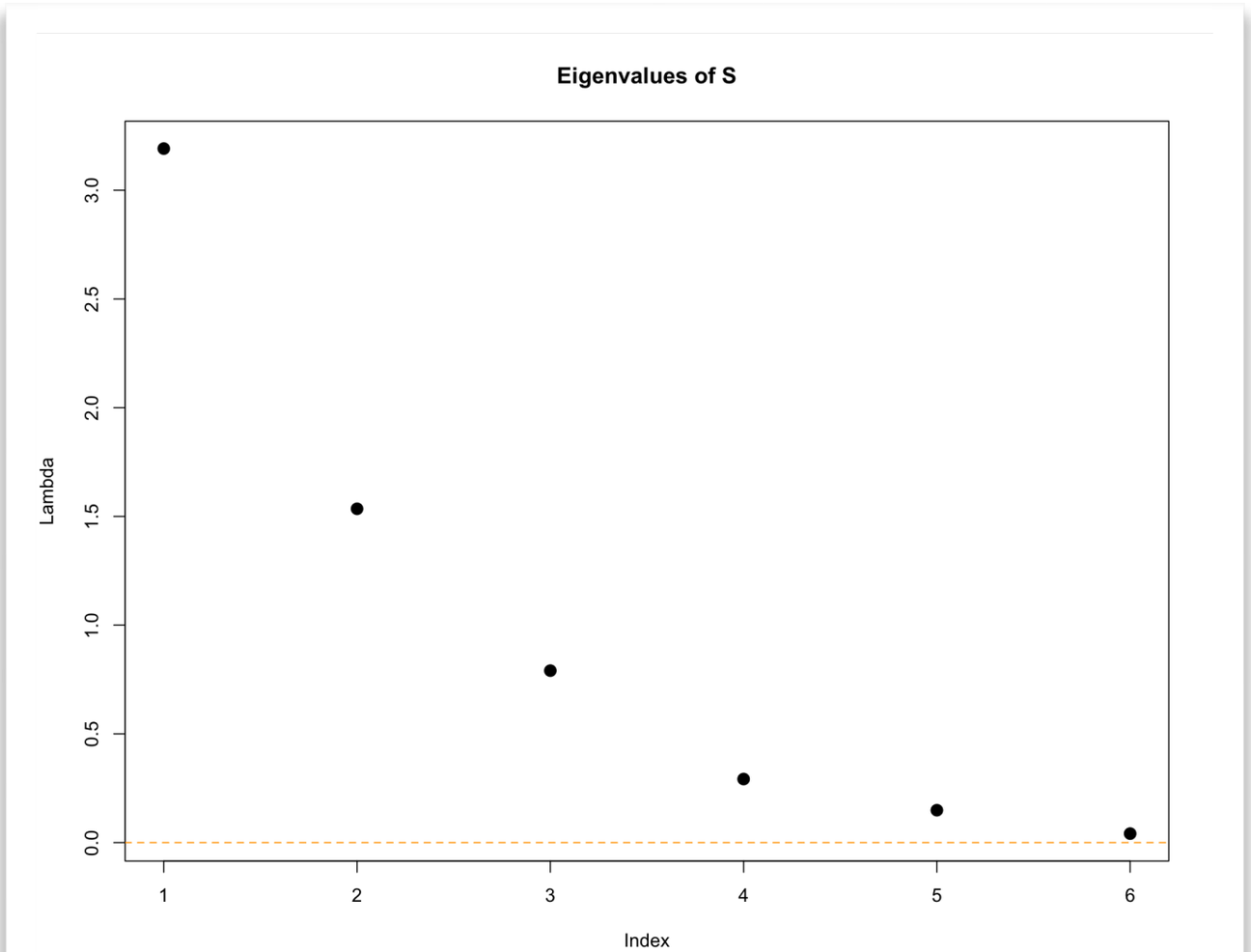
```
x = as.matrix(x) %*% v # principal components
plot(-x[, 1], x[, 2], xlim = c(-2, 8), ylim = c(-8, 8), type = "n", xlab = "PC 1", ylab = "PC 2", main = "First vs. Second PC")
text(-x[, 1], x[, 2], Sector)
abline(h = 0, v = 0, lty = 2, col = 'orange')
```



# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 碎石图.

```
# scree plot
plot(e, xlab = "Index", ylab = "Lambda", main = "Eigenvalues of S", pch = 16, cex = 1.5)
abline(h = 0, lty = 2, col = 'orange')
```



# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 特征值与解释方差的比例.

```
rm(list = ls(all = TRUE)) # clear all variables
graphics.off()
setwd("~/Desktop/2023_Applied Multivariate Statistical Analysis/R Codes with da
library(readr)
x = read_table("uscomp2.txt", col_name = FALSE)
x = rbind(x[1:37, ], x[39, ], x[41:79, ])
x  = x[, 2:7]
n = nrow(x)
x = scale(x) # standardizes the data matrix
e = eigen((n - 1) * cov(x)/n) # calculates eigenvalues and eigenvectors
e1 = e$values
evprop = data.frame(eigenvalues = e1, proportion = e1/sum(e1), cumprop = cumsum(e1)/sum(e1))
round(evprop, digits = 3)
```

```
> round(evprop, digits = 3)
  eigenvalues proportion cumprop
1       3.150      0.532   0.532
2       1.515      0.256   0.788
3       0.781      0.132   0.920
4       0.289      0.049   0.968
5       0.147      0.025   0.993
6       0.041      0.007   1.000
```

# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 变量与主成分的相关系数.

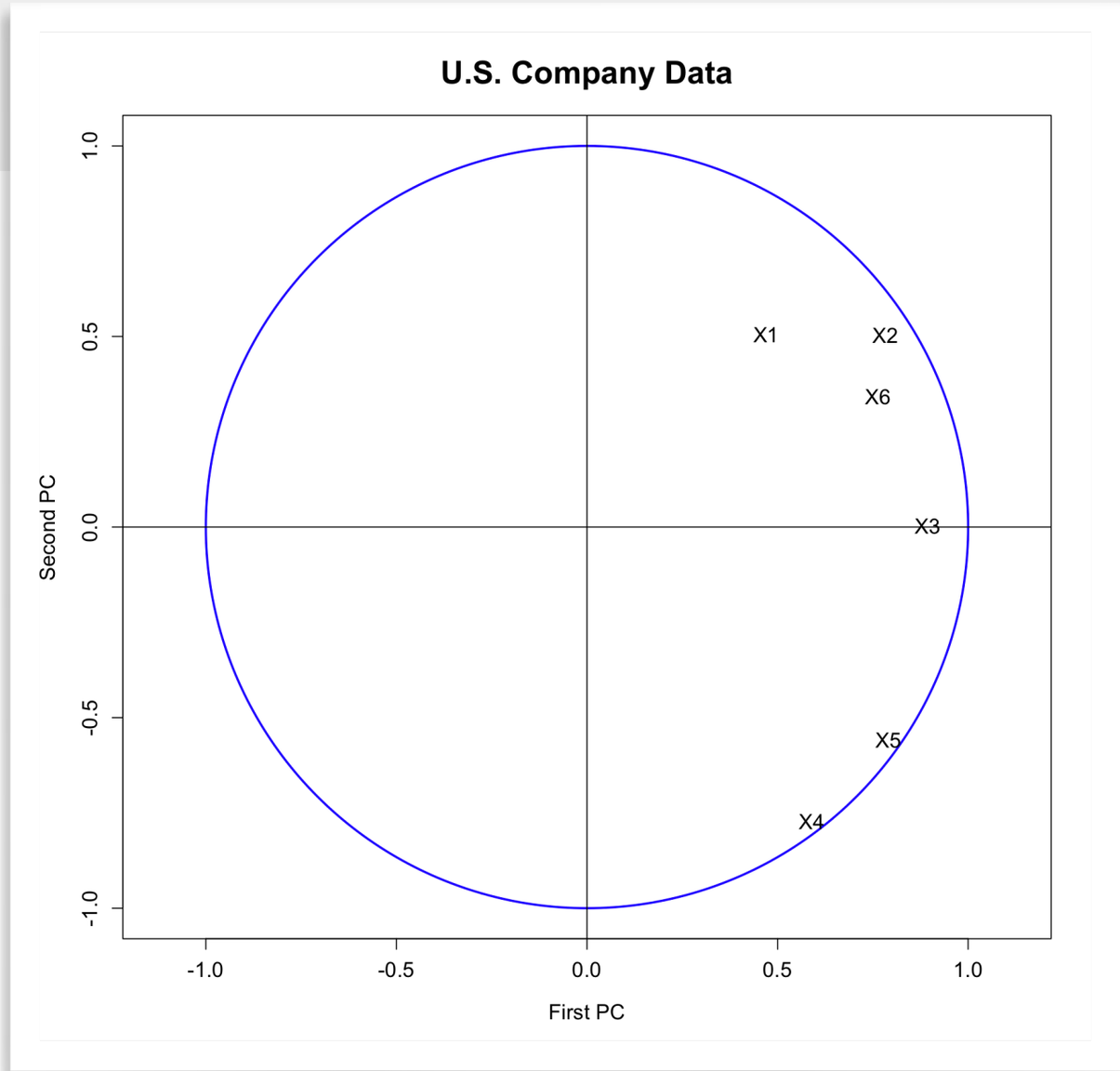
```
r = x %*% e$vectors # principal components
r = cor(cbind(r, x)) # correlation between PCs and variables
r1 = r[7:12, 1:2] # correlation of the two most important PCs and variables
corpcx = data.frame(PC1 = r1[, 1], PC2 = r1[, 2], SquaredSum = r1[, 1]^2 + r1[, 2]^2)
rownames(corpcx) = c('X1', 'X2', 'X3', 'X4', 'X5', 'X6')
round(corpcx, digits = 2)
```

```
> round(corpcx, digits = 2)
     PC1   PC2 SquaredSum
X1 -0.47  0.50       0.48
X2 -0.78  0.50       0.87
X3 -0.89  0.00       0.80
X4 -0.59 -0.77       0.95
X5 -0.79 -0.56       0.94
X6 -0.76  0.34       0.70
```

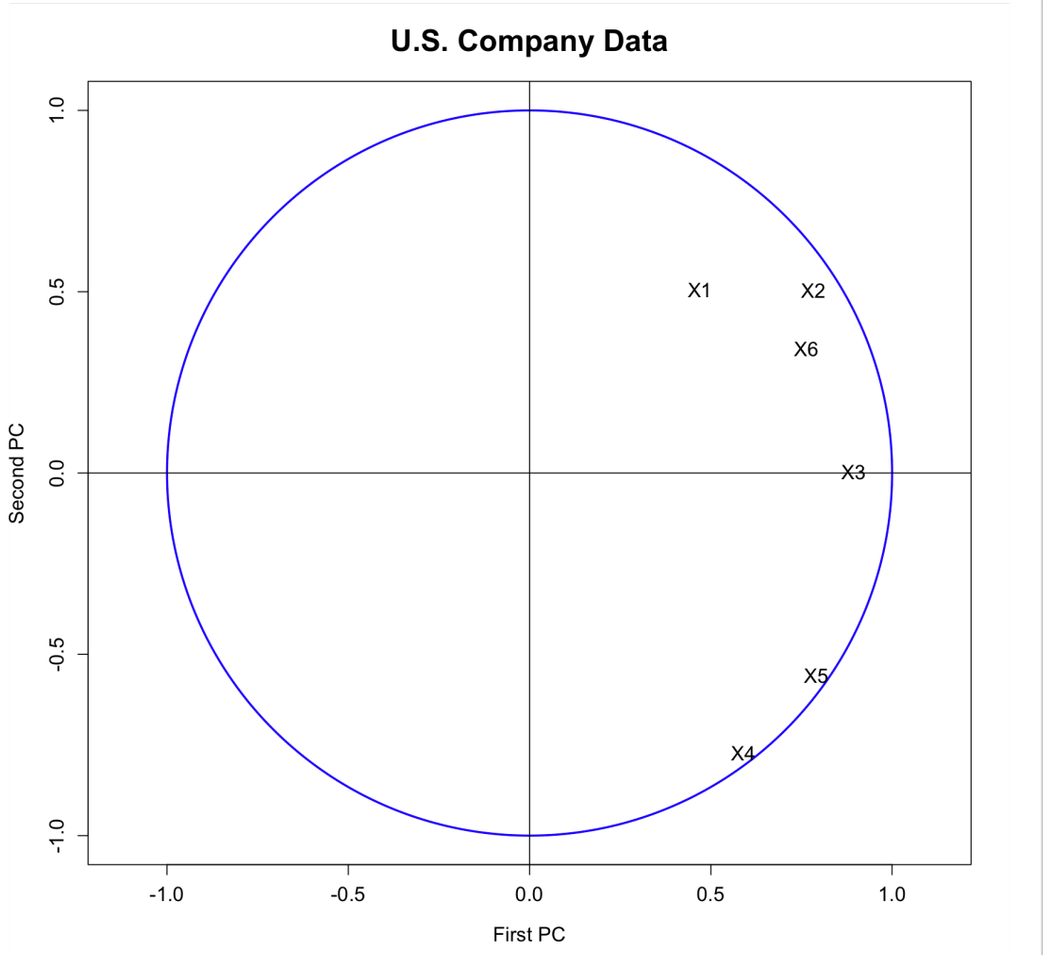
# 79 家美国公司

- 考虑 79 家美国公司的数据集.
  - 原始变量与前两个主成分的相关性.

```
ucircle = cbind(cos((0:360)/180 * pi), sin((0:360)/180 * pi))
plot(ucircle, type = "l", lty = "solid", col = "blue", xlab = "First PC", ylab = "Second PC",
    main = "U.S. Company Data", cex.lab = 1.2, cex.axis = 1.2, cex.main = 1.8, lwd = 2, asp = 1)
abline(h = 0, v = 0)
label = c("X1", "X2", "X3", "X4", "X5", "X6")
text(-r1[, 1], r1[, 2], label, cex = 1.2)
```



# 79 家美国公司




```
> round(corpcx, digits = 2)
      PC1   PC2 SquaredSum
X1 -0.47  0.50       0.48
X2 -0.78  0.50       0.87
X3 -0.89  0.00       0.80
X4 -0.59 -0.77       0.95
X5 -0.79 -0.56       0.94
X6 -0.76  0.34       0.70
```

assets $(X_1)$

sales $(X_2)$

market value $(X_3)$

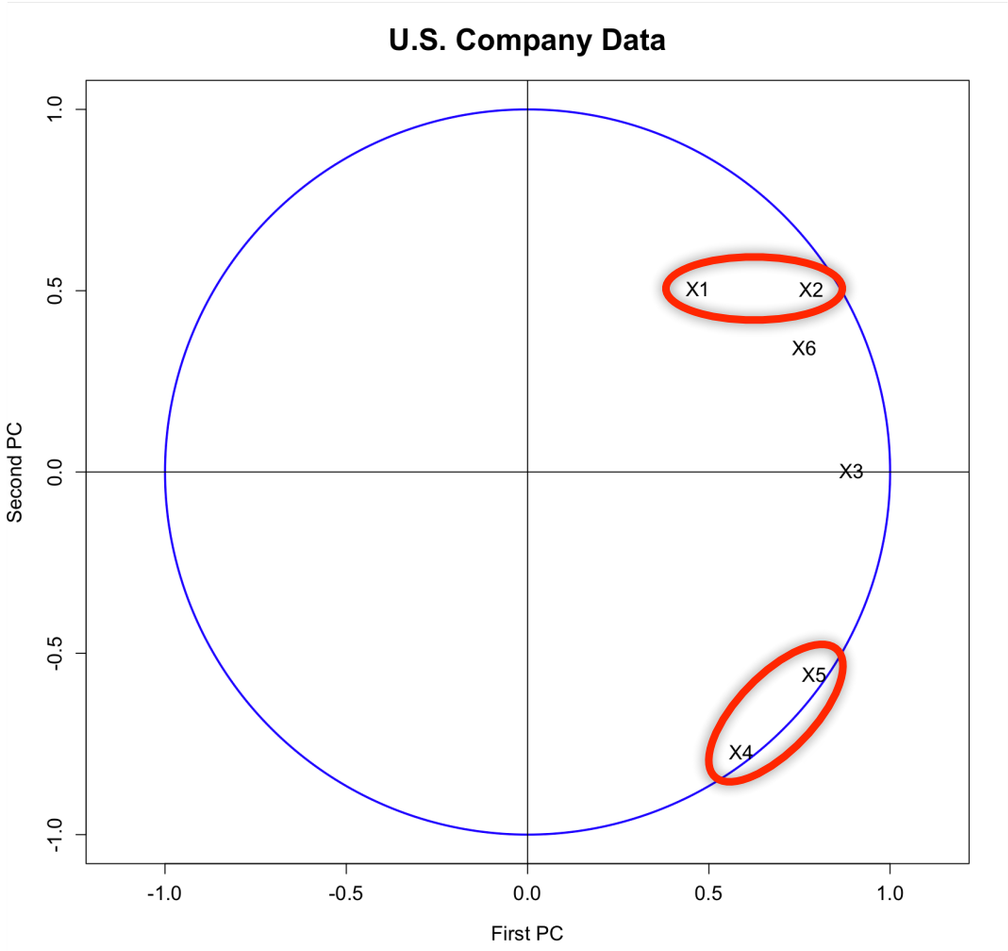
profits $(X_4)$

cash flow $(X_5)$

employees $(X_6)$

- 看起来第一主成分是一种“规模效应”，它与所有描述公司经营活动规模的变量都呈正相关.
- 这也是衡量企业经济实力的一种度量方式.

# 79 家美国公司




```
> round(corpcx, digits = 2)
      PC1   PC2 SquaredSum
X1 -0.47  0.50       0.48
X2 -0.78  0.50       0.87
X3 -0.89  0.00       0.80
X4 -0.59 -0.77       0.95
X5 -0.79 -0.56       0.94
X6 -0.76  0.34       0.70
```

assets $(X_1)$

sales $(X_2)$

market value $(X_3)$

profits $(X_4)$

cash flow $(X_5)$

employees $(X_6)$

- 第二主成分描述了公司的 “形态” (“利润—现金流” 与 “资产—销售额” 因素)，从经济角度来看，这更难解释.