25 Selected Use Cases of Data

数据应用

将线性代数工具用于数据科学和机器学习实践

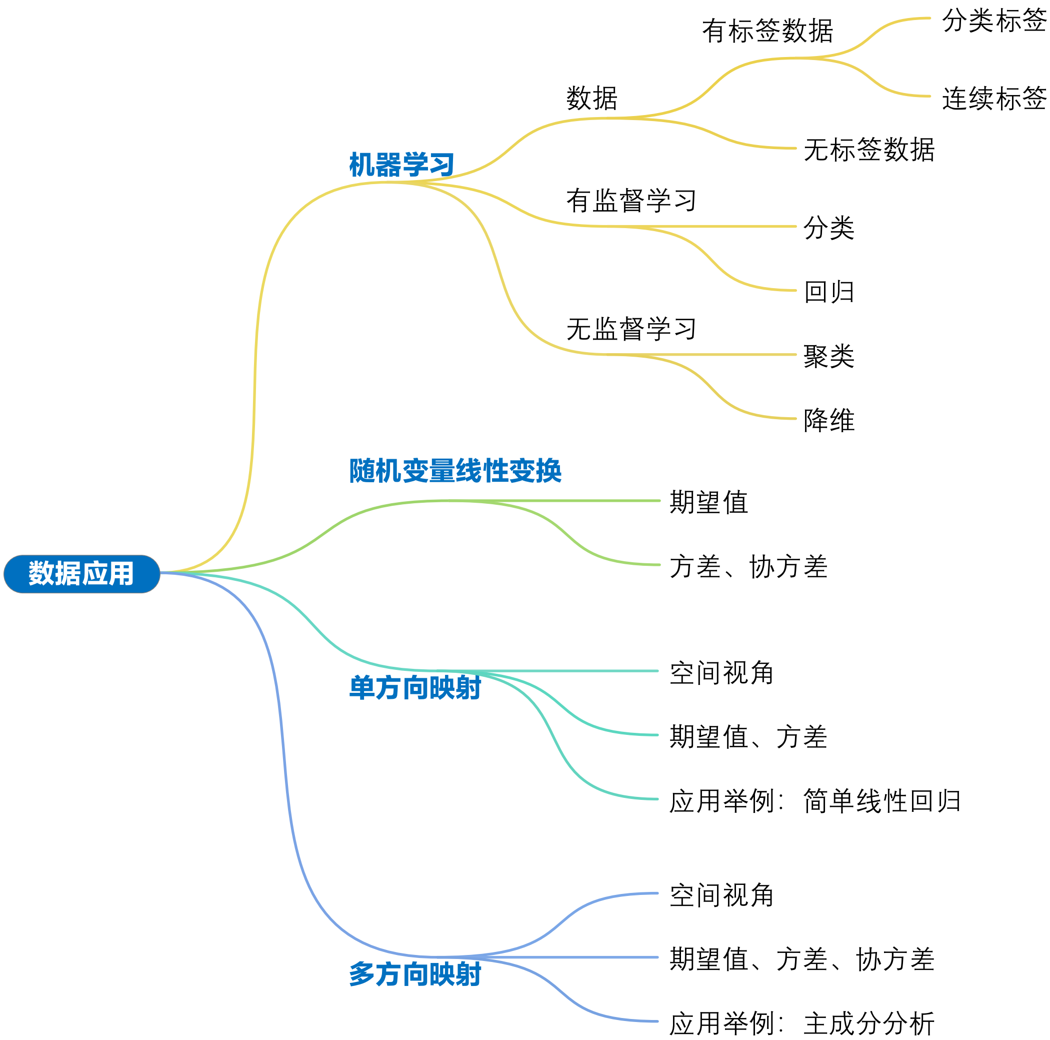
琴弦的低吟浅唱中易闻几何；

天体的星罗棋布上足见音律。

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搭建数据科学、机器学习模型。

在前两章的基础上，本章一方面引出《概率统计》有关多元统计内容，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。

而机器学习处理的数据通常为多特征数据，这就是为什么任何机器学习算法离不开线性代数工具。

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)。

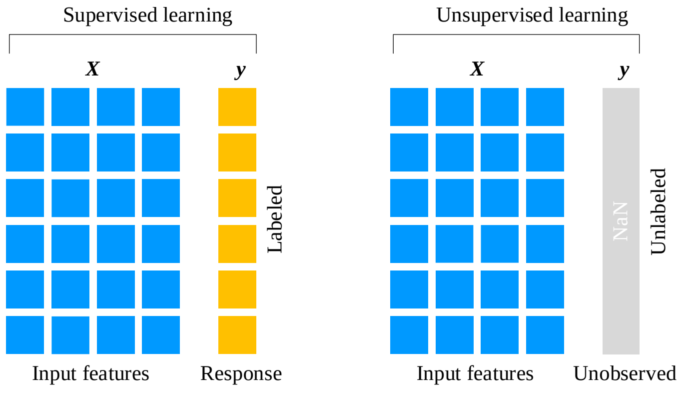


图 1. 根据有无标签分类数据

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。从时间序列 (timeseries) 角度来看，图 3 中第一列时间点起到一个时间先后排序作用。图 3 数据显然没有类似图 2 标签。

此外，本书很多应用场景中，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，得到无标签数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 4}$。

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

有标签数据：分类、连续

有标签数据中，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，就是连续标签。

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 同时期的数据就是连续标签，显然这个标签对应的数据为连续数值。

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，通过模型对新样本数据标签进行标签推断。

◀ **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。

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。

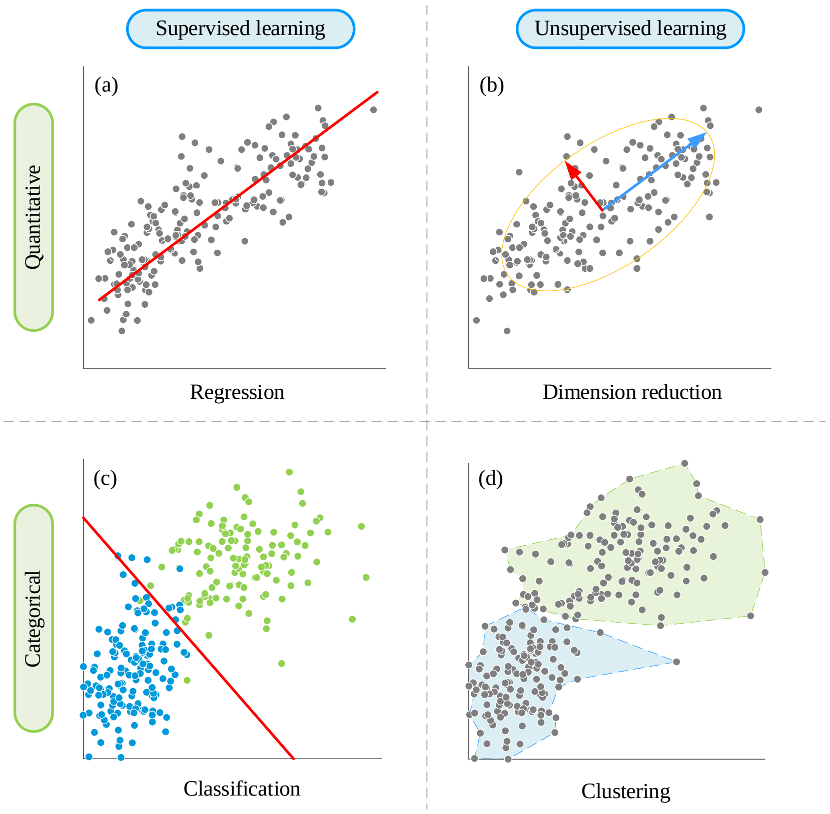


图 4. 根据数据是否有标签、标签类型细分机器学习算法

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 (b)。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)。

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。

本系列丛书《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元到多元的推手，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

本节将随机变量的线性变换，和向量的仿射变换联系起来。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。在线性代数中，上式相当于仿射变换。

(2) 中，Y 的期望和 X 的期望之间关系:

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

(2) 中，Y 和 X 方差之间关系：

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

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线性映射关系。

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、协方差存在如下关系：

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

(9) 可以写成：

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

相信大家已经在上式中看到了如下协方差矩阵：

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

也就是说，(10) 可以写成：

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

D 维随机变量

如果 D 维随机变量 $\zeta = [Z_1, Z_2, \ldots, Z_D]^{\mathrm{T}}$ 服从多元高斯分布 $N(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$，即均值为 $\mathbf{0}$，协方差矩阵为单位矩阵：

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

其中，希腊字母 ζ 读作 zeta。

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

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

⚠ 注意，χ 为列向量，列向量元素个数为 D，即 D 行。

χ 的期望值 (即质心) 为：

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

注意，我们在此约定 $\mathrm{E}(\chi)$ 为列向量。求期望值运算符 $\mathrm{E}(\bullet)$ 作用于列向量 χ，结果还是列向量。而 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 代表 $\mathrm{E}(\bullet)$ 作用于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。$\boldsymbol{X}$ 的每一列代表一个随机变量，因此 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量。

χ 的协方差为：

$$\begin{aligned} \mathrm{var}(\chi) = \boldsymbol{\Sigma}_\chi &= \mathrm{cov}(\chi, \chi) \\ &= \mathrm{E}\left(\left(\chi - \mathrm{E}(\chi)\right)\left(\chi - \mathrm{E}(\chi)\right)^{\mathrm{T}}\right) \\ &= \frac{(\chi - \boldsymbol{\mu}_\chi)(\chi - \boldsymbol{\mu}_\chi)^{\mathrm{T}}}{n} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\frac{\zeta\zeta^{\mathrm{T}}}{n}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I}_{D\times D}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} \end{aligned} \tag{16}$$

也就是说 χ 服从 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{VV})$。

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

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

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

γ 的期望值 (即质心) 为：

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

γ 的协方差为：

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

也就是说 γ 服从 $N(\boldsymbol{A\mu}, \boldsymbol{A\Sigma}_\chi\boldsymbol{A})$。

相信很多读者对本节内容已经感到云里雾里，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 … X_D，通过如下组合构造随机变量 Y:

$$Y=v_1X_1+v_2X_2+\cdots+v_DX_D \tag{20}$$

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 … v_D 相当于八种谷物的配比。

向量视角

从向量角度看 (20):

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

(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。

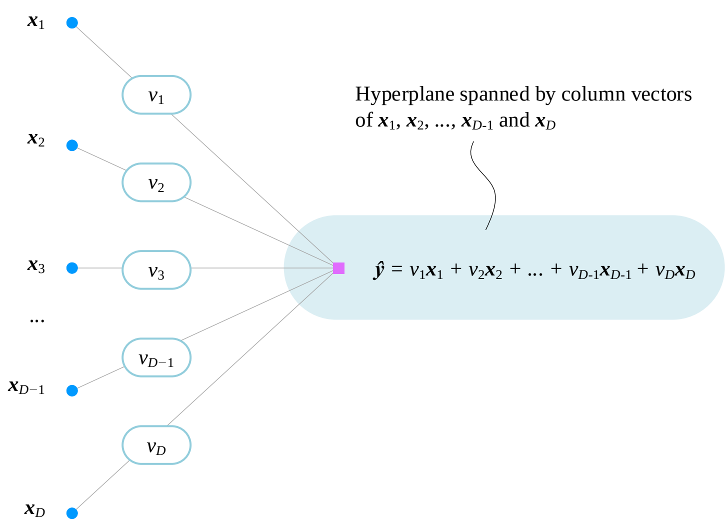


图 5. $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$ … $\boldsymbol{x}_D$ 线性组合

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 $\hat{\boldsymbol{y}}$：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \tag{22}$$

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 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 在超平面 H 中。$\hat{\boldsymbol{y}}$ 的坐标就是 $(v_1, v_2, \ldots, v_D)$。

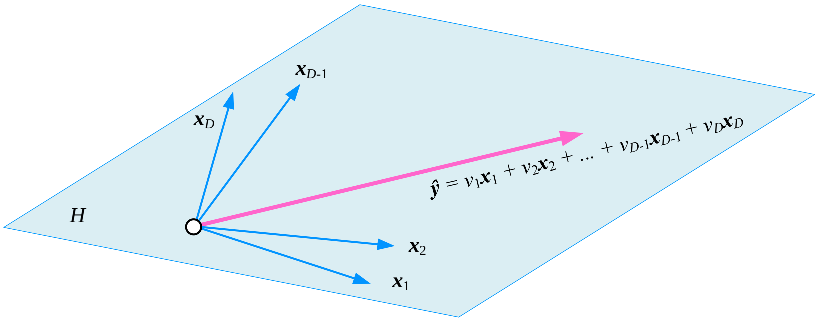


图 6. $\hat{\boldsymbol{y}}$ 在超平面 H 中

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 维坐标映射到 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v})$ 得到一个点。

请大家回忆本书第 10 章讲过的用张量积完成“二次投影”。

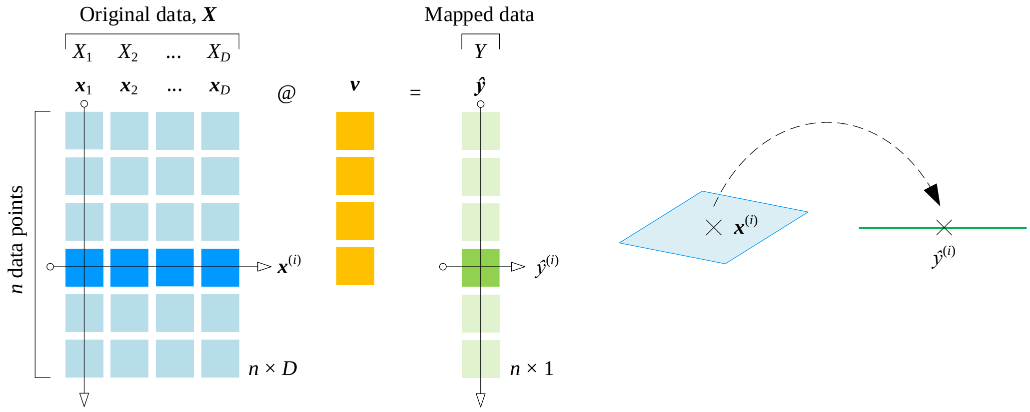


图 7. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射的行向量视角

期望值

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

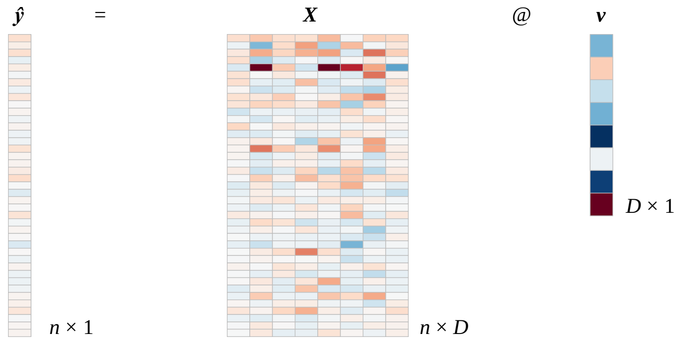


图 8. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射热图

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

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

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 $\mathrm{E}(\hat{y})$ 过程热图如图 9 所示。

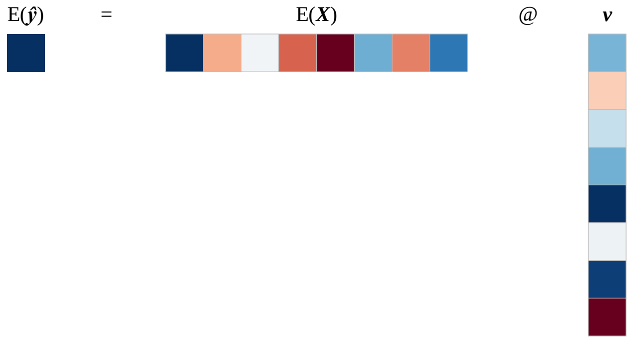


图 9. 计算 E($\hat{y}$) 矩阵运算热图

方差

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

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

图 10 所示为计算 var($\hat{y}$) 矩阵热图。

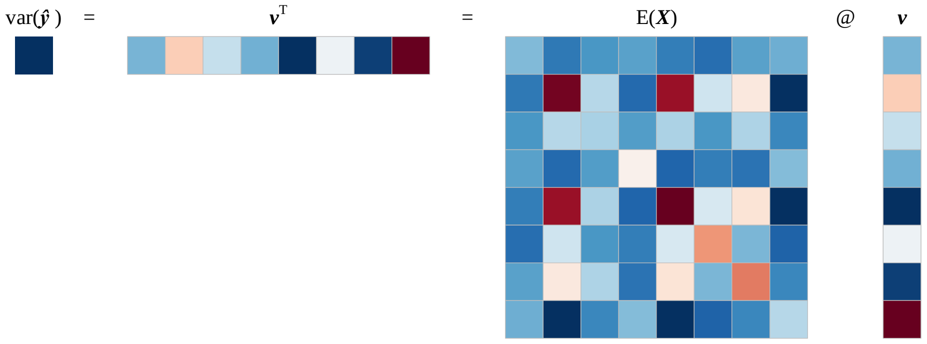


图 10. 计算 var($\hat{y}$) 矩阵运算热图

几何视角

图 11 所示为几何视角下的上述映射过程。注意，图 11 假设样本数据矩阵 X 服从二元高斯分布 $N(\mu_X, \Sigma)$，因此我们用椭圆代表它的分布。

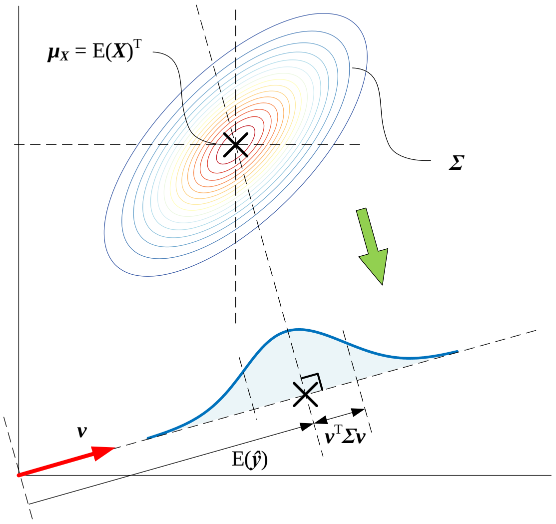


图 11. 服从二元高斯分布的数据矩阵 X 向 v 映射得到 $\hat{y}$

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)。多元线性回归模型的数学表达式如下：

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

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：

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

⚠ 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)：

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

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) 中设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 包含全 $\boldsymbol{1}$ 列向量，也就是说这个 $\boldsymbol{X}$ 有 $D+1$ 列。

线性组合

图 12 所示为多元 OLS 线性回归数据关系，图中 $\boldsymbol{y}$ 就是连续标签构成的列向量。

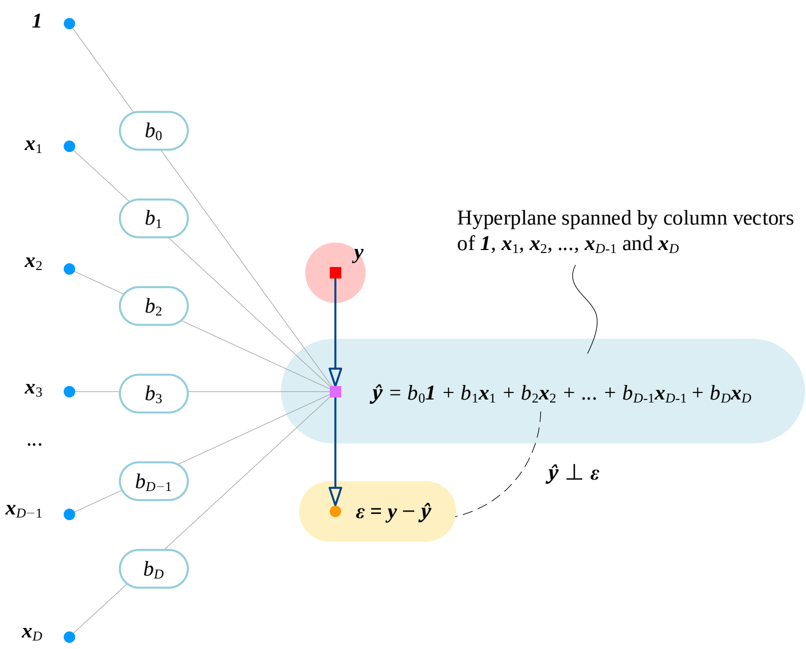


图 12. 多元 OLS 线性回归数据关系

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

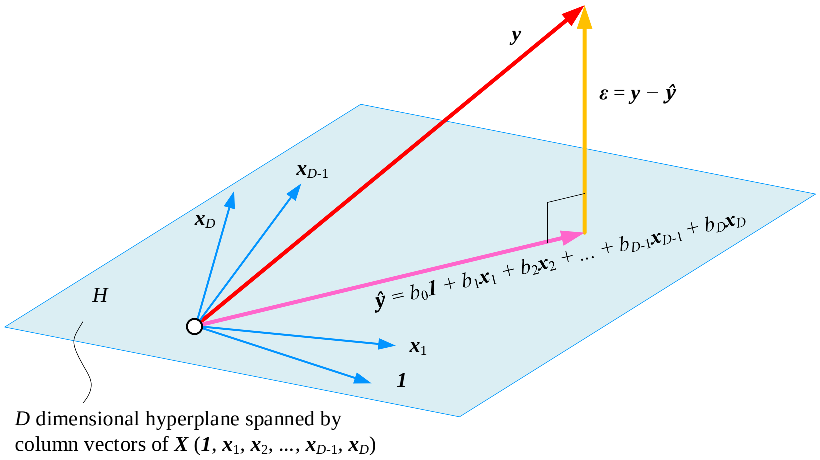


图 13. 几何角度解释多元 OLS 线性回归

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

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

如图 13 所示，残差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 垂直于 span($\boldsymbol{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$):

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

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，$\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 叫做 $\boldsymbol{X}$ 的广义逆，或伪逆。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。

QR 分解

利用 QR 分解结果求解 $\boldsymbol{b}$。把 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ 代入 (34) 得到:

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

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

下面以本节多元线性回归为例，介绍如何利用**最小二乘法** (Ordinary Least Squares, OLS)，即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：

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

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

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

因此 (38) 可以写成：

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

构造最小化问题，令目标函数 $f(\boldsymbol{b})$ 为：

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

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

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

整理 (42)，得到：

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

通过优化视角，我们也得到了(33)。

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

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

如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，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。

本系列丛书《概率统计》一册将介绍多元线性回归和条件概率之间关系。

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。

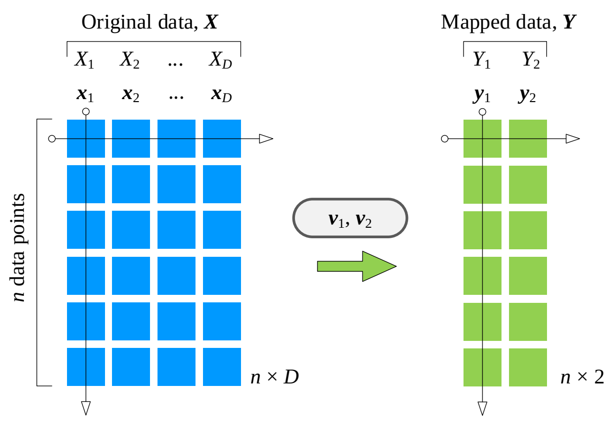


图 14. 数据朝两个方向映射

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

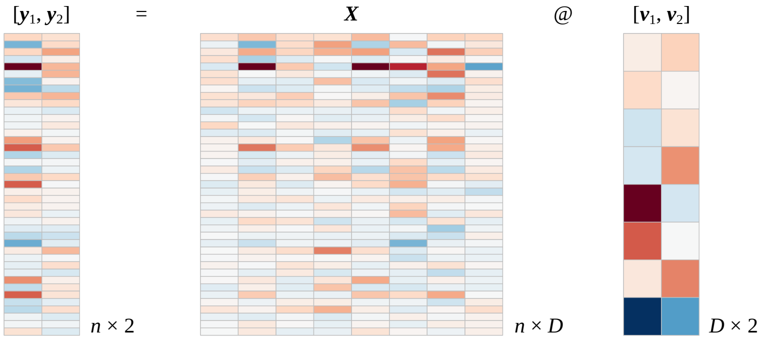


图 15. 数据 X 朝两个方向映射对应的运算热图

期望值

期望值 $[\mathrm{E}(y_1), \mathrm{E}(y_2)]$ 和期望值向量 $\mathrm{E}(X)$ 关系为：

$$
\begin{bmatrix} \mathrm{E}(y_1) & \mathrm{E}(y_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{E}(X)v_1 & \mathrm{E}(X)v_2 \end{bmatrix} = \mathrm{E}(X)V \tag{47}
$$

比较 (18) 和 (47)，两个等式不同点在于转置。(18) 中随机变量向量为列向量，而上式中 $\mathrm{E}(X)$ 为行向量。

图 16 所示为计算期望值向量 $[\mathrm{E}(y_1), \mathrm{E}(y_2)]$ 的热图。

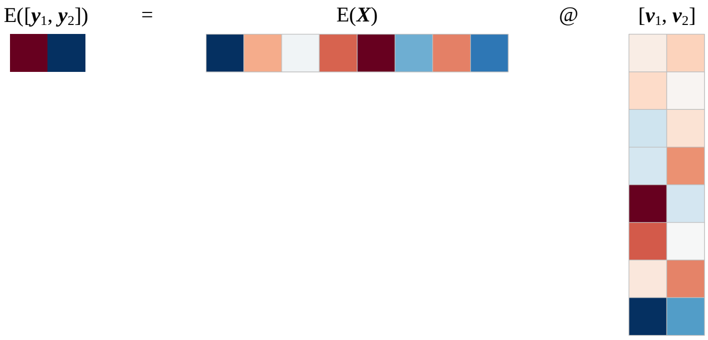


图 16. 计算期望值 $[\mathrm{E}(y_1), \mathrm{E}(y_2)]$ 矩阵运算热图

协方差

$[y_1, y_2]$ 协方差为：

$$
\Sigma_Y = \begin{bmatrix} \sigma_{Y1}^2 & \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} \\ \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} & \sigma_{Y2}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \Sigma_X \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix} = V^{\mathrm{T}} \Sigma_X V \tag{48}
$$

(19) 和 (48) 也差在转置运算。注意，上式中 V 并非方阵。

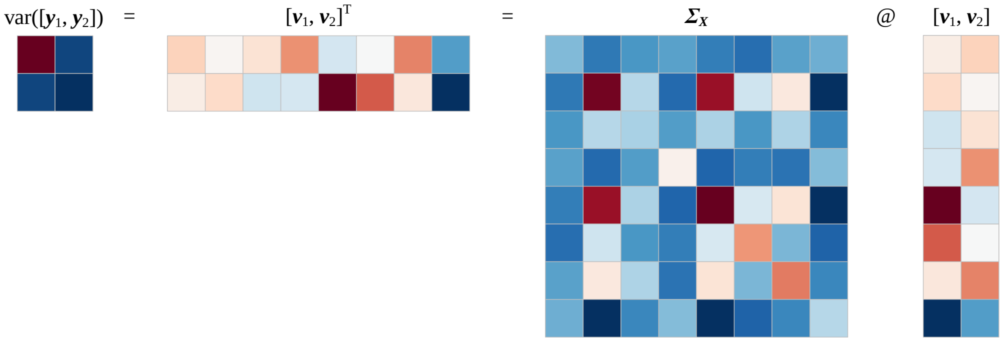


图 17. 计算 $[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$ 协方差矩阵运算热图

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。主成分分析就是多方向映射。

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。

如图 18 所示，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 $\boldsymbol{Z}_X$；
- 计算 z 分数 $\boldsymbol{X}_z$ 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；
- 将标准化数据投影到规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_p]$ 构建的新空间中，得到 $\boldsymbol{Y}_{n \times p}$。

上述 PCA 流程仅仅是众多技术路线之一，本节最后会列出六种常用 PCA 技术路线。

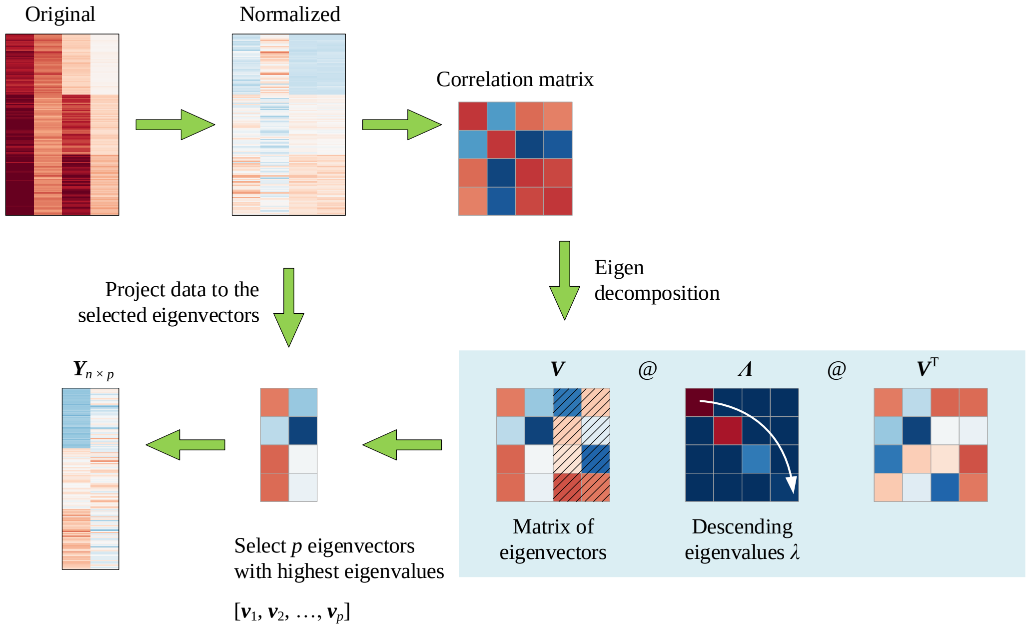


图 18. 主成分分析过程，基于特征值分解

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。这相当于把数据的质心移到原点。而标准化还包括用均方差完成"缩放"，以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 X 标准化，只需要中心化获得 X_c 即可。

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》将深入介绍这些话题。

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 $X_{n\times D}$ (X_c 或 Z_X) 线性组合组合得到 $Y_{n\times D}$ 列向量，并选取结果中 1 ~ p 列列向量作为主成分。

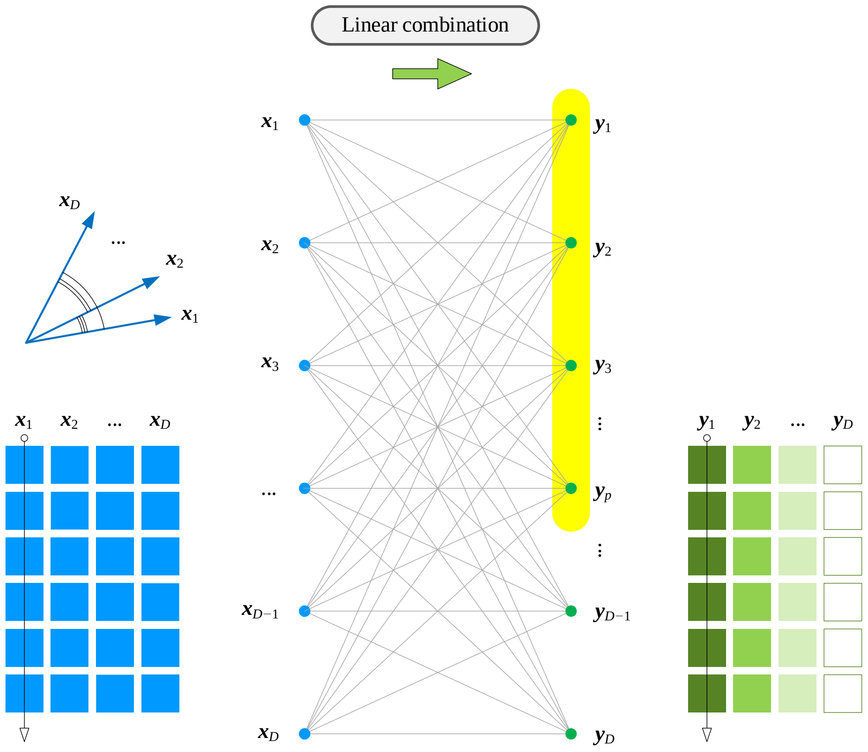


图 19. 线性组合

六条技术路线

表 1 总结了 PCA 六条主要技术路线，其中用到了奇异值分解、特征值分解两种矩阵分解工具。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 $\boldsymbol{X}$。

表 1 还通过颜色告诉我们，这六条技术路线本质上就是三种路线。比如，对原始数据 $\boldsymbol{X}$ 奇异值分解，等价于对其格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 特征值分解。

我们将在《概率统计》一册探讨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 $\boldsymbol{\Sigma}=\frac{\left(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)}{n-1}$	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) $\boldsymbol{Z}_X=\left(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)\boldsymbol{S}^{-1}$, $\boldsymbol{S}=\mathrm{diag}\left(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma})\right)^{\frac{1}{2}}$	奇异值分解	$\boldsymbol{Z}_X=\boldsymbol{U}_Z\boldsymbol{S}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$
相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{S}^{-1}$, $\boldsymbol{S}=\mathrm{diag}\left(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma})\right)^{\frac{1}{2}}$	特征值分解	$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{\Lambda}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$

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。

作者希望大家看完本册后，能对线性代数的印象彻底改观。

向量、矩阵、矩阵乘法、矩阵分解、向量空间等等不再是不知所云的线性代数概念，它们是解决实际问题无坚不摧的刀枪剑戟。

最后希望大家能够记住这几句话：

有数据的地方，就有矩阵！

有矩阵的地方，就有向量！

有向量的地方，就有几何！

有向量的地方，就有空间！

有数据的地方，肯定有统计！

让我们在《概率统计》一册，不见不散！