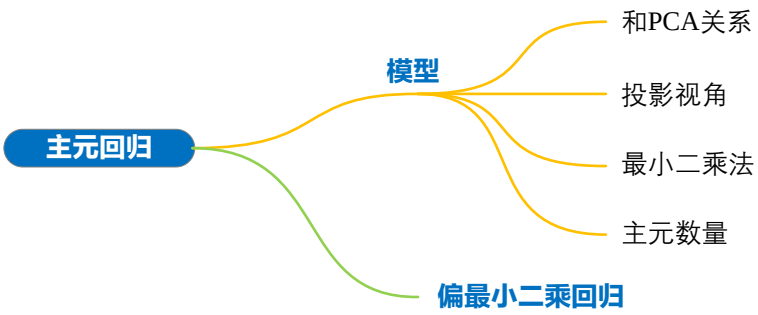
17 主元回归

Principal Components Regression

输入特征主成分分析，输出数据投影到选定主元超平面

> 大理石中我看到了天使，我拿起刻刀不停雕刻，直到还它自由。
>
> ***I saw the angel in the marble and carved until I set him free.***
>
> —— 米开朗琪罗 (Michelangelo) | 文艺复兴三杰之一 | 1475 ~ 1564

- `seaborn.heatmap()` 绘制数据热图
- `seaborn.jointplot()` 绘制联合分布和边际分布
- `seaborn.kdeplot()` 绘制 KDE 核概率密度估计曲线
- `seaborn.lineplot()` 绘制线图
- `seaborn.relplot()` 绘制散点图和曲线图
- `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数
- `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



17.1 主元回归

本节讲解主元回归 (Principal Components Regression, PCR)。主元回归类似本章前文介绍的正交回归。多元正交回归中，自变量和因变量数据 $[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}]$ 利用正交化，按照特征值从大小排列特征向量，用 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D]$ 构造一个全新超平面，$\boldsymbol{v}_{D+1}$ 垂直于超平面关系求解出正交化回归系数。

而主元回归，因变量数据 $\boldsymbol{y}$ 完全不参与正交化，即仅仅 $\boldsymbol{X}$ 参与 PCA 分解，获得特征值由大到小排列 D 个主元 $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D)$；这 D 个主元方向 $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D)$ 两两正交。选取其中 k ($k < D$) 个特征值较大主元 $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_k)$，构造超平面；最后一步，用最小二乘法将因变量 $\boldsymbol{y}$ 投影在超平面上。

图 1 提供一个例子，$\boldsymbol{X}$ 有三个维度数据，$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3]$。首先对 $\boldsymbol{X}$ 列向量 PCA 分解，获得正交化向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$。然后，选取作为 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 主元，构造一个平面；用最小二乘法，将因变量 $\boldsymbol{y}$ 投影在平面上，获得回归方程。再次请大家注意，主元回归因变量 $\boldsymbol{y}$ 数据并不参与正交化；另外，主元回归选取前 P ($P < D$) 个特征值较大主元 $\boldsymbol{V}_{D\times P}$ $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_P)$，构造一个超平面。

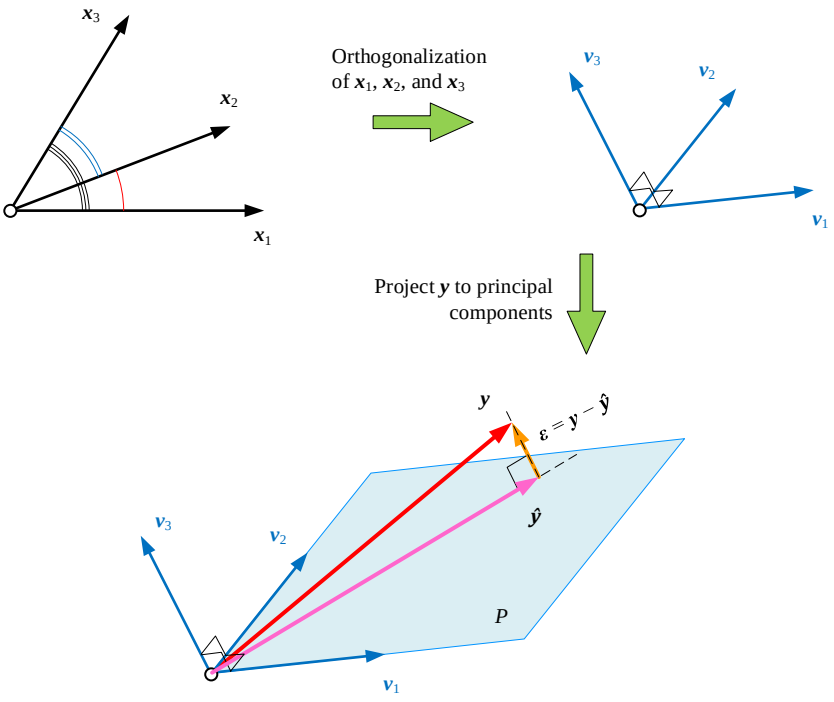


图 1. 主元回归原理

17.2 原始数据

下载如图 2 所示为归一化股价数据，将其转化为日收益率，作为数据 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$；其中 S&P 500 日收益率为数据 $\boldsymbol{y}$，其余股票日收益率作为数据 $\boldsymbol{X}$。图 3 所示为数据 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的热图。

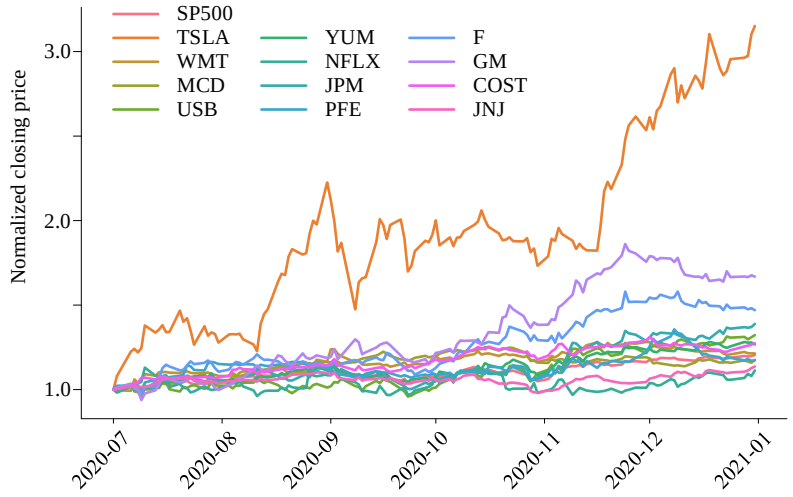


图 2. 股价走势，归一化数据

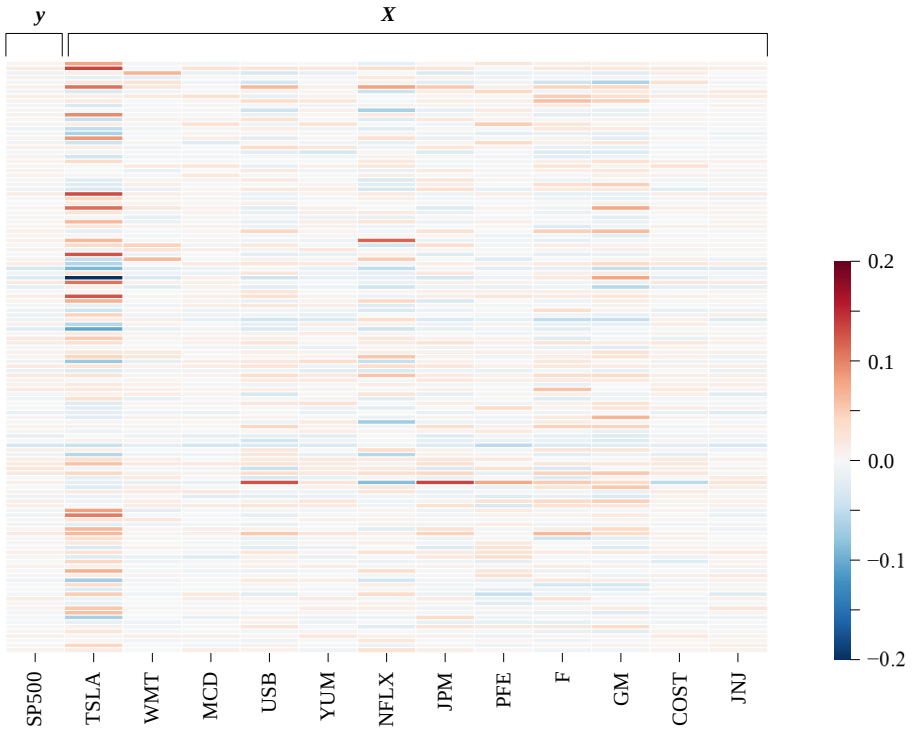


图 3. 数据 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的热图

图 4 几个分图给出的是数据 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的 KDE 分布。

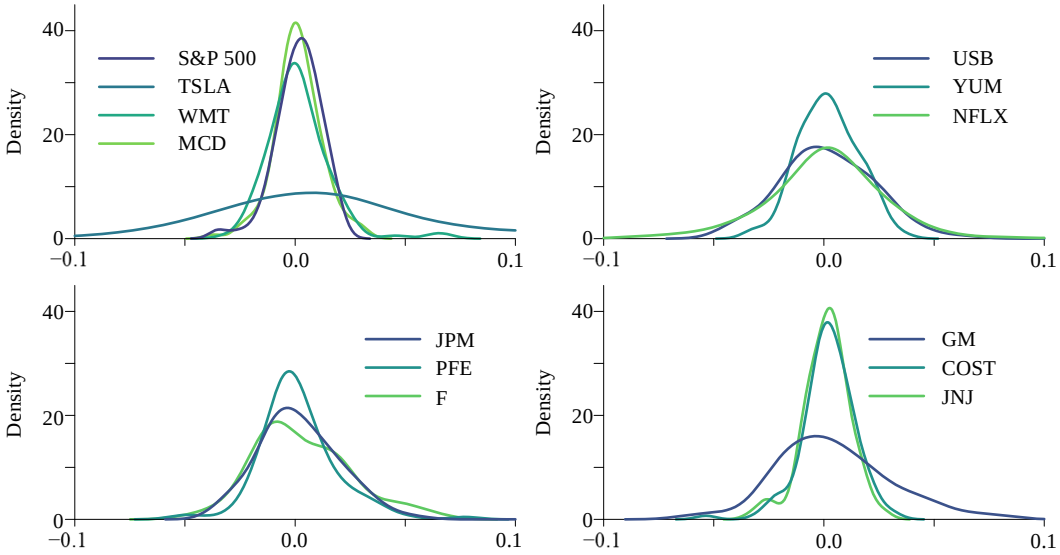


图 4. 数据 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的 KDE 分布

17.3 主成分分析

对数据 $\boldsymbol{X}$ 进行主成分分析，可以获得如表 1 所示的前四个主成分 $\boldsymbol{V}_{D\times p}$ 参数。可以利用热图和线图对 $\boldsymbol{V}_{D\times p}$ 进行可视化，如图 5 所示。

表 1. 前四个主成分

	PC1	PC2	PC3	PC4
TSLA	-0.947	-0.004	0.256	0.121
WMT	-0.073	0.016	-0.193	0.066
MCD	-0.056	0.076	-0.111	0.115
USB	-0.021	0.503	0.122	-0.502
YUM	-0.044	0.188	-0.037	0.057
NFLX	-0.281	-0.133	-0.776	-0.448
JPM	-0.019	0.442	0.167	-0.425
PFE	-0.045	0.174	0.187	0.118
F	-0.004	0.457	-0.179	0.178
GM	0.007	0.491	-0.360	0.518
COST	-0.096	-0.027	-0.203	0.114
JNJ	-0.042	0.108	0.021	0.066

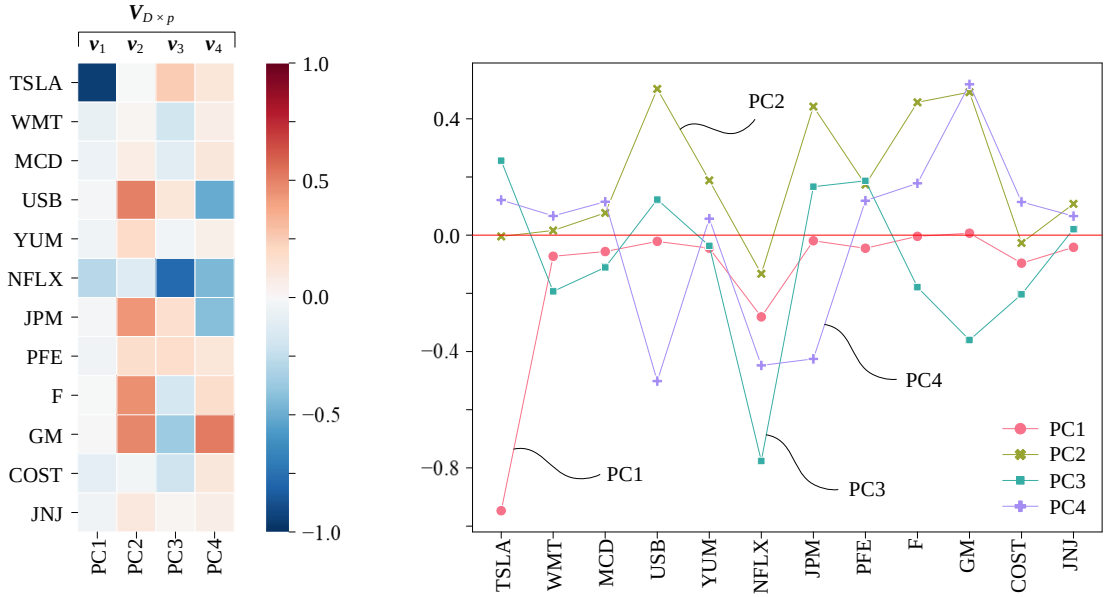


图 5. 前四个主成分可视化

图 5 所示 $\boldsymbol{V}_{D\times p}$ 两两正交，具有如下性质：

$$\boldsymbol{V}_{D\times p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_{D\times p}=\boldsymbol{I}_{p\times p} \tag{1}$$

图 6 所示为 (1) 计算热图。

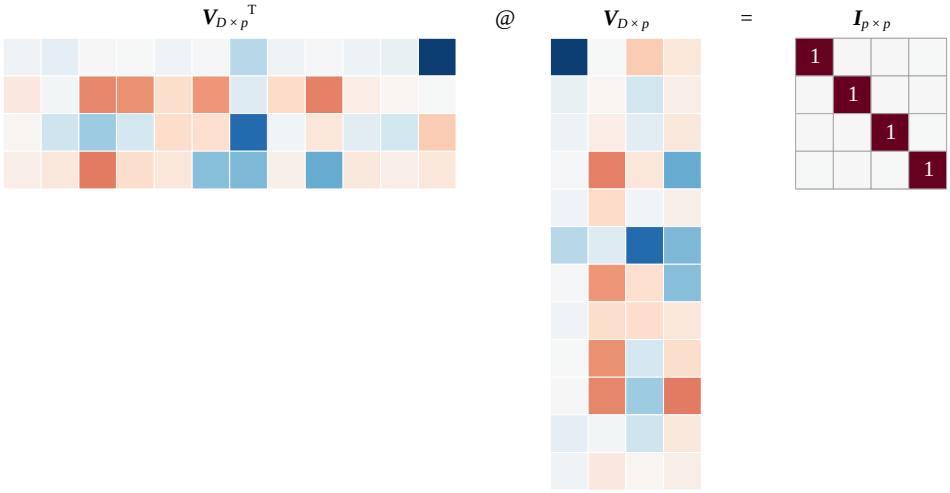


图 6. $\boldsymbol{V}_{D\times p}$ 两两正交

17.4 数据投影

如图 7 所示，原始数据 $\boldsymbol{X}$ 在 p 维正交空间 $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p)$ 投影得到数据 $\boldsymbol{Z}_{n\times p}$：

$$\boldsymbol{Z}_{n\times p} = \boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}_{D\times p} \tag{2}$$

图 8 所示为 $\boldsymbol{Z}_{n\times p}$ 数据热图。

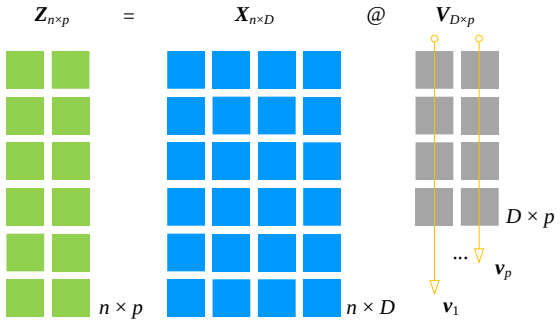


图 7. PCA 分解部分数据关系

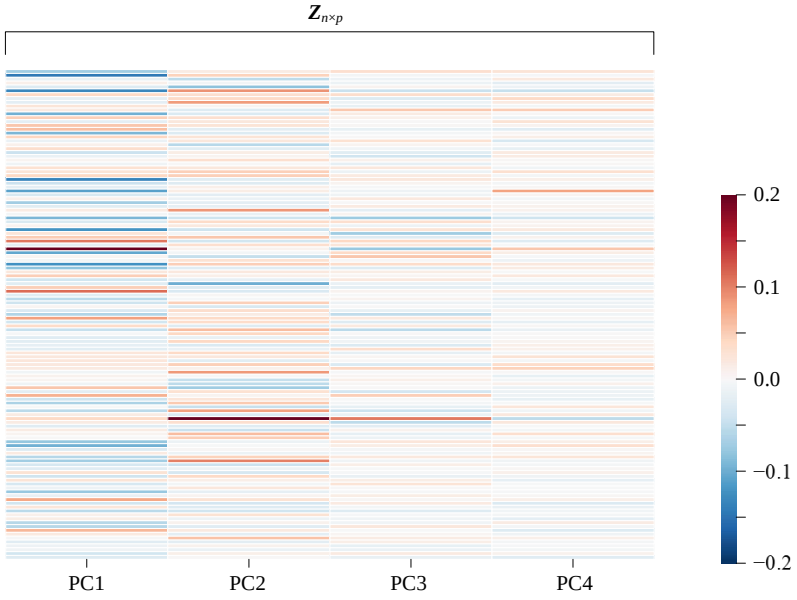


图 8. 前四个主成分数据

图 9 所示为 $\boldsymbol{Z}_{n\times p}$ 每列主成分数据的分布情况。容易注意到，第一主成分数据解释最大方差。

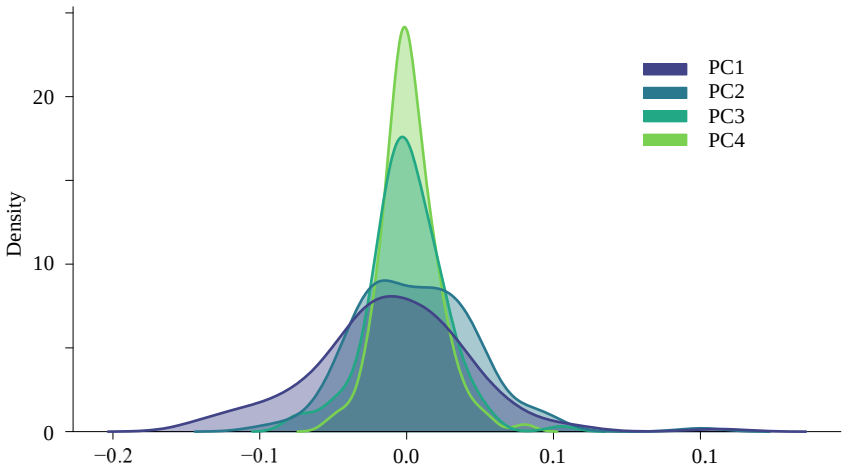


图 9. 前四个主成分数据分布

图 10 所示为 $\boldsymbol{Z}_{n\times p}$ 数协方差矩阵热图。

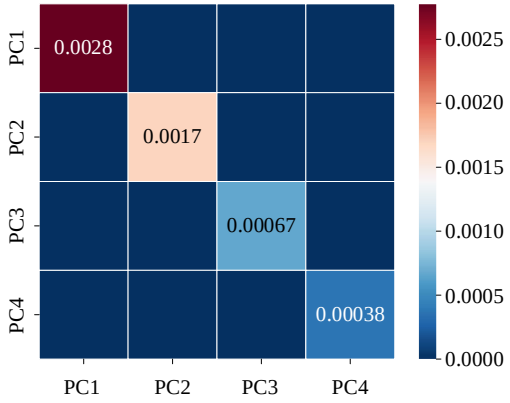


图 10. 前四个主元的协方差矩阵

前四个主成分对应的奇异值分别为：

$$s_1 = 0.5915, \quad s_2 = 0.4624, \quad s_3 = 0.2911, \quad s_4 = 0.2179 \tag{3}$$

所对应的特征值：

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{s_1^2}{n-1} = \frac{0.5915^2}{126} = 0.0028 \\
\lambda_2 &= \frac{s_2^2}{n-1} = \frac{0.4624^2}{126} = 0.0017 \\
\lambda_3 &= \frac{s_3^2}{n-1} = \frac{0.2911^2}{126} = 0.00067 \\
\lambda_4 &= \frac{s_4^2}{n-1} = \frac{0.2179^2}{126} = 0.00038
\end{aligned} \tag{4}$$

这四个特征值对应图 10 热图对角线元素。如图 11 所示陡坡图，前四个主元解释了 84.87%方差。

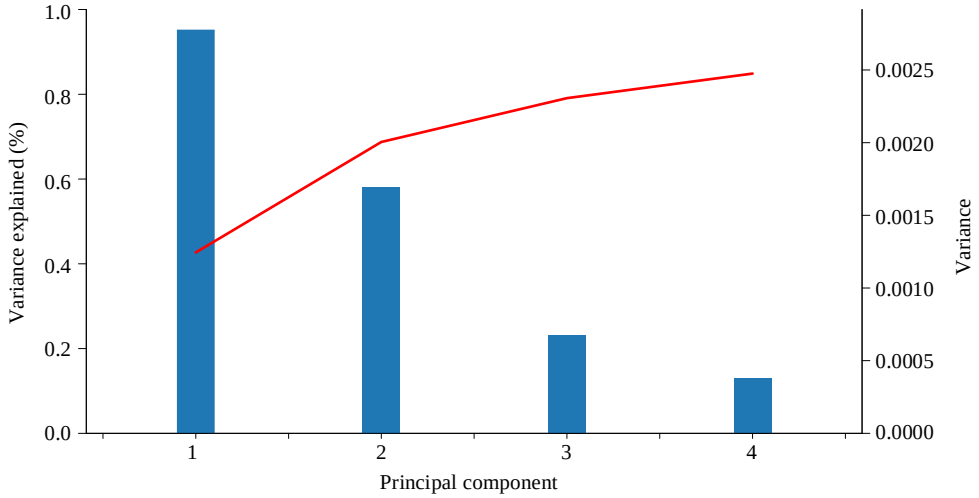


图 11. 陡坡图

转化矩阵 $\boldsymbol{Z}_{n\times P}$ 仅包含 $\boldsymbol{X}$ 部分信息，两者信息之间差距通过下式计算获得，如图 12：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \boldsymbol{Z}_{n\times P}\left(\boldsymbol{V}_{D\times P}\right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{E}_{n\times D} \tag{5}$$

图 12. $\boldsymbol{Z}_{n\times P}$ 还原数据和 $\boldsymbol{X}$ 信息差距

17.5 最小二乘法

主元回归最后一步，用最小二乘法把因变量 $\boldsymbol{y}$ 投影在数据 $\boldsymbol{Z}_{n\times P}$ 构造空间中：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = b_{Z,1}\boldsymbol{z}_1 + b_{Z,2}\boldsymbol{z}_2 + \ldots + b_{Z,P}\boldsymbol{z}_P \tag{6}$$

写成矩阵运算：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{Z,1} \\ b_{Z,2} \\ \vdots \\ b_{Z,P} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Z}_{n\times P}\boldsymbol{b}_Z \tag{7}$$

图 13 所示为上述运算过程。

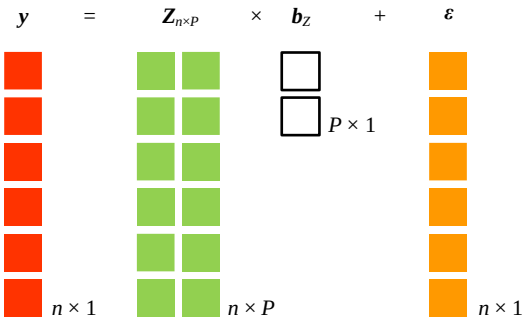


图 13. 最小二乘法回归获得 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Z}_{n\times P}\boldsymbol{b}_Z + \boldsymbol{\varepsilon}$

根据本书前文讲解内容最小二乘法解，获得 $\boldsymbol{b}_Z$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}_Z &= \left(\boldsymbol{Z}_{n\times P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}_{n\times P}\right)^{-1}\boldsymbol{Z}_{n\times P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \left(\left(\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}_{D\times P}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}_{D\times P}\right)\right)^{-1}\left(\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}_{D\times P}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{aligned} \tag{8}$$

如图 13 所示，$\boldsymbol{y}$、拟合数据 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 和数据 $\boldsymbol{Z}_{n\times P}$ 关系如下：

$$\begin{cases} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{Z}_{n\times P}\boldsymbol{b}_Z + \boldsymbol{\varepsilon} \\ \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{Z}_{n\times P}\boldsymbol{b}_Z \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \end{cases} \tag{9}$$

图 14 所示为最小二乘法线性回归结果。

系数向量 $\boldsymbol{b}_Z$ 结果如下：

$$\boldsymbol{b}_Z = \begin{bmatrix} -0.1039 & 0.1182 & -0.0941 & -0.0418 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{10}$$

OLS Regression Results

Dep. Variable:	SP500	R-squared:	0.552
Model:	OLS	Adj. R-squared:	0.537
Method:	Least Squares	F-statistic:	37.60
Date:	XXXXXXXXXX	Prob (F-statistic):	1.82e-20
Time:	XXXXXXXXXX	Log-Likelihood:	450.53
No. Observations:	127	AIC:	-891.1
Df Residuals:	122	BIC:	-876.8
Df Model:	4		
Covariance Type:	nonrobust		

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
const	-0.0003	0.001	-0.520	0.604	-0.002	0.001
PC1	-0.1039	0.012	-8.647	0.000	-0.128	-0.080
PC2	0.1182	0.015	7.689	0.000	0.088	0.149
PC3	-0.0941	0.024	-3.854	0.000	-0.142	-0.046
PC4	-0.0418	0.033	-1.283	0.202	-0.106	0.023

Omnibus:	9.631	Durbin-Watson:	2.087
Prob(Omnibus):	0.008	Jarque-Bera (JB):	21.795
Skew:	0.092	Prob(JB):	1.85e-05
Kurtosis:	5.021	Cond. No.	51.7

图 14. 最小二乘法线性回归结果

下面将系数向量 $\boldsymbol{b}_Z$ 利用 $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_P)$ 转换为 $\boldsymbol{b}_X$，具体过程图 15 所示：

$$\boldsymbol{b}_X = \boldsymbol{V}_{D\times P}\boldsymbol{b}_Z = \boldsymbol{V}_{D\times P}\left(\boldsymbol{Z}_{n\times P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}_{n\times P}\right)^{-1}\boldsymbol{Z}_{n\times P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{11}$$

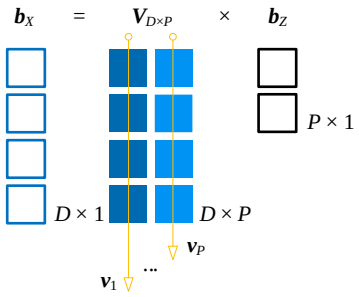


图 15. $\boldsymbol{b}_z$ 和 $\boldsymbol{b}_x$ 之间转换关系

系数 $\boldsymbol{b}_X$ 可以通过下式计算得到：

$$\boldsymbol{b}_X = \boldsymbol{V}_{D\times P}\boldsymbol{b}_Z = \boldsymbol{V}_{D\times P}\begin{bmatrix}-0.1039 & 0.1182 & -0.0941 & -0.0418\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

图 16 所示为系数 $\boldsymbol{b}_X$ 直方图。

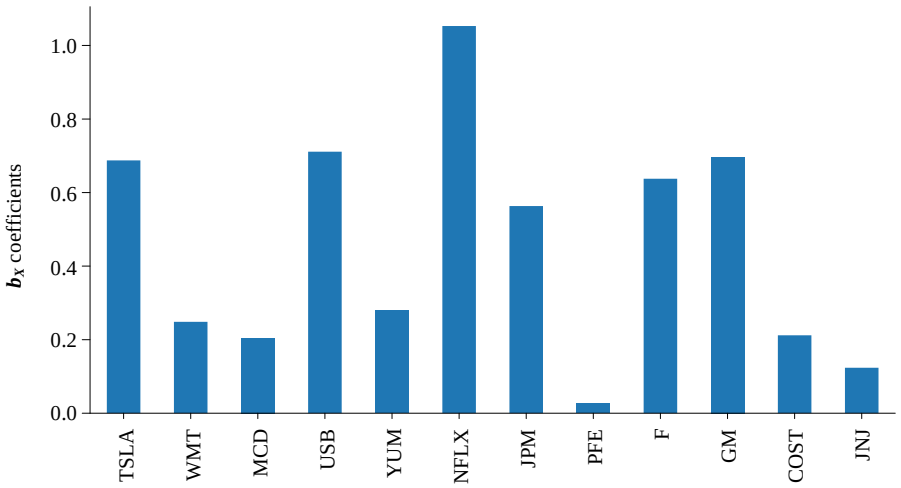


图 16. 系数 $\boldsymbol{b}_X$ 直方图

这样获得 $\boldsymbol{y}$、拟合数据 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 和数据 $\boldsymbol{X}$ 之间关系，如图 17 所示：

$$\begin{cases} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}_X + \boldsymbol{\varepsilon} \\ \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}_X \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \end{cases} \tag{13}$$

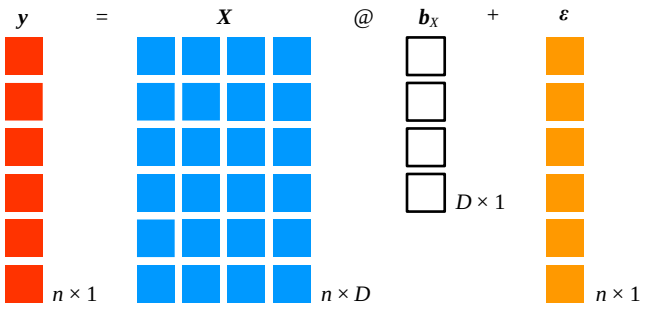


图 17. $\boldsymbol{y}$ 和数据 $\boldsymbol{X}$ 之间回归方程

计算截距项系数 b_0：

$$b_0 = \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) - \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \boldsymbol{b}_X \tag{14}$$

计算截距项系数 b_0：

$$\begin{aligned} b_0 &= \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) - \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \boldsymbol{b}_X \\ &= -0.00034057 \end{aligned} \tag{15}$$

最后主元回归函数可以通过下式计算得到：

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_D x_D = b_0 + \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_D \end{bmatrix} = b_0 + \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix} \boldsymbol{b}_X$$

$$= b_0 + \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{bmatrix} \boldsymbol{V}_{D\times P} \boldsymbol{b}_Z \tag{16}$$

$$= b_0 + \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{z1} \\ b_{z2} \\ b_{z3} \\ b_{z4} \end{bmatrix}$$

图 18 展示主元回归计算过程数据关系。

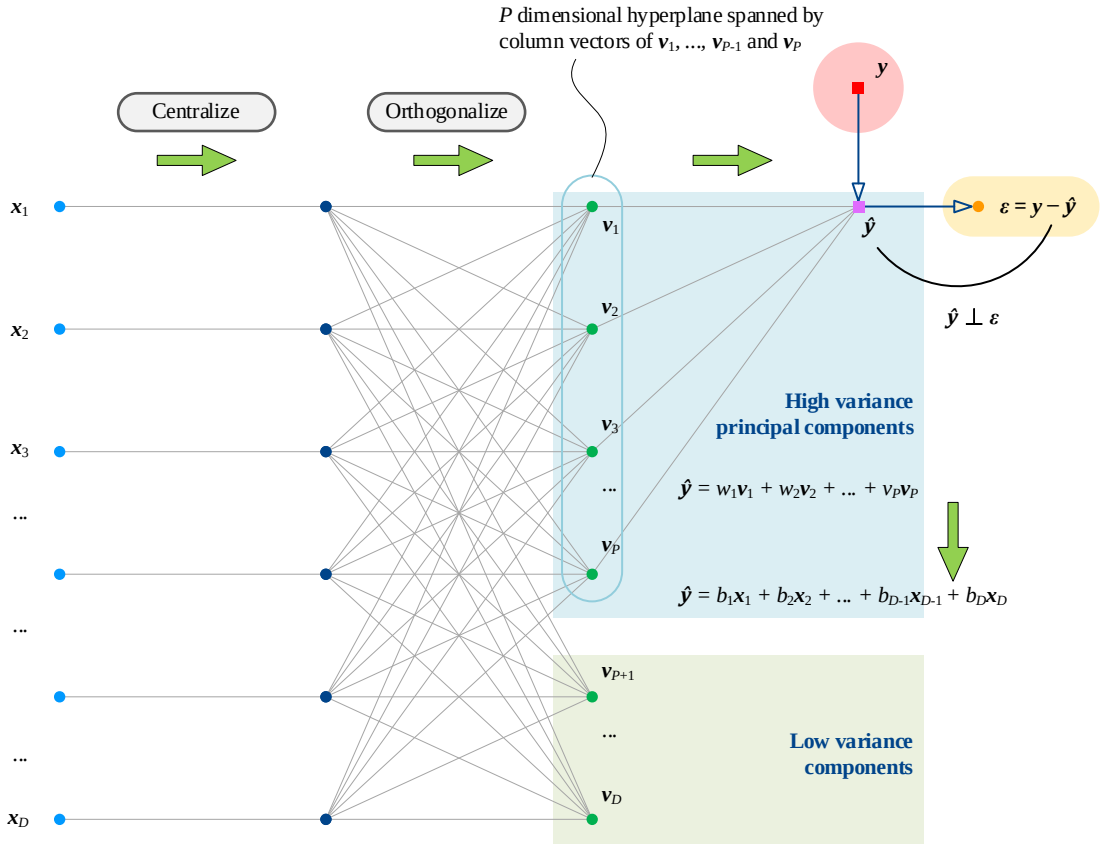


图 18. 主元回归数据关系

17.6 改变主元数量

对于主元回归，当改变参与最小二乘法线性回归的主元数量时，线性回归结果会有很大变化；本节将重点介绍主元数量对主元回归的影响。

图 19 所示为主元数量从 4 增加到 9 时，累计已释方差和百分比变化情况。图 20 和图 21 展示两个视角观察参与主元回归主元数量对于系数的影响。

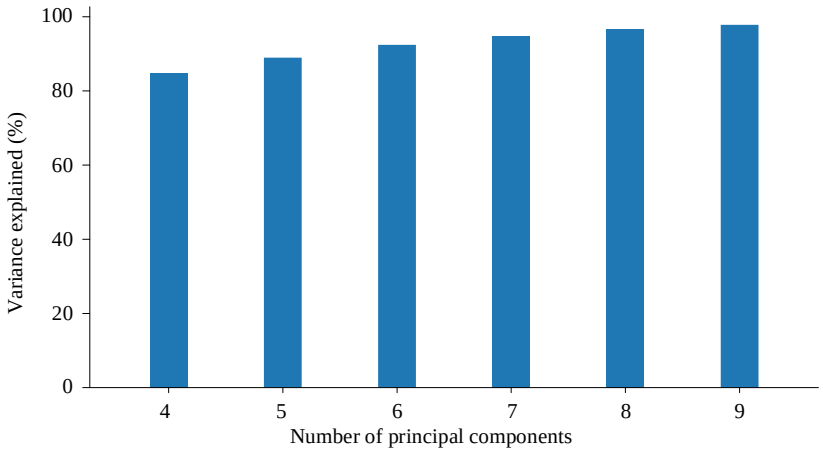


图 19. 主元数量对累计已释方差和百分比

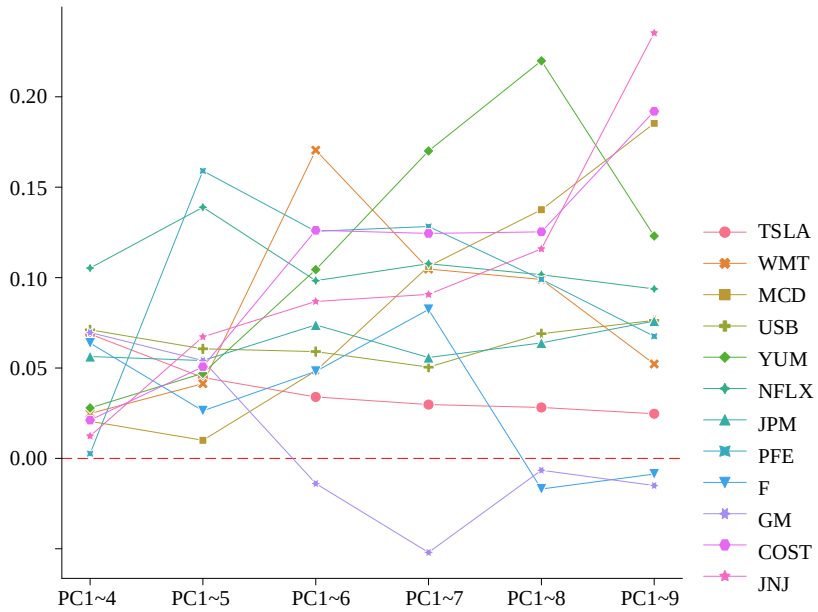


图 20. 参与主元回归主元数量对于系数的影响

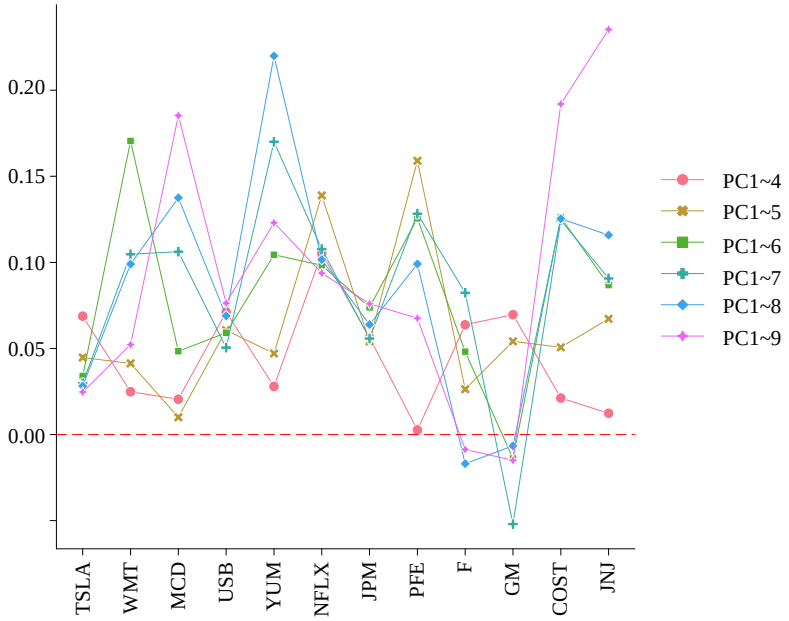


图 21. 参与主元回归主元数量对于系数的影响，第二视角

Bk6_Ch17_01.py 完成主元回归运算图像。

17.7 偏最小二乘回归

本章最后介绍偏最小二乘回归 (partial least squares regression, PLS)。类似主元回归，偏最小二乘回归也是一种降维回归方法。PLS 在降低自变量维度的同时，建立自变量和因变量之间的线性关系模型，因此常被用于处理高维数据分析和建立多元回归模型。

不同于主元回归，偏最小二乘回归利用因变量数据 $\boldsymbol{y}$ 和自变量数据 $\boldsymbol{X}$ (形状为 $n \times q$) 之间相关性构造一个全新空间。$\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 投影到新空间来确定一个线性回归模型。另外一个不同点，偏最小二乘回归采用迭代算法 (iterative algorithm)。

偏最小二乘法处理多元因变量，为方便区分，一元因变量被定义为 $\boldsymbol{y}$ (形状为 $n \times 1$)，多元因变量被定义为 $\boldsymbol{Y}$ (形状为 $n \times p$)。偏最小二乘回归迭代方法很多，本节介绍较为经典一元因变量对多元自变量迭代算法。迭代算法主要由七步构成；其中，第二步到第七步为循环。

第一步

获得中心化自变量数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 和因变量数据向量 $\boldsymbol{y}^{(0)}$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}^{(0)} &= \left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{(0)} & \boldsymbol{x}_2^{(0)} & \cdots & \boldsymbol{x}_q^{(0)} \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{y}^{(0)} &= \boldsymbol{y} - \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) = \left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{l}\boldsymbol{l}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{y} \end{aligned} \tag{17}$$

偏最小二乘回归是迭代运算，上标 (0) 代表迭代代次。

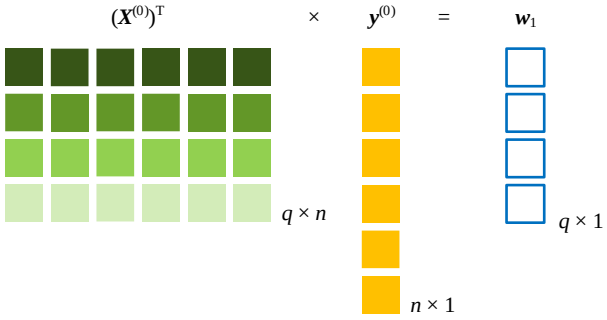


图 22. 计算权重系数列向量 $\boldsymbol{w}_1$

第二步

计算 $\boldsymbol{y}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 列向量相关性，构建权重系数列向量 $\boldsymbol{w}_1$：

$$\boldsymbol{w}_1 = \begin{bmatrix} \mathrm{cov}\left(\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \boldsymbol{y}^{(0)}\right) \\ \mathrm{cov}\left(\boldsymbol{x}_2^{(0)}, \boldsymbol{y}^{(0)}\right) \\ \vdots \\ \mathrm{cov}\left(\boldsymbol{x}_q^{(0)}, \boldsymbol{y}^{(0)}\right) \end{bmatrix} = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} \left(\boldsymbol{x}_1^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)} \\ \left(\boldsymbol{x}_2^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)} \\ \vdots \\ \left(\boldsymbol{x}_q^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)} \end{bmatrix} = \left(\boldsymbol{X}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)} \tag{18}$$

其中，列向量 $\boldsymbol{w}_1$ 行数为 q 行。

图 22 所示获得权重系数列向量计算过程；过程也可看做是一个投影运算，即将 $(\boldsymbol{X}^{(0)})^{\mathrm{T}}$ 投影到 $\boldsymbol{y}^{(0)}$。

为方便计算，将列向量 $\boldsymbol{w}_1$ 单位化：

$$\boldsymbol{w}_1 = \frac{\boldsymbol{w}_1}{\|\boldsymbol{w}_1\|} = \begin{bmatrix} w_{1,1} \\ w_{2,1} \\ \vdots \\ w_{q,1} \end{bmatrix} \tag{19}$$

列向量 $\boldsymbol{w}_1$ 每个元素大小代表着 $\boldsymbol{y}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 列向量相关性。

第三步，利用上一步获得权重系数列向量 $\boldsymbol{w}_1$ 和 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 构造偏最小二乘回归主元向量，$\boldsymbol{z}_1$：

$$\boldsymbol{z}_1 = w_{1,1}\boldsymbol{x}_1 + w_{2,1}\boldsymbol{x}_2 + \cdots + w_{q,1}\boldsymbol{x}_q = \boldsymbol{X}^{(0)}\boldsymbol{w}_1 \tag{20}$$

图 23 所示为计算偏最小二程回归主元列向量 z_1。这样理解，主元列向量 z_1 为 $X^{(0)}$ 列向量通过加权构造；$y^{(0)}$ 和 $X^{(0)}$ 某一列向量相关性越高，这一列获得权重越高，在主元列向量 z_1 成分越高。同样，过程等价于投影过程，即 $X^{(0)}$ 投影到 w_1。

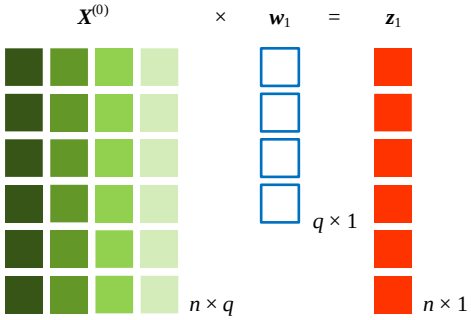


图 23. 计算偏最小二程回归主元列向量 z_1

将自变量数据矩阵 $X^{(0)}$ 和因变量数据向量 $y^{(0)}$投影到主元 z_1 方向上。

第四步

把自变量数据矩阵 $X^{(0)}$投影到主元列向量 z_1 上，获得系数向量 v_1。先以 $X^{(0)}$第一列解释投影过程。

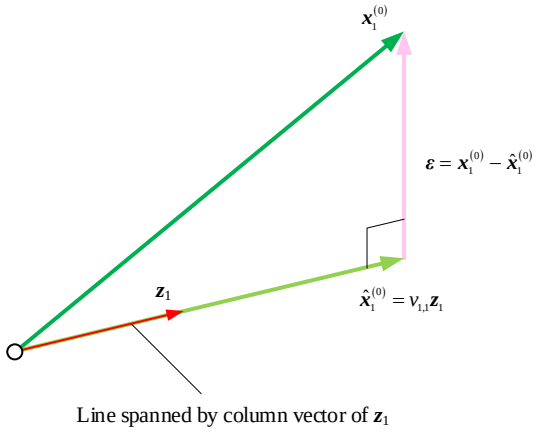


图 24. $X^{(0)}$第一列投影在主元列向量 z_1

如图 24 所示，将 $X^{(0)}$ 第一列投影到主元列向量 z_1，得到 $\hat{x}_1^{(0)}$：

$$\hat{x}_1^{(0)} = v_{1,1} z_1 \tag{21}$$

残差 ε 则垂直于主元列向量 z_1，计算获得系数 $v_{1,1}$：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{z}_1 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_1^{(0)} - \hat{\boldsymbol{x}}_1^{(0)}\right) = \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_1^{(0)} - v_{1,1}\boldsymbol{z}_1\right) = 0 \\ &\Rightarrow \quad v_{1,1} = \frac{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1^{(0)}}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} = \frac{\left(\boldsymbol{x}_1^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} \end{aligned} \tag{22}$$

上式说明偏最小二乘法回归核心仍是 OLS。同样，把 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 第二列投影在主元列向量 $\boldsymbol{z}_2$，计算得到系数 $v_{2,1}$：

$$v_{2,1} = \frac{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2^{(0)}}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} = \frac{\left(\boldsymbol{x}_2^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} \tag{23}$$

类似，获得 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 每列投影在主元列向量 $\boldsymbol{z}_2$ 系数，这些系数一个列向量 $\boldsymbol{v}_1$。下式计算列向量 $\boldsymbol{v}_1$：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} v_{1,1} \\ v_{2,1} \\ \vdots \\ v_{q,1} \end{bmatrix} = \frac{\left(\boldsymbol{X}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} = \frac{\left(\boldsymbol{X}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{(0)}\boldsymbol{w}_1}{\boldsymbol{w}_1^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{(0)}\boldsymbol{w}_1} = \frac{\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}\boldsymbol{w}_1}{\boldsymbol{w}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}\boldsymbol{w}_1} \tag{24}$$

第五步

根据最小二乘回归原理，利用列向量 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_1$ 估算，并到拟合矩阵 $\hat{\boldsymbol{X}}^{(0)}$：

$$\hat{\boldsymbol{X}}^{(0)} = \boldsymbol{z}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}^{(0)}\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \tag{25}$$

原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和拟合数据矩阵 $\hat{\boldsymbol{X}}^{(0)}$ 之差便是残差矩阵 $\boldsymbol{E}^{(0)}$：

$$\boldsymbol{E}^{(0)} = \boldsymbol{X}^{(0)} - \hat{\boldsymbol{X}}^{(0)} = \boldsymbol{X}^{(0)} - \boldsymbol{X}^{(0)}\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}^{(0)}\left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{w}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\right) \tag{26}$$

而残差矩阵 $\boldsymbol{E}^{(0)}$ 便是进入迭代过程第二步数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(1)}$：

$$\boldsymbol{X}^{(1)} = \boldsymbol{E}^{(0)} = \boldsymbol{X}^{(0)} - \hat{\boldsymbol{X}}^{(0)} = \boldsymbol{X}^{(0)}\left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{w}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\right) \tag{27}$$

数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 和原始数据 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 之间关系如图 25 所示。

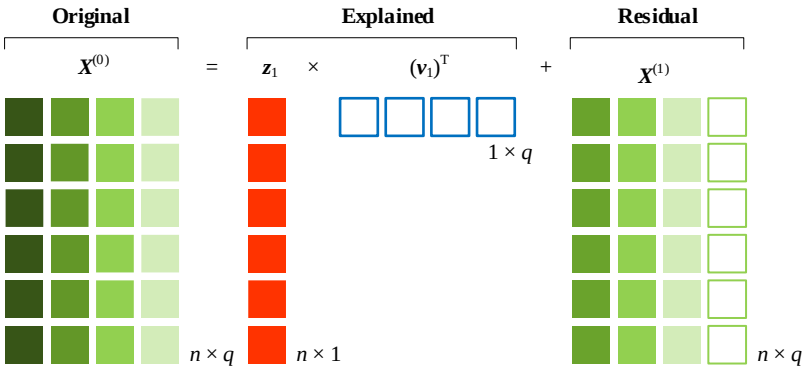


图 25. 计算得到数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(1)}$

第六步

把因变量数据列向量 $\boldsymbol{y}^{(0)}$ 投影于主元列向量 $\boldsymbol{z}_1$ 上，获得系数 b_1。类似第四步，如图 26 所示，用最小二乘法计算获得系数 b_1：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{z}_1 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}^{(0)} - \hat{\boldsymbol{y}}^{(0)}\right) = \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}^{(0)} - b_1\boldsymbol{z}_1\right) = 0 \\ &\Rightarrow \quad b_1 = \frac{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)}}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} = \frac{\left(\boldsymbol{y}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} \end{aligned} \tag{28}$$

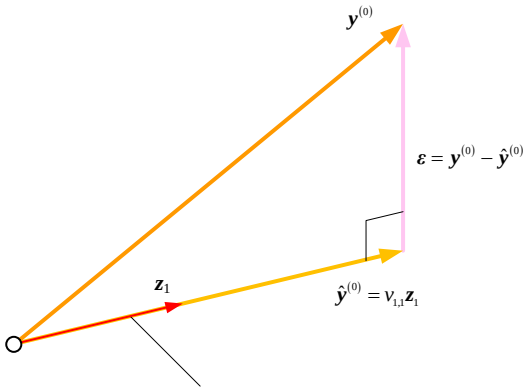


图 26. $\boldsymbol{y}^{(0)}$ 向量投影在主元列向量 $\boldsymbol{z}_1$

第七步

根据 OLS 原理，利用列向量 b_1 和 $\boldsymbol{z}_1$ 估算因变量列向量 $\boldsymbol{y}$，并到拟合 $\hat{\boldsymbol{y}}^{(0)}$：

$$\hat{\boldsymbol{y}}^{(0)} = b_1\boldsymbol{z}_1 = \frac{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} = \frac{\left(\boldsymbol{y}^{(0)}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} \tag{29}$$

原始因变量列向量 $\boldsymbol{y}^{(0)}$ 和拟合列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}^{(0)}$ 之差便是残差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$：

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} = \boldsymbol{y}^{(1)} = \boldsymbol{y}^{(0)} - \hat{\boldsymbol{y}}^{(0)} = \boldsymbol{y}^{(0)} - \frac{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(0)}\boldsymbol{z}_1}{\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1} \tag{30}$$

而残差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$ 便是进入迭代循环第二步数据向量 $\boldsymbol{y}^{(1)}$。如图 27 所示，$\hat{\boldsymbol{y}}^{(0)}$ 解释部分 $\boldsymbol{y}^{(0)}$。

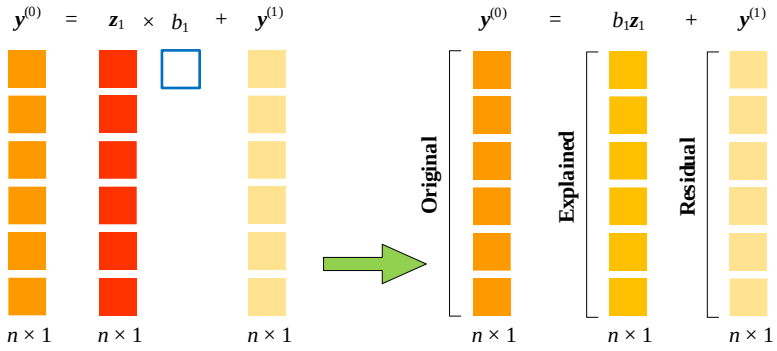


图 27. 估算 $\boldsymbol{y}^{(0)}$

重复迭代

将数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 和数据向量 $\boldsymbol{y}^{(1)}$ 带入如上迭代运算第二步到第七步。

重复第二步得到权重系数列向量 $\boldsymbol{w}_2$：

$$\boldsymbol{w}_2 = \frac{\left(\boldsymbol{X}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^{(1)}}{\left\| \left(\boldsymbol{X}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^{(1)} \right\|} \tag{31}$$

重复第三步，利用权重系数列向量 $\boldsymbol{w}_2$ 和 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 构造偏最小二乘回归第二主元向量，$\boldsymbol{z}_2$：

$$\boldsymbol{z}_2 = \boldsymbol{X}^{(1)} \boldsymbol{w}_2 \tag{32}$$

重复第四步，把自变量数据残差矩阵 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 投影于第二主元列向量 $\boldsymbol{z}_2$ 上，获得系数向量 $\boldsymbol{v}_2$：

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} v_{1,2} \\ v_{2,2} \\ \vdots \\ v_{q,2} \end{bmatrix} = \frac{\left(\boldsymbol{X}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_2}{\boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_2} = \frac{\left(\boldsymbol{X}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{(1)} \boldsymbol{w}_2}{\boldsymbol{w}_2^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{X}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{(1)} \boldsymbol{w}_2} = \frac{\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} \boldsymbol{w}_2}{\boldsymbol{w}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{(1)} \boldsymbol{w}_2} \tag{33}$$

重复第五步，用列向量 $\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 估算，并到拟合矩阵 $\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)}$：

$$\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)} = \boldsymbol{z}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}^{(1)} \boldsymbol{w}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \tag{34}$$

$\boldsymbol{X}^{(1)}$ 和拟合数据矩阵 $\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)}$ 之差便是残差矩阵 $\boldsymbol{E}^{(1)}$，$\boldsymbol{E}^{(1)}$便是再次进入迭代过程第二步数据矩阵 $\boldsymbol{X}^{(2)}$：

$$\boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{E}^{(1)} = \boldsymbol{X}^{(1)} - \hat{\boldsymbol{X}}^{(1)} = \boldsymbol{X}^{(1)} \left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{w}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\right) \tag{35}$$

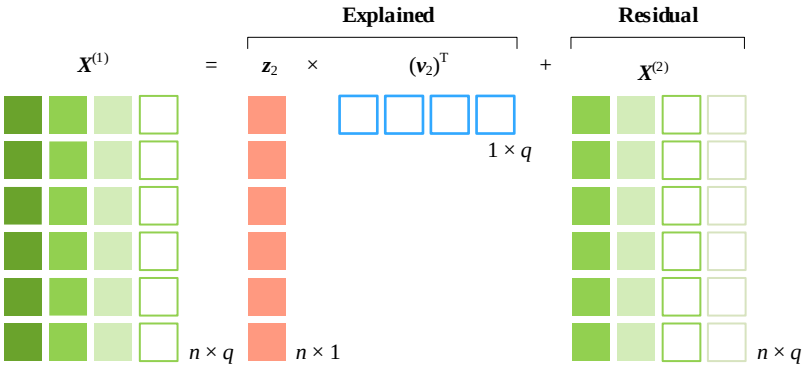


图 28. 计算得到数据矩阵 $X^{(2)}$

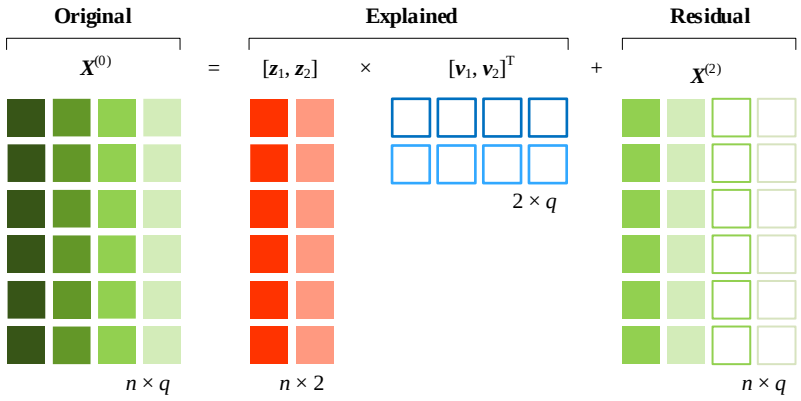


图 29. 前两个主元 z_1 和 z_1 还原数据矩阵 $X^{(0)}$

图 25 和图 28 相结合获得图 29，这即前两个主元 z_1 和 z_1 还原数据矩阵 $X^{(0)}$。随着主元数量不断增多，偏最小二乘回归更精确地还原原始数据 $X^{(0)}$；即说，对数据 $X^{(0)}$方差解释力度越强。

重复第六步，把因变量数据列向量 $y^{(1)}$ 投影在主元列向量 z_2 上，获得系数 b_2：

$$b_2 = \frac{z_2^T y^{(1)}}{z_2^T z_2} = \frac{\left(y^{(1)}\right)^T z_2}{z_2^T z_2} \tag{36}$$

重复第七步，利用 b_2 和 z_2 得到拟合列向量 $\hat{y}^{(1)}$：

$$\hat{y}^{(1)} = b_2 z_2 \tag{37}$$

列向量 $y^{(1)}$ 和拟合数据列向量 $\hat{y}^{(1)}$ 之差便是残差向量 $\varepsilon^{(1)}$：

$$\varepsilon^{(0)} = y^{(2)} = y^{(1)} - \hat{y}^{(1)} = y^{(1)} - b_2 z_2 \tag{38}$$

而残差向量 $\varepsilon^{(1)}$ 也是进入下一次迭代过程第二步数据向量 $y^{(2)}$。

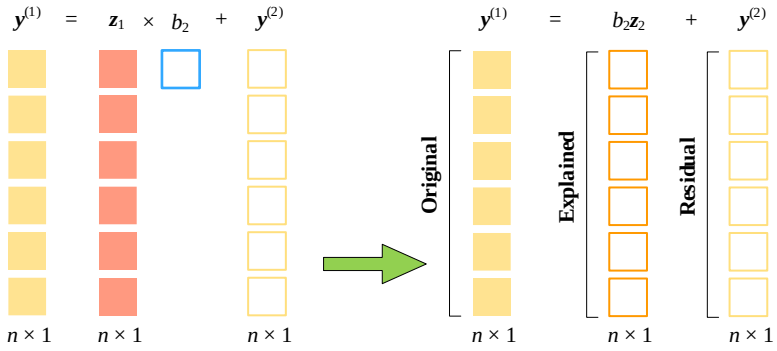


图 30. 估算 $y^{(1)}$

图 31 结合图 27 和图 30，这幅图中前两个主元 z_1 和 z_1 还原部分数据列向量 $y^{(0)}$。同理，随着主元数量不断增多，偏最小二乘回归更精确地还原原始因变量列向量 $y^{(0)}$；即，对 $y^{(0)}$方差解释力度越强。截止目前，迭代循环已经完成两次。

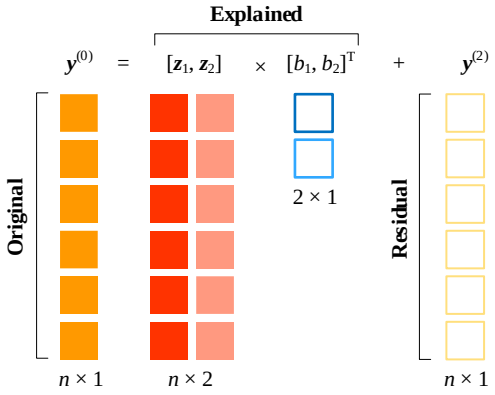


图 31. 前两个主元 z_1 和 z_1 还原部分数据列向量 $y^{(0)}$

Scikit-learn 中 PLS 回归的函数为 sklearn.cross_decomposition.PLSRegression()。

主元回归 PCR 是一种基于主成分分析的回归方法，它在回归建模之前，先对自变量进行主成分分析，将自变量降维成少量的主成分变量，然后再对这些主成分变量进行回归分析。

PCR 的基本思想是将自变量通过主成分分析转换成少数互相正交的主成分变量，从而消除自变量之间的多重共线性问题，提高回归分析的准确性和稳定性。在降维过程中，PCR 保留了自变量中最主要的信息，因此相比于直接使用全部自变量的回归分析，PCR 可以显著提高回归模型的准确性和可解释性。

偏最小二乘 PLS 也是一种基于主成分分析和回归分析的统计建模方法，它是对 PCR 的一种改进，主要用于解决多重共线性和高维数据分析问题。

与 PCR 不同的是，PLS 在主成分分析的过程中，不仅仅考虑了自变量之间的方差，还考虑了自变量和因变量之间的协方差，从而将主成分分析与回归分析相结合，得到了一组互相正交的主成分变量，每个主成分变量都包含了自变量和因变量的信息，可以用于回归分析。

下例展示如何使用偏最小二乘回归。这个例子还比较了本书最后一章要介绍的典型相关分析。请大家自行阅读学习：

https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/cross_decomposition/plot_compare_cross_decomposition.html