25 Selected Use Cases of Data 数据应用

将线性代数工具用于数据转化

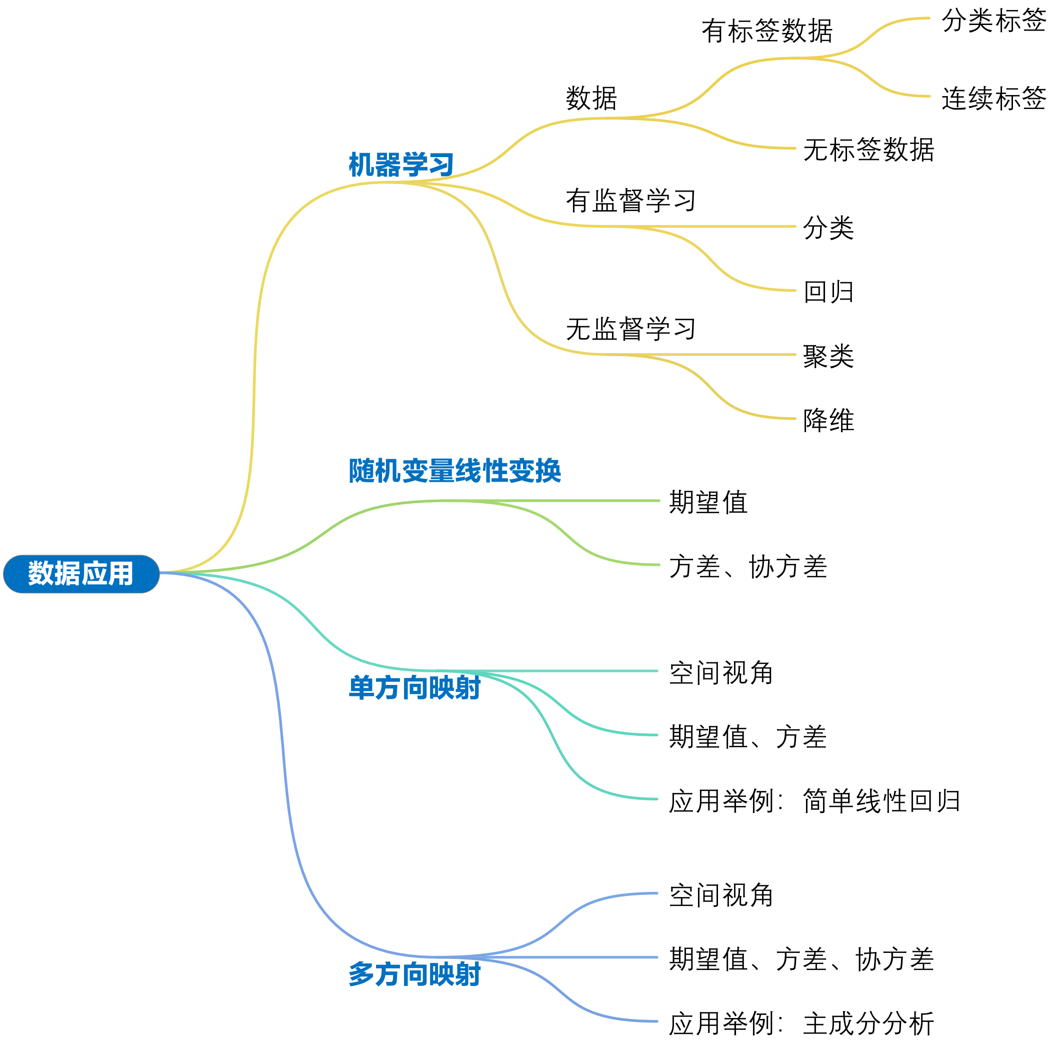
琴弦的低吟浅唱中容易发现几何；

天体的星罗棋布上能够洞见音律。

There is geometry in the humming of the strings. There is music in the spacing of the spheres.

—— 毕达哥拉斯 (Pythagoras) | 古希腊哲学家、数学家和音乐理论家 | 570 ~ 495 BC

- ◀ `statsmodels.api.add_constant()` 线性回归增加一列常数 1
- ◀ `statsmodels.api.OLS()` 最小二乘法函数
- ◀ `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- ◀ `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- ◀ `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数


数据应用
机器学习
数据
有标签数据
分类标签
连续标签
无标签数据
有监督学习
分类
回归
无监督学习
聚类
降维
随机变量线性变换
期望值
方差、协方差
单方向映射
空间视角
期望值、方差
应用举例：简单线性回归
多方向映射
空间视角
期望值、方差、协方差
应用举例：主成分分析

25.1 从线性代数到机器学习

本书第 23、24 章，即“数据三部曲”前两章，分别从空间、矩阵分解两个角度总结了本书之前介绍的重要线性代数工具。我们寻找向量空间、完成矩阵分解，并不仅仅因为它们有趣。实际上，本书中介绍的线性代数工具有助于我们用样本数据实现数据科学和机器学习模型。

在前两章的基础上，本章一方面引出将在《概率统计》讲解的多元统计内容，另一方面预告本书线性代数工具在《数据科学》和《机器学习》中几个应用场景。

机器学习

本章首先聊一聊，什么是机器学习？

根据维基百科定义，机器学习算法是一类从数据中自动分析获得规律，并利用规律对未知数据进行预测的算法。

机器学习处理的问题有如下特征：(a) 基于数据，模型需要通过样本数据训练；(b) 黑箱或复杂系统，难以找到**控制方程** (governing equations)。控制方程指的是能够比较准确、完整描述某一现象或规律的数学方程，比如用 $y = ax^2 + bx + c$ 描述抛物线轨迹。

有标签数据、无标签数据

根据输出值有无标签，如图 1 所示，数据可以分为**有标签数据** (labelled data) 和**无标签数据** (unlabelled data)。

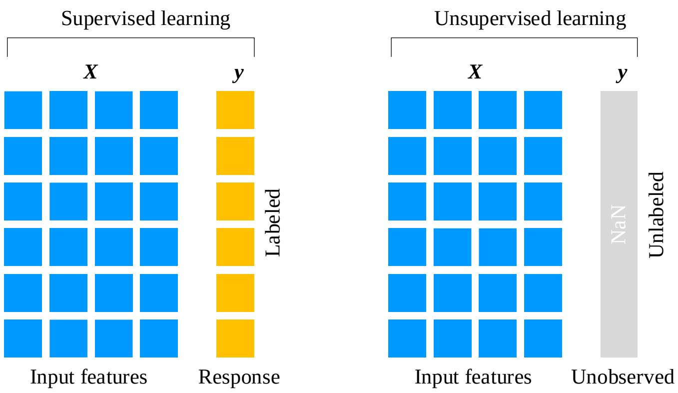


图 1. 根据有无标签分类数据

显然，鸢尾花数据集是有标签数据，因为数据的每一行代表一朵花，而每一朵花都对应一个特定的鸢尾花类别 (图 2 最后一列)，这个类别就是标签。

Index	Sepal length X_1	Sepal width X_2	Petal length X_3	Petal width X_4	Species C
1	5.1	3.5	1.4	0.2	Setosa C_1
2	4.9	3	1.4	0.2	
3	4.7	3.2	1.3	0.2	
...	...	...	...	...	
49	5.3	3.7	1.5	0.2	
50	5	3.3	1.4	0.2	
51	7	3.2	4.7	1.4	Versicolor C_2
52	6.4	3.2	4.5	1.5	
53	6.9	3.1	4.9	1.5	
...	...	...	...	...	
99	5.1	2.5	3	1.1	
100	5.7	2.8	4.1	1.3	
101	6.3	3.3	6	2.5	Virginica C_3
102	5.8	2.7	5.1	1.9	
103	7.1	3	5.9	2.1	
...	...	...	...	...	
149	6.2	3.4	5.4	2.3	
150	5.9	3	5.1	1.8	

图 2. 鸢尾花数据表格，单位为厘米 (cm)

很多场景，样本数据并没有标签。举个例子，图 3 所示为 2020 年度中 9 支股票的每个营业日股价数据。图 3 中数据共有 253 行，每行代表一个日期及当日几只股票股价水平。列方向来看，表格共有 10 列，第 1 列为营业日日期，其余 9 列每列为股价数据。图 3 中第一列数据为时间点，从时间序列角度，这一列时间点起到一个时间先后排序的作用。图 3 数据显然没有类似图 2 标签。

此外，很多分析场景中，我们并不考虑鸢尾花数据的标签；也就是说，我们将鸢尾花标签一列删除得到无标签数据。

Date	TSLA	TSM	COST	NVDA	FB	AMZN	AAPL	NFLX	GOOGL
2-Jan-2020	86.05	58.26	281.10	239.51	209.78	1898.01	74.33	329.81	1368.68
3-Jan-2020	88.60	56.34	281.33	235.68	208.67	1874.97	73.61	325.90	1361.52
6-Jan-2020	90.31	55.69	281.41	236.67	212.60	1902.88	74.20	335.83	1397.81
7-Jan-2020	93.81	56.60	280.97	239.53	213.06	1906.86	73.85	330.75	1395.11
8-Jan-2020	**98.43**	**57.01**	**284.19**	**239.98**	**215.22**	**1891.97**	**75.04**	**339.26**	**1405.04**
9-Jan-2020	96.27	57.48	288.75	242.62	218.30	1901.05	76.63	335.66	1419.79
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
30-Dec-2020	694.78	108.49	373.71	525.83	271.87	3285.85	133.52	524.59	1736.25
31-Dec-2020	705.67	108.63	376.04	522.20	273.16	3256.93	132.49	540.73	1752.64

图 3. 股票收盘股价数据

有监督学习、无监督学习

根据数据是否有标签，机器学习可以分为两大类：

◀ **有监督学习** (supervised learning) 训练有标签值样本数据并得到模型，通过模型对新样本进行推断。

◀ **无监督学习** (unsupervised learning) 训练没有标签值的数据，并发现样本数据的结构和分布。

标签数值可以是**分类** (categorical)，也可以是**连续** (continuous)。

分类标签很好理解，比如鸢尾花数据的标签有三类 setosa、virginica、versicolor。它们可以用数字 0、1、2 来代表。

而有些数据的标签是连续的。本系列丛书《数学要素》一册中鸡兔同笼的回归问题中，鸡兔数量就是个好例子。横轴鸡的数量是回归问题的自变量；纵轴的兔子数量是因变量，就相当于标签。

再举个例子，用图 3 中 9 只股价来构造一个投资组合，目标是跟踪标普 500 涨跌；这时，标普 500 同时期的数据就是标签，显然这个标签对应的数据为连续数值。

四大类

如图 4 所示，根据标签类型，机器学习还可进一步细分成四大类问题。

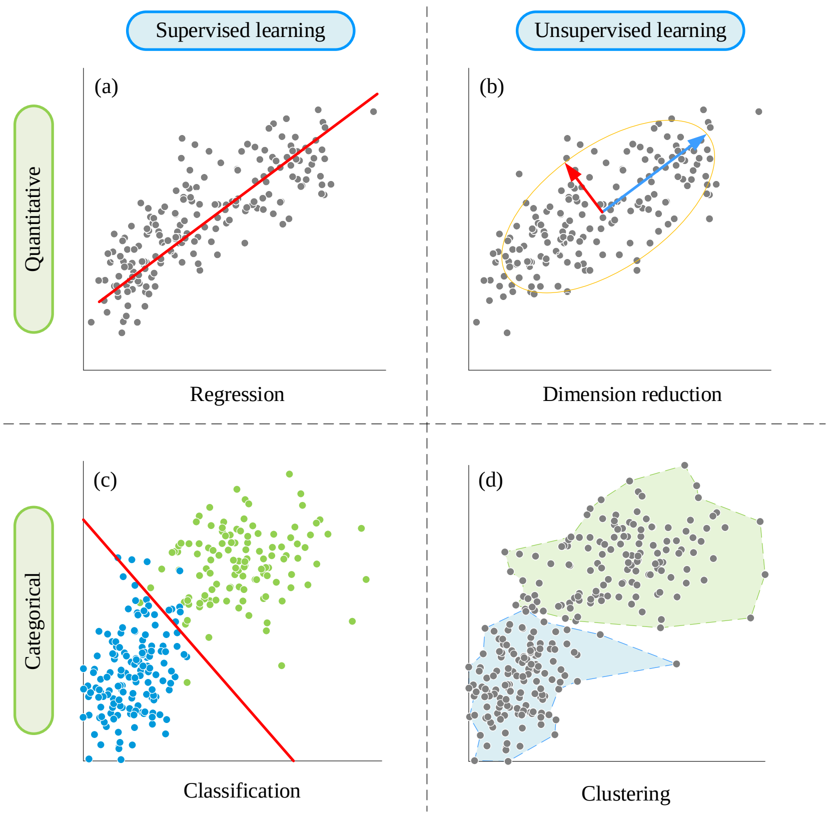


图 4. 根据是否有标签、标签类型细分机器学习

有监督学习中，如果标签为连续数据，对应的问题为**回归** (regression)，如图 4 (a)。如果标签为分类数据，对应的的问题则是**分类** (classification)，如图 4 (c)。

无监督学习中，样本数据没有标签。如果模型的目标是根据数据特征将样本数据分成不同的组别，这种问题叫做**聚类** (clustering)，如图 4 (b)。如果目标是寻找规律、简化数据，这类问题叫做**降维** (dimension reduction)，比如主成分分析目的之一就是找到数据中占据主导地位的成分，如图 4 (d)。

实际上，数据科学和机器学习本来不分家，但是为了方便大家学习，作者根据图 4 所示规律将内容分成《数据科学》和《机器学习》两册。

《数据科学》主要解决图 4 (a) 和 (b) 两图对应的回归以及降维问题。

《机器学习》则关注图 4 (c) 和 (d) 所示分类和聚类问题，难度有所提高。

《数学要素》、《矩阵力量》、《概率统计》这三册为《数据科学》和《机器学习》提供了数学工具。特别地，本册《矩阵力量》提供的线性代数工具，是所有数学工具从一维到多维的推手，比如多元微积分、多元概率统计、多元优化等等。

本章下文就试图把几何、线性代数、概率统计、机器学习应用这几个元素串起来，让大家领略线性代数工具无处不在的力量。

25.2 从随机变量的线性变换说起

本节介绍随机变量的线性变换。这一节内容相对来说有一定难度，但是极其重要。本节是多元统计的理论基础。

本系列丛书《概率统计》一册还会深入探讨本节内容。

线性变换

如果 X 为一个随机变量，对 X 进行函数变换，可以得到其他的随机变量 Y:

$$Y = h(X) \tag{1}$$

特别地，如果 $h()$ 为线性函数，则 X 到 Y 进行的就是线性变换，比如:

$$Y = h(X) = aX + b \tag{2}$$

其中，a 和 b 为常数。这相当于几何中的缩放、平移两步操作。

(2) 中，Y 的期望和 X 的期望值之间关系:

$$\mathrm{E}(Y) = a\,\mathrm{E}(X) + b \tag{3}$$

(2) 中，Y 和 X 方差的关系：

$$\mathrm{var}(Y) = \mathrm{var}(aX + b) = a^2\,\mathrm{var}(X) \tag{4}$$

二元随机变量

如果 Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 存在如下关系：

$$Y = aX_1 + bX_2 \tag{5}$$

(5) 可以写成：

$$Y = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \tag{6}$$

相信大家已经在上式中看到了本书反复讨论的映射关系。

Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 期望值之间存在如下关系：

$$\mathrm{E}(Y) = \mathrm{E}(aX_1 + bX_2) = a\,\mathrm{E}(X_1) + b\,\mathrm{E}(X_2) \tag{7}$$

(7) 可以写成如下矩阵运算形式：

$$\mathrm{E}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathrm{E}(X_1) \\ \mathrm{E}(X_2) \end{bmatrix} \tag{8}$$

Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 方差存在如下关系：

$$\mathrm{var}(Y) = \mathrm{var}(aX_1 + bX_2) = a^2\,\mathrm{var}(X_1) + b^2\,\mathrm{var}(X_2) + 2ab\,\mathrm{cov}(X_1, X_2) \tag{9}$$

(9) 可以写成：

$$\mathrm{var}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathrm{var}(X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) \\ \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \mathrm{var}(X_2) \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Sigma}} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{10}$$

相信大家已经在上式中看到了如下协方差矩阵：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathrm{var}(X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) \\ \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \mathrm{var}(X_2) \end{bmatrix} \tag{11}$$

也就是说，(10) 可以写成：

$$\mathrm{var}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{12}$$

D 维随机变量

如果 D 维随机变量 $\boldsymbol{\zeta} = [Z_1, Z_2, \dots, Z_D]^{\mathrm{T}}$ 的均值为 $\boldsymbol{0}$，协方差矩阵为单位矩阵，即：

$$\boldsymbol{\zeta} = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\zeta} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\zeta})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathrm{var}(\boldsymbol{\zeta}) = \boldsymbol{I}_{D \times D} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

其中，希腊字母 ζ 读作 zeta。

如果 D 维随机变量 $\boldsymbol{\chi} = [X_1, X_2, \dots, X_D]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{\zeta}$ 存在如下线性关系：

$$\boldsymbol{\chi} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_D \end{bmatrix} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_D \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_D \end{bmatrix} \tag{14}$$

⚠ 注意，$\boldsymbol{\chi}$ 为列向量，列向量长度为 D，即 D 行。

$\boldsymbol{\chi}$ 的期望值 (即质心) 为：

$$\boldsymbol{\mu}_{\chi} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\chi})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\mu} \tag{15}$$

$\boldsymbol{\chi}$ 的协方差为：

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{\chi}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\chi} = \frac{(\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}}{n} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \frac{\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}}{n} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{I}_{D \times D} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{V} \tag{16}$$

⚠ 注意，(16) 计算总体方差，因此分母为 n。此外注意 $\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}$ 转置 $^{\mathrm{T}}$ 所在位置，有别于本书前文计算样本协方差矩阵时遇到的 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$。

如果 $\boldsymbol{\chi}$ 和 $\boldsymbol{\gamma} = [Y_1, Y_2, \dots, Y_D]^{\mathrm{T}}$ 满足如下线性映射关系：

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\chi} \tag{17}$$

$\boldsymbol{\gamma}$ 的期望值 (即质心) 为：

$$\boldsymbol{\mu}_{\gamma} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\gamma})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu} \tag{18}$$

$\boldsymbol{\gamma}$ 的协方差为：

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{\gamma}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\gamma} = \boldsymbol{A} \boldsymbol{\Sigma}_{\chi} \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{19}$$

下面几节展开讲解本节内容。

25.3 单方向映射

随机变量视角

D 个随机变量，X_1、$X_2 \ldots X_D$，通过如下线性构造得到随机变量 Y:

$$Y = v_1 X_1 + v_2 X_2 + \cdots + v_D X_D \tag{20}$$

举个例子，制作八宝粥时，用到如下八种谷物——大米 (X_1)、小米 (X_2)、糯米 (X_3)、紫米 (X_4)、绿豆 (X_5)、红枣 (X_6)、花生 (X_7)、莲子 (X_8)。v_1、$v_2 \ldots v_D$ 相当于八种谷物的配比值。

向量视角

从向量角度看 (20):

$$\hat{\boldsymbol{y}} = v_1 \boldsymbol{x}_1 + v_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + v_D \boldsymbol{x}_D \tag{21}$$

⚠ 注意，(21) 中 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 头上“戴帽子”为了呼应下一节的线性回归，避免混淆。

如图 5 所示，(21) 就是线性组合。

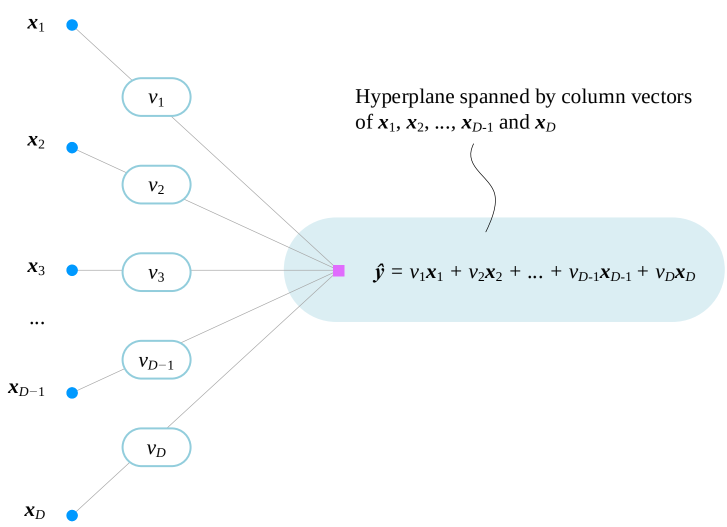


图 5. $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2 \ldots \boldsymbol{x}_D$ 线性组合

令 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$，(21) 相当于 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 向量映射，得到列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$：

$$\hat{y} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \tag{22}$$

特别地，如果 $\boldsymbol{v}$ 为单位向量，上式就是正交投影。

空间视角

如图 6 所示，从空间角度，$\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$ 张成超平面 H，而 $\hat{y}$ 在超平面 H 中。$\hat{y}$ 的坐标就是 $(v_1, v_2, \ldots, v_D)$。

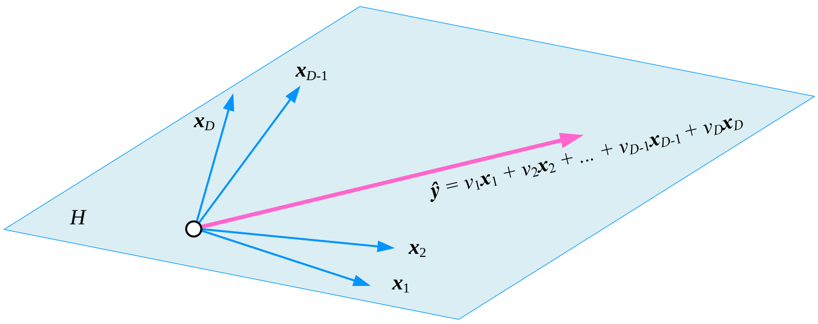


图 6. $\hat{y}$ 在超平面 H 中

行向量视角

本章前文说的是列向量视角，我们下面再看行向量视角。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中的每一行对应行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$，$\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v} = \hat{y}^{(i)}$ 相当于 D 维坐标映射得到一个一维点。

请大家回忆本书第 10 章讲过的用张量积完成“二次投影”。

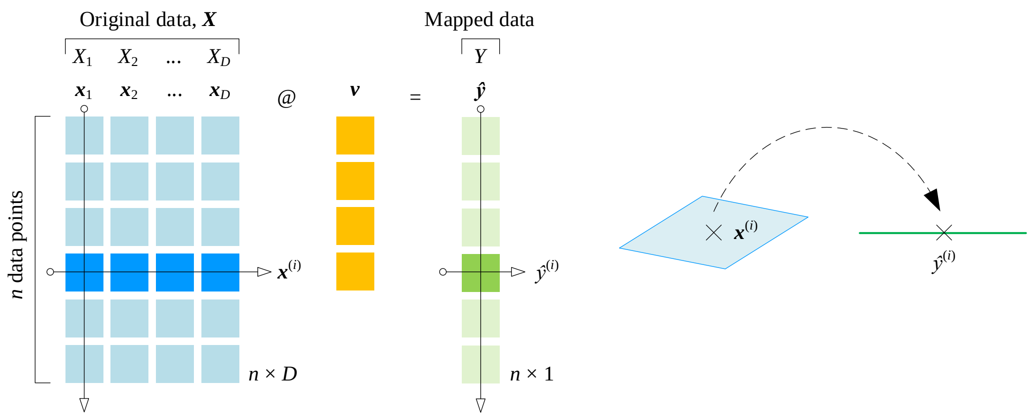


图 7. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射的行向量视角

期望值

下面用具体数据举例说明如何计算 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 的期望值。图 8 所示热图对应矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射运算过程。

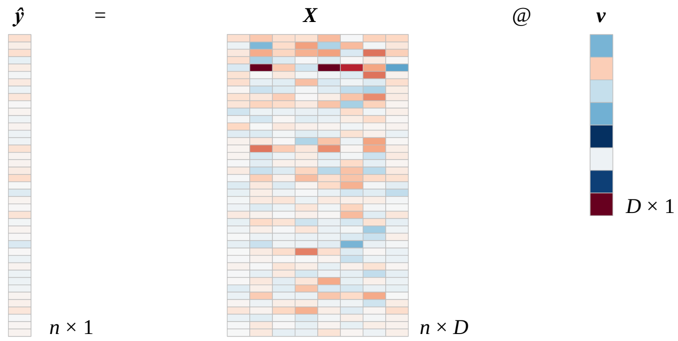


图 8. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射热图

根据上一节内容，列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 期望值 $\mathrm{E}(\boldsymbol{y})$ 和矩阵 $\boldsymbol{X}$ 期望值 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 关系为。

$$\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v} \tag{23}$$

其中，$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量：

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{X}) = \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \tag{24}$$

计算 $\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 过程热图如图 9 所示。

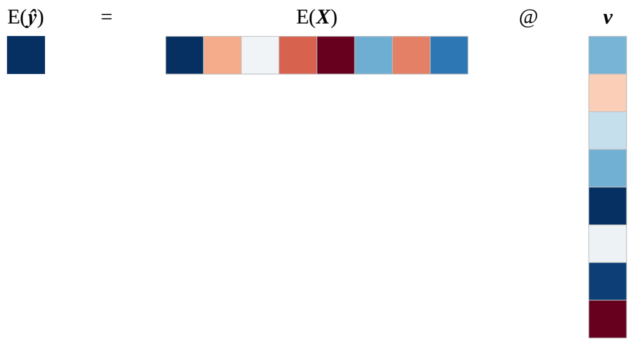


图 9. 计算 $\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 矩阵运算热图

方差

方差 $\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 和数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ 关系为：

$$
\begin{aligned}
\operatorname{var}(\hat{y}) &= \frac{(\hat{y}-\mathrm{E}(\hat{y}))^{\mathrm{T}}(\hat{y}-\mathrm{E}(\hat{y}))}{n-1} \\
&= \frac{(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v})}{n-1} \\
&= \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \underbrace{\frac{(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X}))}{n-1}}_{\boldsymbol{\Sigma}_X} \boldsymbol{v} \\
&= \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_X \boldsymbol{v}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

图 10 所示为计算 var($\hat{y}$) 矩阵热图。

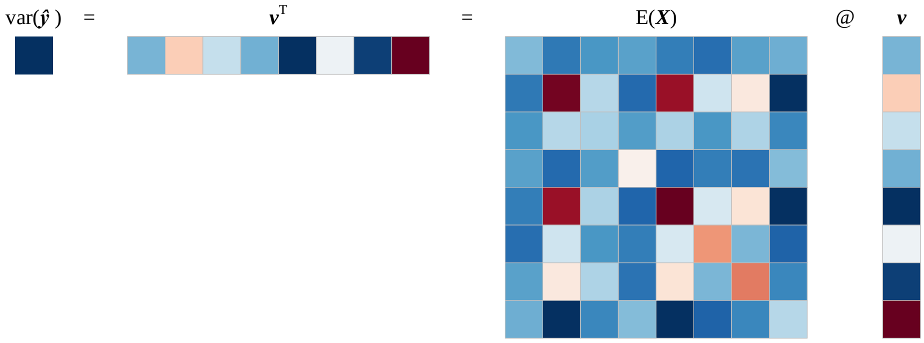


图 10. 计算 var($\hat{y}$) 矩阵运算热图

图 11 所示为统计视角下的上述映射过程。

⚠ 注意，图 11 默认样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 服从多元高斯分布，因此我们用椭圆代表它的分布。

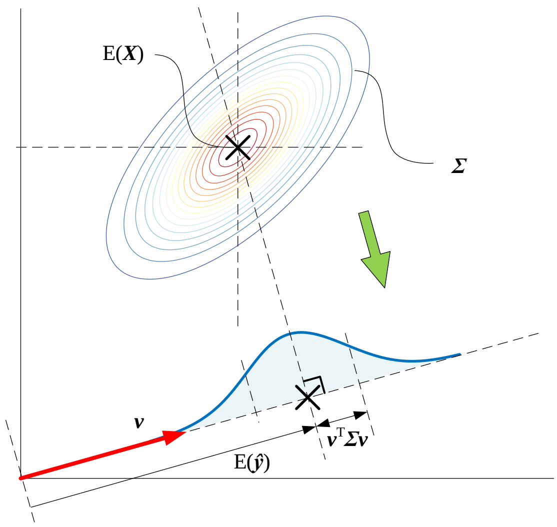


图 11. 服从多元高斯分布的数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射得到 $\hat{y}$

25.4 线性回归

线性回归 (linear regression) 是最为常用的回归算法。这种模型利用线性关系建立因变量与一个或多个自变量之间的联系。**简单线性回归** (Simple Linear Regression, SLR) 为一元线性回归模型，是指模型中只含有一个自变量 (x) 和一个因变量 (y)，即 $y = b_0 + b_1x_1 + \varepsilon$。

多元线性回归 (multivariate regression) 模型则引入多个自变量 ($x_1, x_2, \ldots, x_D$)，即回归分析中引入多个因子解释因变量 (y)。多元线性回归的数学表达式如下：

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \ldots + b_Dx_D + \varepsilon \tag{26}$$

其中，b_0 为截距项；$b_1, b_2, \ldots, b_D$ 代表自变量系数；ε 为残差项；D 为自变量个数。

用向量代表具体值，(26) 可以写成：

$$\boldsymbol{y} = \underbrace{b_0\boldsymbol{1} + b_1\boldsymbol{x}_1 + b_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + b_D\boldsymbol{x}_D}_{\hat{\boldsymbol{y}}} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{27}$$

⚠ 注意，全 $\boldsymbol{1}$ 列向量也代表一个方向。而 $\boldsymbol{y}$ 代表监督学习中的连续标签。

换一种方式表达 (27)：

$$\boldsymbol{y} = \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}}_{\hat{\boldsymbol{y}}} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{28}$$

其中，

$$\boldsymbol{X}_{n\times(D+1)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1} & \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,D} \\ 1 & x_{2,1} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times(D+1)}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon^{(1)} \\ \varepsilon^{(2)} \\ \vdots \\ \varepsilon^{(n)} \end{bmatrix} \tag{29}$$

⚠ 注意，(29) 中 $\boldsymbol{X}$ 包含全 $\boldsymbol{1}$ 列向量，也就是说这个 $\boldsymbol{X}$ 为 $D + 1$ 列。

图 12 所示为多元 OLS 线性回归数据关系，图中 $\boldsymbol{y}$ 就是连续标签。残差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 则垂直于 span($\boldsymbol{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$)。

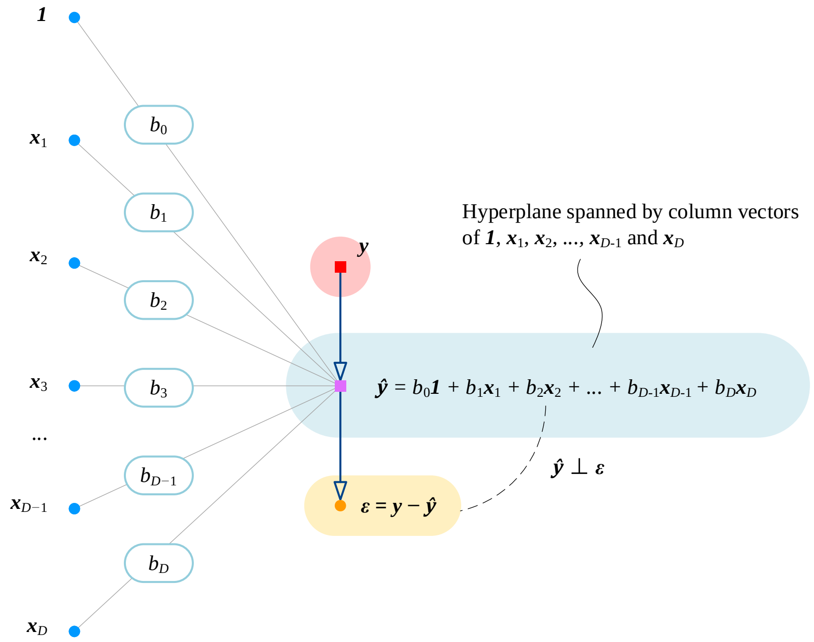


图 12. 多元 OLS 线性回归数据关系

投影视角

预测值构成的列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$，通过下式计算得到：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{30}$$

⚠ 注意，这里我们用了“戴帽子”的 $\hat{\boldsymbol{y}}$，它代表对 $\boldsymbol{y}$ 的估计。和形状相同，两者之差为残差。

预测值向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 是自变量向量 $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$ 的线性组合。从空间角度来看，$[\mathbf{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 构成一个超平面 $H = \text{span}(\mathbf{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$。$\hat{\boldsymbol{y}}$ 是 $\boldsymbol{y}$ 在超平面 H 上的投影。

而 $\boldsymbol{y}$ 和 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 的差对应残差项 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{31}$$

如图 13 所示，残差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 垂直于 H：

$$\boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{X} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0} \tag{32}$$

将 (31) 代入 (32) 得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{33}$$

求解得到 $\boldsymbol{b}$：

$$\boldsymbol{b} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{34}$$

⚠本书中，我们已经不止一起提到 (34)。请大家注意从数据、向量、几何、空间、优化等视角理解 (34)。此外，还请大家注意，只有 $\boldsymbol{X}$ 为列满秩时，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 才存在逆。

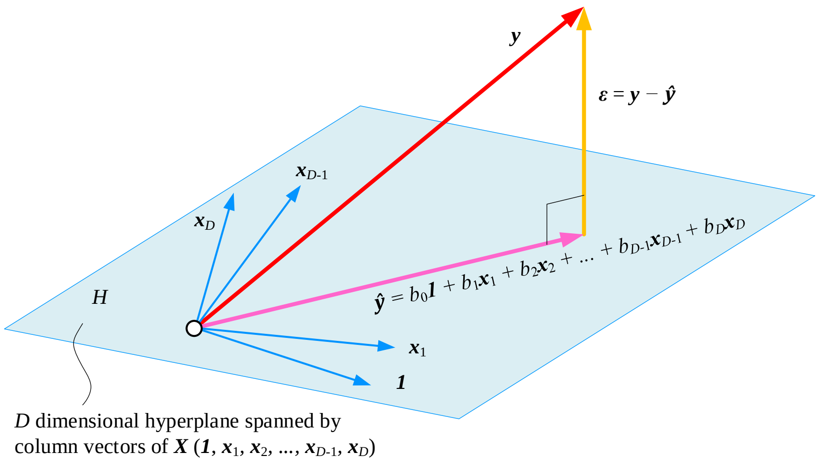


图 13. 几何角度解释多元 OLS 线性回归

QR 分解

利用 QR 分解结果，即 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{QR}$，将其代入 (34) 得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b} &= \left((\boldsymbol{QR})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{QR}\right)^{-1}(\boldsymbol{QR})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{R}\right)^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{R}^{-1}\underbrace{\left(\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\end{aligned} \tag{35}$$

奇异值分解

类似地，利用 SVD 分解结果，$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{b}$ 可以整理为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b} &= \left(\left(\boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \left(\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\underbrace{\left(\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\end{aligned} \tag{36}$$

也就是说，对比 SVD 分解 ($\boldsymbol{X} = \boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}$) 和 QR 分解 ($\boldsymbol{X} = \boldsymbol{QR}$)，$\boldsymbol{U}$ 可以视作 $\boldsymbol{Q}$，因为两者都是正交矩阵；而 $\boldsymbol{SV}^{\mathrm{T}}$ 可以视作 $\boldsymbol{R}$。

虽然 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 都是正交矩阵，两者从本质上是不同的。请大家自行回忆上一章内容，对比两种分解。

优化视角

以本节多元线性回归为例，**最小二乘法** (Ordinary Least Squares, OLS) 通过最小化误差的平方和寻找最佳参数 $\boldsymbol{b}$。

残差项平方和可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{37}$$

将 (31) 带入 (37)，展开得到：

$$\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i^2 = \left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\right) = \left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\right) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{38}$$

上式，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 都是标量，转置不影响结果：

$$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{39}$$

因此 (38) 可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i^2 = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}+\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{40}$$

构造最小化问题，令目标函数 $f(\boldsymbol{b})$ 为：

$$f\left(\boldsymbol{b}\right) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}+\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{41}$$

$f(\boldsymbol{b})$ 对向量 $\boldsymbol{b}$ 求一阶导为 $\boldsymbol{0}$ 得到如下等式：

$$\frac{\partial f\left(\boldsymbol{b}\right)}{\partial \boldsymbol{b}} = -2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}+2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{42}$$

整理 (42)，得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} \tag{43}$$

通过优化视角，我们也得到了(33)。

本系列丛书《概率统计》一册将介绍 (43) 和条件概率之间关系。

此外，$f(\boldsymbol{b})$ 对向量 $\boldsymbol{b}$ 求二阶导得到：

$$\frac{\partial^2 f\left(\boldsymbol{b}\right)}{\partial \boldsymbol{b}\partial \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}} = 2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} \tag{44}$$

如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，则它的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 正定。因此，满足 (43) 的鞍点 $\boldsymbol{b}$ 为极小值点。进一步，$f(\boldsymbol{b})$ 为二次型，可以判定 $\boldsymbol{b}$ 为最小值点。

25.5 多方向映射

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 两个不同方向投影：

$$\boldsymbol{y}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1,1} \\ v_{2,1} \\ \vdots \\ v_{D,1} \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1, \quad \boldsymbol{y}_2 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1,2} \\ v_{2,2} \\ \vdots \\ v_{D,2} \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \tag{45}$$

还是用八宝粥的例子，(45) 相当于两个不同配方的八宝粥。

合并 (45) 中两个等式，得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Y}_{n\times 2} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} \\ &= \boldsymbol{X}_{n\times D} \boldsymbol{V}_{D\times 2} \end{aligned} \tag{46}$$

图 14 所示为上述矩阵运算示意图。请大家自行从向量空间视角分析上式。

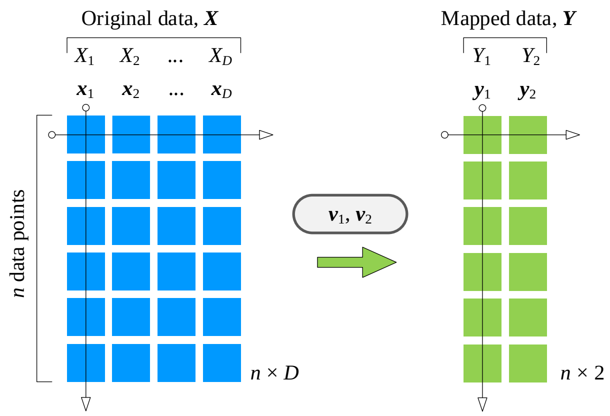


图 14. 数据朝两个方向映射

图 15 所示为数据 $\boldsymbol{X}$ 朝两个方向映射对应的运算热图。

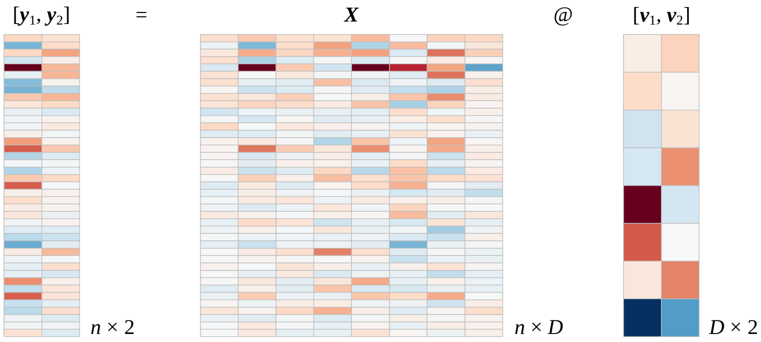


图 15. 数据 $\boldsymbol{X}$ 朝两个方向映射对应的运算热图

期望值

期望值 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 和期望值向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 关系为：

$$
\begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_1 & \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{V} \tag{47}
$$

比较 (18) 和 (47)，两个等式不同点在于转置。

图 16 所示为计算期望值 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 的热图。

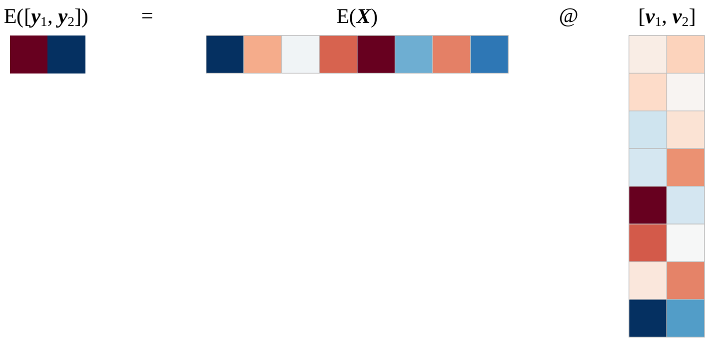


图 16. 计算期望值 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 矩阵运算热图

协方差

$[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$ 协方差为：

$$
\boldsymbol{\Sigma}_Y = \begin{bmatrix} \sigma_{Y1}^2 & \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} \\ \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} & \sigma_{Y2}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_X \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_X \boldsymbol{V} \tag{48}
$$

(19) 和 (48) 差别也是转置运算。注意，上式中 $\boldsymbol{V}$ 并非方阵。

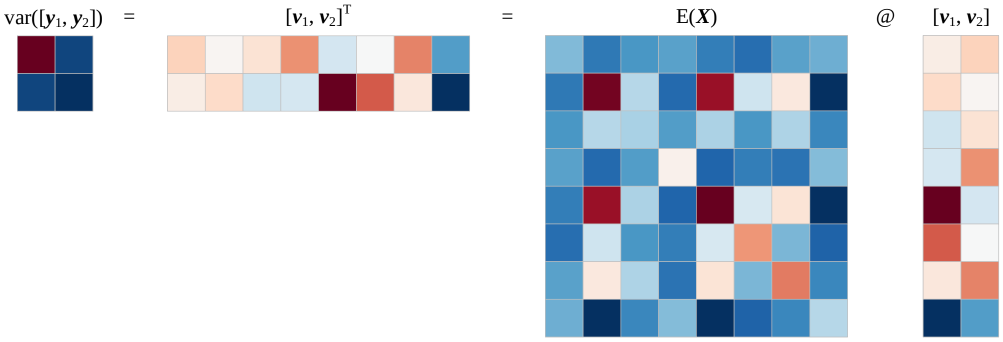


图 17. 计算 $[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$ 协方差矩阵运算热图

25.6 主成分分析

主成分分析 (principal component analysis, PCA) 最初由**卡尔 · 皮尔逊** (Karl Pearson) 在 1901 提出。通过线性变换，PCA 将多维数据投影到一个新的正交坐标系，把原始数据中的最大方差成分提取出来。PCA 也是数据降维的重要方法之一。

PCA 的一般步骤如下：

- 对原始数据 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 作**标准化** (normalization) 处理，得到 z 分数；
- 计算 z 分数协方差矩阵，即原始数据 $\boldsymbol{X}$ 的相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$；
- 计算 $\boldsymbol{P}$ 特征值 λ_i 与特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}_{D\times D}$；
- 对特征值 λ_i 从大到小排序，选择其中特征值最大的 p 个特征向量作为主成分方向；
- 将原始数据投影到规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p]$ 构建的新空间中，得到 $\boldsymbol{Y}_{n\times p}$。

数据标准化中包括去均值，这样新数据每个特征的均值为 0，相当于把数据的质心移到原点。而标准化防止不同特征上方差差异过大。

原始数据各个特征方差差别不大时，不需要对 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 标准化，只需要中心化就足够。

图 18 所示为通过分解相关性系数矩阵进行主成分分析过程；当然，也可以通过奇异值分解 SVD 进行主成分分析。本节最后会列出六种常用 PCA 技术路线。

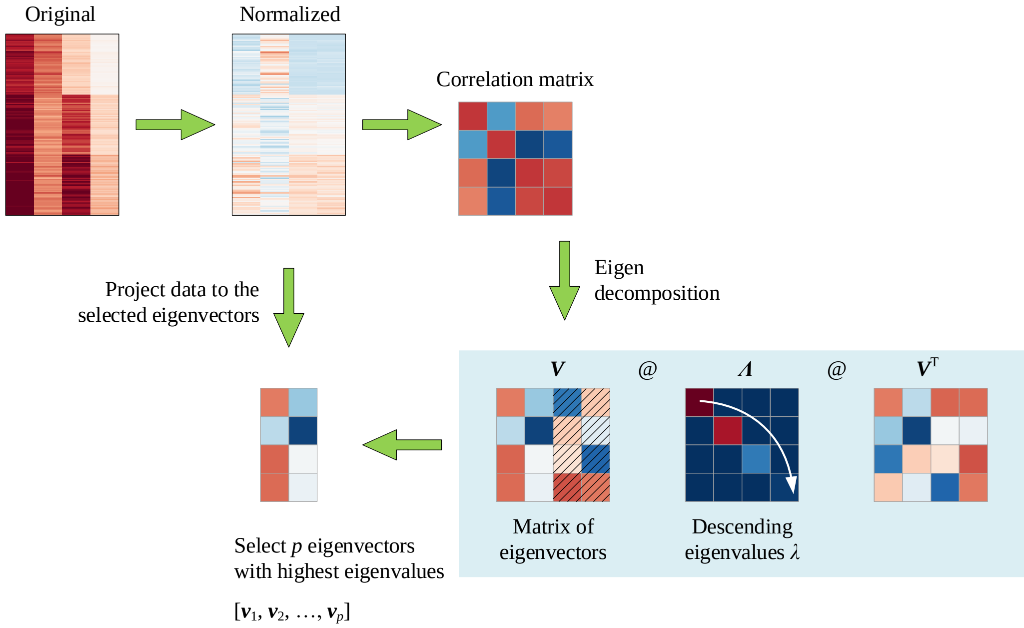


图 18. 主成分分析过程，基于特征值分解

作为重要的降维工具，PCA 可以显著减少数据的维数，同时保留数据中对方差贡献最大的成分。另外对于多维数据，PCA 可以作为一种数据可视化的工具。PCA 结果还可以用来构造回归模型。本系列丛书《数据科学》将深入介绍。

线性组合

如图 19 所示，主成分分析过程本质上上也是线性组合，即 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 线性组合组合得到 $\boldsymbol{Y}_{n\times D}$ 列向量。

$\boldsymbol{Y}_{n\times D}$ 是否同时完成正交化，要根据不同技术路线而定。本系列丛书《概率统计》将深入讨论。

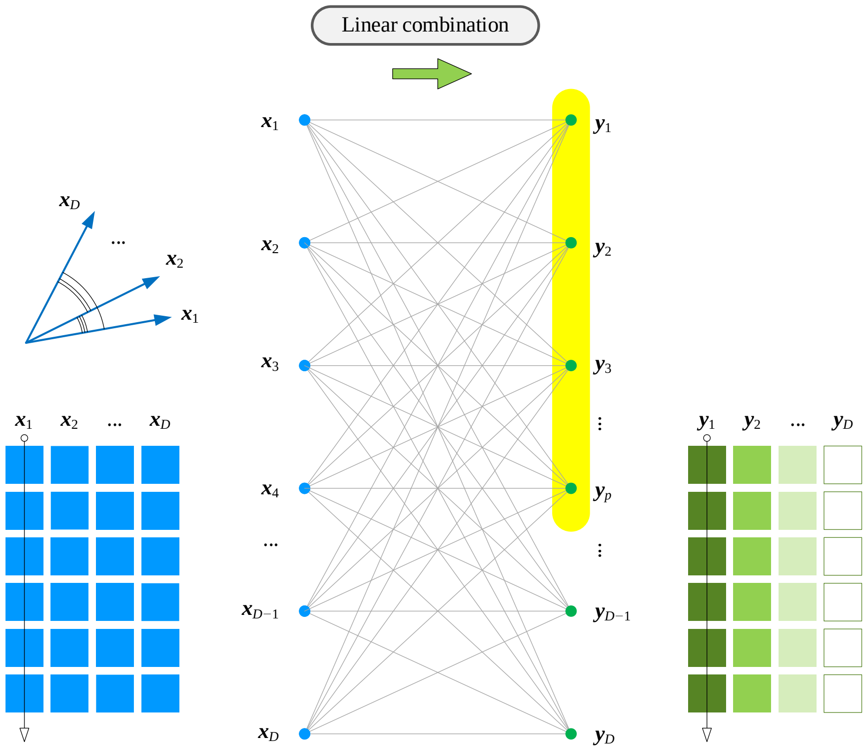


图 19. 线性组合

六条技术路线

表 1 总结了 PCA 六条主要技术路线，我们用到了奇异值分解和特征值分解两种方法。矩阵分解的对象对应六种不同矩阵，这六种矩阵都衍生自原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。

我们将在《概率统计》和《数据科学》两册从不同角度介绍这六条技术路线的区别和联系。

表 1. 六条 PCA 技术路线

对象	方法	结果
原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$	奇异值分解	$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}_X\boldsymbol{S}_X\boldsymbol{V}_X^{\mathrm{T}}$
格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	特征值分解	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}_X\boldsymbol{\Lambda}_X\boldsymbol{V}_X^{\mathrm{T}}$
中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$	奇异值分解	$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{U}_c\boldsymbol{S}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$
协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = \dfrac{\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)}{n-1}$	特征值分解	$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{\Lambda}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$

标准化数据 (z 分数) $Z_X = (X - \mathrm{E}(X))S^{-1}$ $S = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\Sigma))^{\frac{1}{2}}$	奇异值分解	$Z_X = U_Z S_Z V_Z^{\mathrm{T}}$
相关性系数矩阵 $P = S^{-1}\Sigma S^{-1}$ $S = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\Sigma))^{\frac{1}{2}}$	特征值分解	$P = V_Z \Lambda_Z V_Z^{\mathrm{T}}$

本章是"数据三部曲"的最后一章，也是本书的最后一章。

通过这一章内容，作者希望能给大家提供一个更高的视角，让大家看到代数、线性代数、几何、概率统计、微积分、优化问题之间的联系，也同时展望线性代数工具在数据科学、机器学习领域的应用。

本书作者衷心希望大家看完本书后，对线性代数的印象彻底改观。向量、矩阵、矩阵乘法、矩阵分解不再是无聊的概念，它们是解决实际问题的利器。

最后希望大家能够记住这三句话：

有数据的地方，就有向量！

有向量的地方，就有几何！

有向量的地方，肯定有空间！

想象力无边界的人，才创造不可能的事。

Those who can imagine anything, can create the impossible.

—— 艾伦·图灵 (Alan Turing) | 英国计算机科学家、数学家，人工智能之父 | 1912 ~ 1954