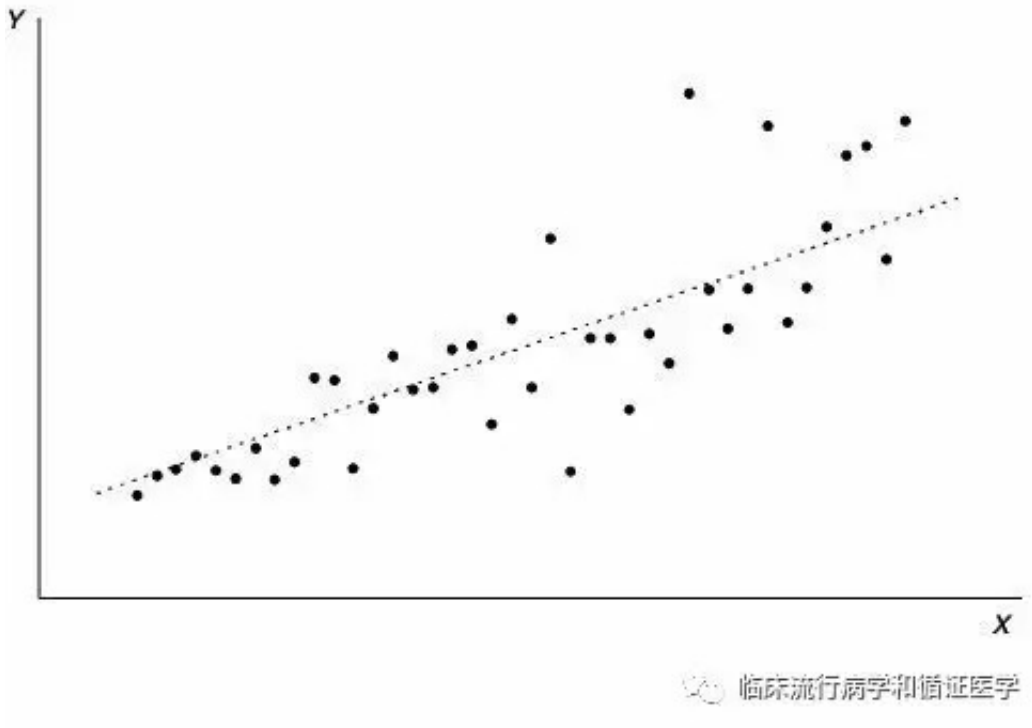
主成分分析的原理

作者：张华 赵一鸣 来源：临床流行病学和循证医学

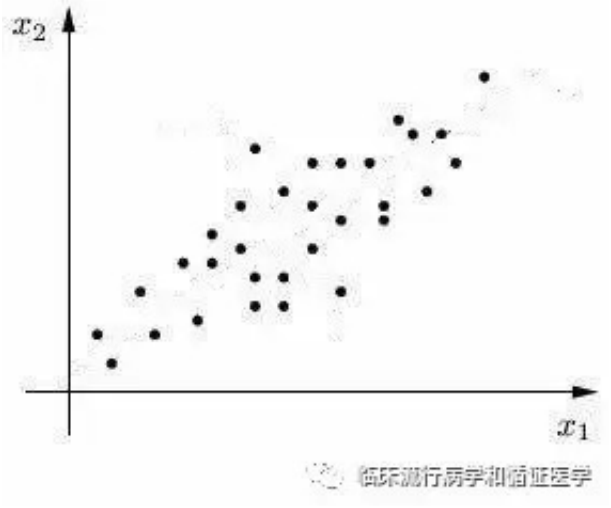
本文原地址：https://www.iikx.com/news/statistics/1781.html

随着收集数据的成本降低，数据的量越来越大。关于每个病例或者样本，我们可收集很多指标。但对于应实践应用，不是指标越多越好，而越少越简单越好。如果能用一个指标代替的数据，就最好不要用多个指标进行描述，因为前者应用时要求指标简单、意义明确。因此在大数据时代数据需要降维。主成分分析就是其中一种降维的方法。

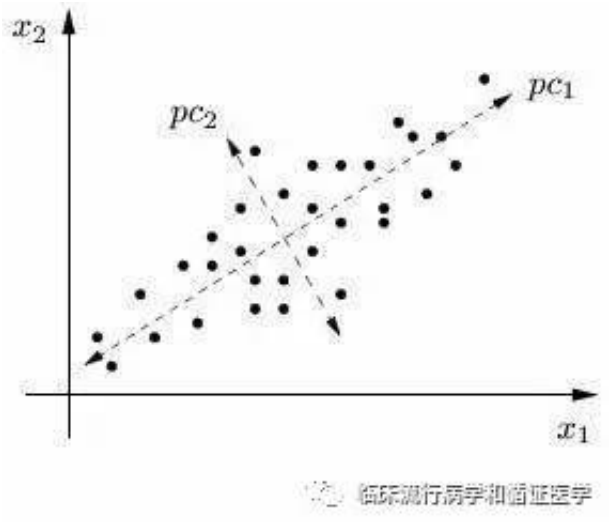
主成分分析(Principal ComponentAnalysis，PCA)一种数据降维技术，将多个具有较强相关性的实测变量综合成少量综合变量。其原理也比较简单，首先需要我们理解变异的重要性。在数据中，一个指标除了可靠、真实之外，还必须反映个体间差异。数据的变异是数据信息的承载体，不同个体取值大同小异，该指标不能很好的区分个体，变异越大，信息量越大。举个极端的例子，如果一个研究中性别会为“女”，身高全为170cm,那这两个变量在本研究中就是恒量，在主成分分析中认为这两个变量没有提供信息。比如下面一个散点图的数据，假设两个指标的单位相同，X轴代表的参数信息量要大于Y轴代表的参数信息量。



对于下面一个数据，X轴和Y轴的信息量差不多，我们是否可以数据的变异集中在一个变量上呢?



如果我们旋转和移动坐标轴之后，用新坐标体系表示数据，



PC1代表的信息量要远大于PC2的信息量，此时PC2的信息量可忽略，即我们用PC1一个变量代替原来X、Y两个，即达到的降维的目的。两个原始变量对应二维空间，这种变换我们很容易理解。原始变量个数对应了空间维数，我们做的主成分分析往往有多个变量，高维空间与二维和三维空间相类似，都是通过空间旋转和平移后得到。

从上面图中也很比较容易得到，主成分分析应用于两个或多个变量高度相关的情况，如果各变量间不相关或相关性较弱，主成分分析得不到较理想的结果。

理解了主成分分析的原理，有助于我们做主成分分析结果的解读。与主成分相关的另外一种统计方法是因子分析，我们下次再解析。