16 正交回归

Orthogonal Distance Regression

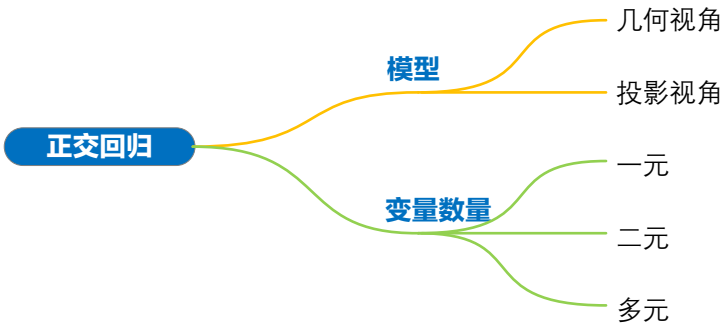
输入和输出数据都参与主成分分析，构造正交空间

数学展现出秩序、对称和有限——这些都是美的极致形态。

The mathematical sciences particularly exhibit order, symmetry, and limitations; and these are the greatest forms of the beautiful.

—— 亚里士多德 (Aristotle) | 古希腊哲学家 | 384 ~ 322 BC

- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `numpy.mean()` 计算均值
- `numpy.std()` 计算均方差
- `numpy.var()` 计算方差
- `pandas_datareader.get_data_yahoo()` 下载股价数据
- `scipy.odr` 正交回归
- `scipy.odr.Model()` 构造正交回归模型
- `scipy.odr.ODR()` 设置正交回归数据、模型和初始自
- `scipy.odr.RealData()` 加载正交回归数据
- `statsmodels.api.add_constant()` 增加 OLS 常数项
- `statsmodels.api.OLS` 最小二乘法线性回归



16.1 主成分与回归

本章主要介绍一种和主成分分析息息相关的回归方法——**正交回归** (orthogonal regression)。

正交回归，也叫做**正交距离回归** (Orthogonal Distance Regression, ODR)，又叫**全线性回归** (total linear regression)。正交回归通过将自变量通过主成分分析转换成互相正交的新变量，来消除自变量之间的多重共线性问题，从而提高回归分析的准确性和稳定性。

具体来说，正交回归通过以下步骤实现：1) 对自变量进行主成分分析，得到主成分变量，使它们互相正交。2) 对因变量和主成分变量进行回归分析，得到每个主成分变量的回归系数。3) 根据主成分变量的回归系数和主成分分析的结果，计算出每个自变量的回归系数和截距项。

正交回归的优点之一是消除自变量之间的多重共线性，提高回归分析的准确性和稳定性。正交回归可以在保证预测准确性的前提下，降低自变量的维度，提高回归模型的可解释性。

正交回归的缺点是计算复杂度较高，需要进行主成分分析和回归分析等多个步骤。此外，由于正交回归是基于主成分分析的，因此它可能会失去一些原始自变量的信息，因此需要在可接受的误差范围内进行权衡。

举个例子，平面上，最小二乘法线性回归 OLS 仅考虑纵坐标方向上误差，如图 1 (a) 所示；而正交回归 TLS 同时考虑横纵两个方向误差，如图 1 (b) 所示。

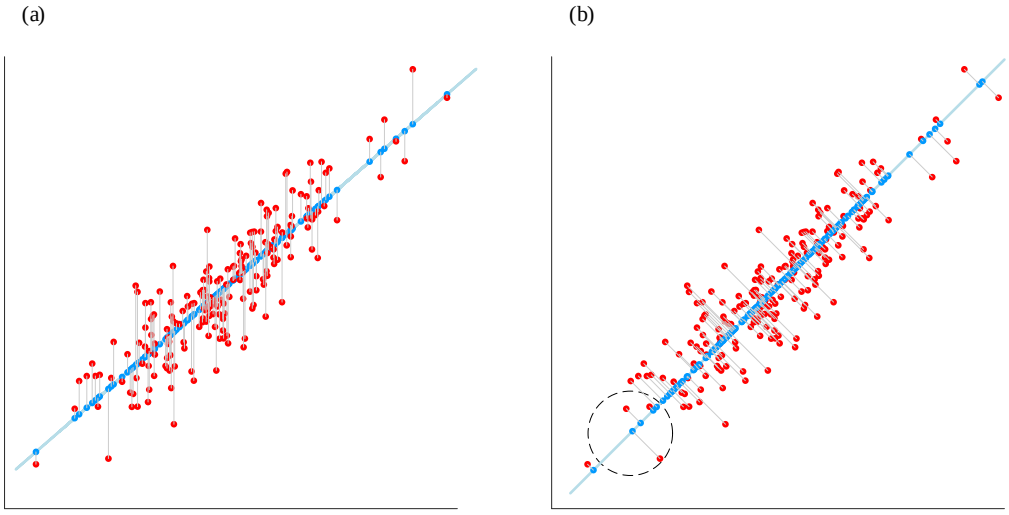


图 1. 对比 OLS 和 TLS 线性回归

从主成分分析角度，正交回归特点是输入数据 $\boldsymbol{X}$ 和输出数据 $\boldsymbol{y}$ 都参与主成分分析。按照特征值从大到小顺序排列特征向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D, \boldsymbol{v}_{D+1}]$，用其中前 D 个向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D]$ 构造一个全新超平面 H。利用 $\boldsymbol{v}_{D+1}$ 垂直于超平面 H 便可以求解出回归系数。

下面用两特征 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2]$ 数据作例子，聊一下主成分回归的思想。如图 2 所示，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 为输入数据，$\boldsymbol{y}$ 为输出数据；通过主成分分析，$\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$ 和 $\boldsymbol{y}$ 正交化之后得到 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ (根据特征值从大到小排列)；$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两两正交。第一主成分 $\boldsymbol{v}_1$ 和第二主成分 $\boldsymbol{v}_2$ 构造平面 H。$\boldsymbol{v}_3$ 垂直于平面 H，通过这层关系求解出正交回归系数。

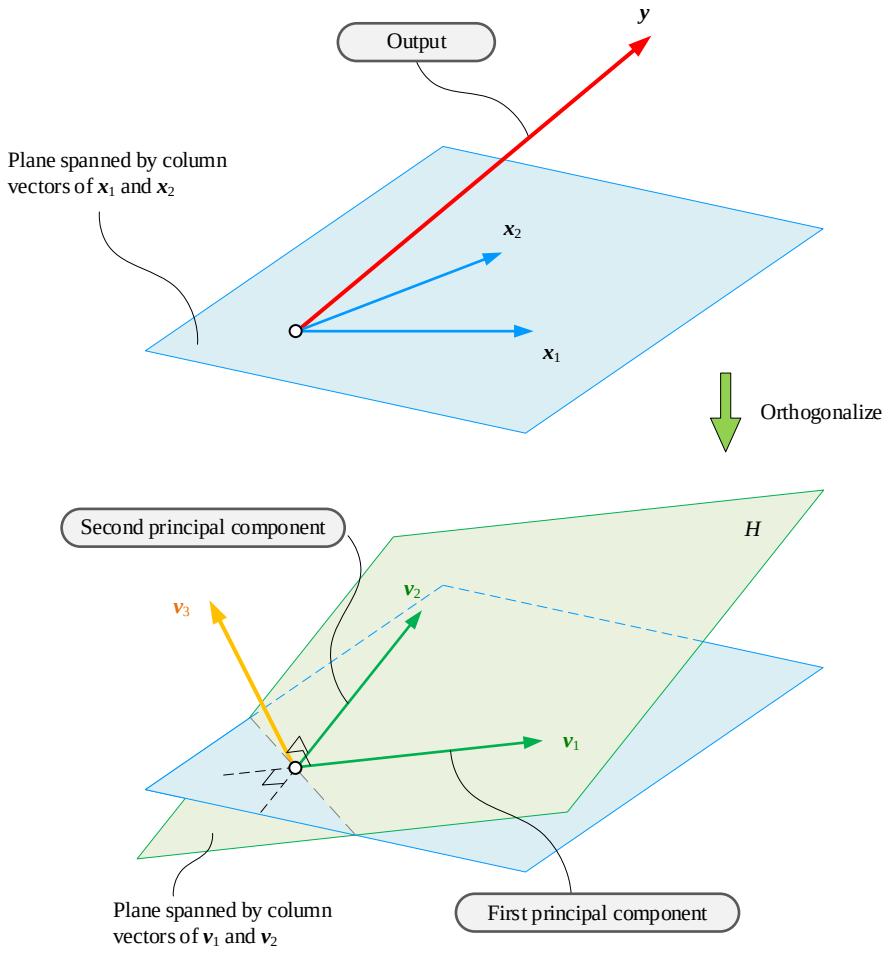


图 2. 通过主成分分析构造正交空间

前文介绍的线性回归采用算法叫做**普通最小二乘法** (Ordinary Least squares, OLS)；而正交回归采用的算法叫做**完全最小二乘法** (Total Least Squares, TLS)。

如图 3 所示，最小二乘回归，将 $\boldsymbol{y}$ 投影到 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 构造的平面上。而对于正交回归，将 $\boldsymbol{y}$ 投影到 H，得到 $\hat{\boldsymbol{y}}$。而残差，$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$，平行于 $\boldsymbol{v}_3$。再次强调，平面 H 是由第一主成分 $\boldsymbol{v}_1$ 和第二主成分 $\boldsymbol{v}_2$ 构造。

此外，建议读者完成本章学习之后，回过头来再比较图 3 和图 4。这样，相信大家会更清楚 OLS 和 TLS 之间的区别。

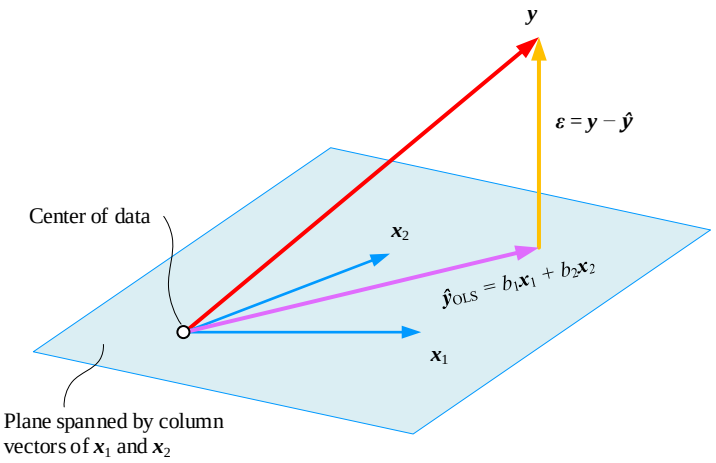


图 3. 最小二乘回归，将 $\boldsymbol{y}$ 投影到 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 构造的平面上

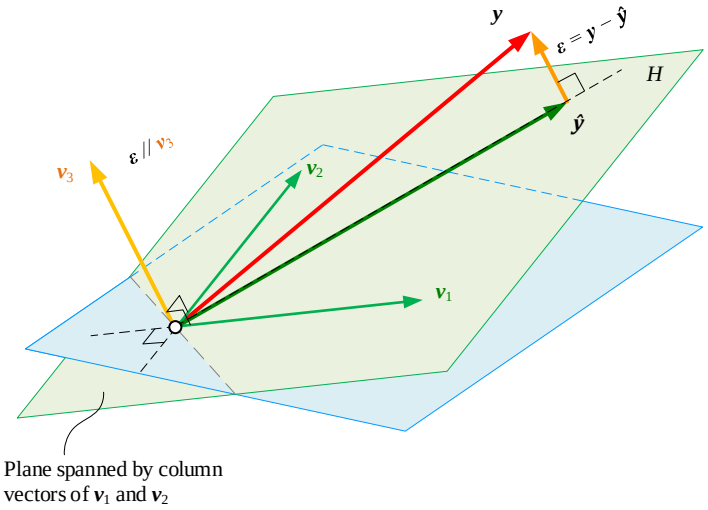


图 4. 正交回归，将输出数据 $\boldsymbol{y}$ 投影到 H

下一节首先用一元正交回归给大家建立正交回归的直观印象，本章后续将逐步扩展到二元回归和多元回归。

16.2 一元正交回归

设定一元正交回归解析式如下：

$$y = b_0 + b_1 x \tag{1}$$

其中，b_0 为截距项，b_1 为斜率。

如图 5 所示，x-y 平面上任意一点 $(x^{(i)}, y^{(i)})$ 和正交回归直线距离可以利用下式获得：

$$d_i = \frac{y^{(i)} - \left(b_0 + b_1 x^{(i)}\right)}{\sqrt{1 + b_1^2}} \tag{2}$$

当 $i = 1 \sim n$ 时，d_i 构成列向量为 $\boldsymbol{d}$：

$$\boldsymbol{d} = \frac{\boldsymbol{y} - \left(b_0 + b_1 \boldsymbol{x}\right)}{\sqrt{1 + b_1^2}} \tag{3}$$

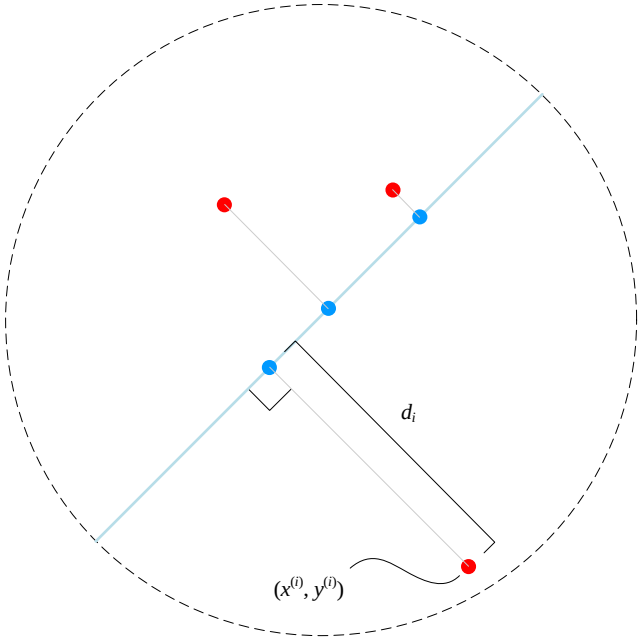


图 5. 正交投影几何关系

构造如下优化问题，b_0 和 b_1 为优化变量，优化目标为最小化欧氏距离平方和：

$$\underset{b0,b1}{\arg\min}\ f\left(b_0, b_1\right) = \left\|\boldsymbol{d}\right\|^2 = \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d} \tag{4}$$

将 (3) 代入 $f(b_0, b_1)$ 得到：

$$f\left(b_0, b_1\right) = \frac{\left(\boldsymbol{y} - \left(b_0 + b_1 \boldsymbol{x}\right)\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - \left(b_0 + b_1 \boldsymbol{x}\right)\right)}{1 + b_1^2} \tag{5}$$

为了方便计算，也引入全 1 向量 $\boldsymbol{1}$，它和 $\boldsymbol{x}$ 形状一样为 n 行 1 列向量；$f(b_0, b_1)$ 展开整理为下式：

$$f\left(b_0, b_1\right) = \frac{n b_0^2 + 2 b_0 b_1 \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} + b_1^2 \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - 2 b_0 \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} - 2 b_1 \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{1 + b_1^2} \tag{6}$$

$f(b_0, b_1)$ 对 b_0 偏导为 0，构造如下等式：

$$\frac{\partial f\left(b_0, b_1\right)}{\partial b_0} = \frac{2 n b_0 + 2 b_1 \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} - 2 \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{1 + b_1^2} = 0 \tag{7}$$

$f(b_0, b_1)$ 对 b_1 偏导为 0，构造如下等式：

$$\frac{\partial f\left(b_0,b_1\right)}{\partial b_1}=\frac{2b_1\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+2b_0\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}-2\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{1+b_1^2}-\frac{\left(nb_0^2+2b_0b_1\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}+b_1^2\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-2b_0\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}-2b_1\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)2b_1}{\left(1+b_1^2\right)^2}=0 \tag{8}$$

观察 (7)，容易用 b_1 表达 b_0：

$$b_0=\frac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}-b_1\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}=\mathrm{E}\left(\boldsymbol{y}\right)-b_1\mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}\right) \tag{9}$$

其中，

$$\begin{cases}\mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}\right)=\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}=\dfrac{\sum_{i=1}^{n}x^{(i)}}{n}\\ \mathrm{E}\left(\boldsymbol{y}\right)=\dfrac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}=\dfrac{\sum_{i=1}^{n}y^{(i)}}{n}\end{cases} \tag{10}$$

将 (9) 给出 b_0 解析式代入 (8) 获得仅含有 b_1 的一元二次方程：

$$b_1^2+kb_1-1=0 \tag{11}$$

其中，

$$\begin{aligned}k&=\frac{n\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}-n\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}\\&=\frac{\left(\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}-\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n^2}\right)-\left(\dfrac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{n}-\dfrac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n^2}\right)}{\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{n}-\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n^2}}\\&=\frac{\mathrm{var}\left(\boldsymbol{x}\right)-\mathrm{var}\left(\boldsymbol{y}\right)}{\mathrm{cov}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)}=\frac{\sigma_x^2-\sigma_y^2}{\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y}\end{aligned} \tag{12}$$

上式，不区分求解方差协方差时，$1/(n-1)$和 $1/n$ 之间差别。

求解 (11) 一元二次方程，得到 b_1 解如下：

$$b_1=\frac{-k\pm\sqrt{k^2+4}}{2} \tag{13}$$

将 (12) 给出的 k，代入 (13)，整理得到 b_1 解：

$$b_1=\frac{\left(\sigma_y^2-\sigma_x^2\right)\pm\sqrt{\left(\sigma_x^2-\sigma_y^2\right)^2+4\left(\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\right)^2}}{2\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y} \tag{14}$$

发现 b_1 两个解即**主成分分析** (principal component analysis, PCA) 主元方向。

构造 $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$ 数据矩阵，它的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 可以记做：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_x^2 & \rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\\ \rho_{xy}\sigma_x\sigma_y & \sigma_y^2\end{bmatrix} \tag{15}$$

对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 进行特征值分解，得到两个特征向量：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} \dfrac{\left(\sigma_y^2 - \sigma_x^2\right) + \sqrt{\left(\sigma_x^2 - \sigma_y^2\right)^2 + 4\left(\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\right)^2}}{2\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y} \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \dfrac{\left(\sigma_y^2 - \sigma_x^2\right) - \sqrt{\left(\sigma_x^2 - \sigma_y^2\right)^2 + 4\left(\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\right)^2}}{2\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{16}$$

$\boldsymbol{\Sigma}$ 两个特征值，从大到小排列：

$$\lambda_1 = \frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{2} + \sqrt{\left(\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\right)^2 + \left(\frac{\sigma_x^2 - \sigma_y^2}{2}\right)^2}$$
$$\lambda_2 = \frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{2} - \sqrt{\left(\rho_{xy}\sigma_x\sigma_y\right)^2 + \left(\frac{\sigma_x^2 - \sigma_y^2}{2}\right)^2} \tag{17}$$

特征值较大的特征向量为正交回归直线切线向量；特征值较小特征向量对应直线法线向量，这样求得 b_1 斜率。有了上述思路，便可以用 PCA 分解来获得正交回归系数，这是下一节要讲解的内容。

如下代码首先介绍如何利用 scipy.odr 可以求解得到正交回归系数。构造线性函数 linear_func(b, x)，利用 scipy.odr.Model(linear_func) 创建线性模型；然后，采用 scipy.odr.RealData() 加载数据，再用 scipy.odr.ODR() 整合数据、模型和初始值，输出为 odr。odr.run() 求解回归问题。然后，用 pprint()打印结果。

```
Beta: [0.00157414 1.43773257]
Beta Std Error: [0.00112548 0.05617699]
Beta Covariance: [[ 1.21904872e-02 -2.43641786e-02]
 [-2.43641786e-02  3.03712371e+01]]
Residual Variance: 0.00010390932459480641
Inverse Condition #: 0.22899877744275976
Reason(s) for Halting:
Sum of squares convergence
```

一元正交回归的解析式为：

$$y = 1.4377x + 0.00157 \tag{18}$$

下一节将介绍如下采用主成分分析来求解一元正交回归系数，并比较正交回归和最小二乘法线性回归。

16.3 几何角度看正交回归

图 6 所示为正交回归和 PCA 分解关系，发现主元回归直线通过数据中心 (E($\boldsymbol{x}$), E($\boldsymbol{y}$))，回归直线方向和主元方向 $\boldsymbol{v}_1$ 平行，垂直于次元 $\boldsymbol{v}_2$ 方向。即，次元方向 $\boldsymbol{v}_2$ 和直线法向量 $\boldsymbol{n}$ 平行。

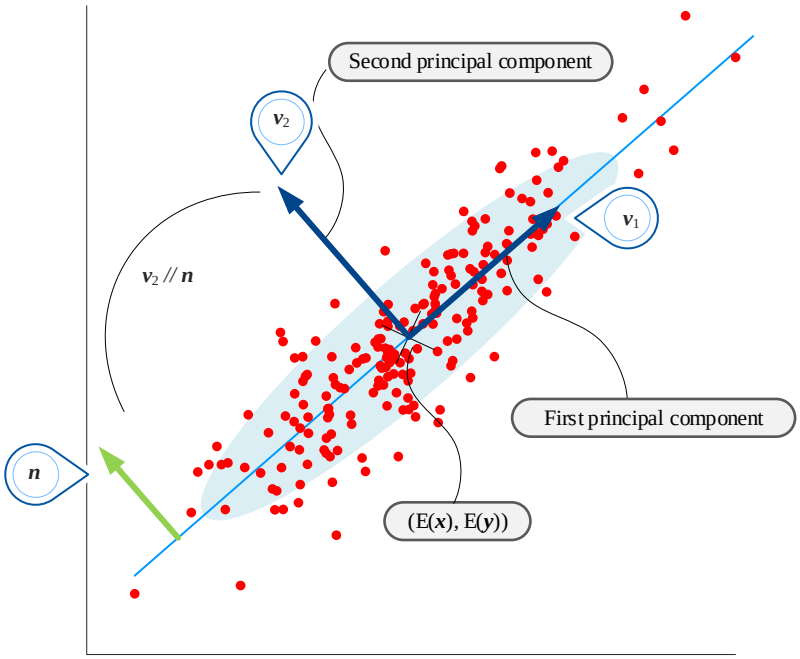


图 6. 正交回归和 PCA 分解关系

对于 (1) 所示一元一次函数，构造二元 $F(x, y)$ 函数如下：

$$F(x,y) = b_0 + b_1 x - y \tag{19}$$

$F(x, y)$ 法向量，即平面上形如 (1) 直线法向量 $\boldsymbol{n}$ 可以通过下式求解：

$$\boldsymbol{n} = \left(\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}\right)^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} b_1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{20}$$

如前文所示，$\boldsymbol{n}$ 方向即 PCA 分解第二主元方向，即次元方向。

为了方便计算，假设数据已经经过中心化处理，即已经完成如下运算：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} - \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) \tag{21}$$

由于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 已经是中心化向量，协方差矩阵可以通过下式运算得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} & \boldsymbol{y} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \tag{22}$$

为了方便计算，本节计算协方差矩阵不考虑系数 $1/(n-1)$。

由于 $\boldsymbol{n}$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 次元方向：

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{n} = \lambda_2 \boldsymbol{n} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \boldsymbol{n} = \lambda_2 \boldsymbol{n} \tag{23}$$

将 (20) 代入 (23)，整理得到如下两个等式：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ -1 \end{bmatrix} = \lambda_2 \begin{bmatrix} b_1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} b_1 - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \lambda_2 b_1 \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} b_1 - \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = -\lambda_2 \end{cases} \tag{24}$$

联立 (24) 两个等式，用 λ_2 表示 b_1：

$$b_{1\_TLS} = \left(\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{x} - \lambda_2\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{y} \tag{25}$$

下式为本书前文获得的一元线性回归 OLS 中 b_1 解：

$$b_{1\_OLS} = \left(\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{x}\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{T}\boldsymbol{y} \tag{26}$$

对比 OLS 和 TLS；当 (25) 中 λ_2 为 0 时，两种回归方法得到斜率完全一致。$\lambda_2 = 0$ 时，$\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 完全线性相关。

数据中心化前后，回归直线梯度向量不变；中心化之前的回归直线通过 (E($\boldsymbol{x}$), E($\boldsymbol{y}$)) 一点，即：

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{y}) = b_0 + b_1\mathrm{E}(\boldsymbol{x}) \tag{27}$$

获得回归式截距项 b_0 表达式：

$$b_0 = \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) - b_1\mathrm{E}(\boldsymbol{x}) \tag{28}$$

图 7 所示为一元正交回归数据之间关系。发现自变量 $\boldsymbol{x}$ 列向量和因变量 $\boldsymbol{y}$ 列向量数据都参与 PCA 分解得到正交化向量 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$，然后用特征值中较大值对应特征向量 $\boldsymbol{v}_1$ 作为一元正交回归直线切线向量。更为简单计算方法是，用特征值较小值对应特征向量 $\boldsymbol{v}_2$ 作为一元正交回归直线法向量。

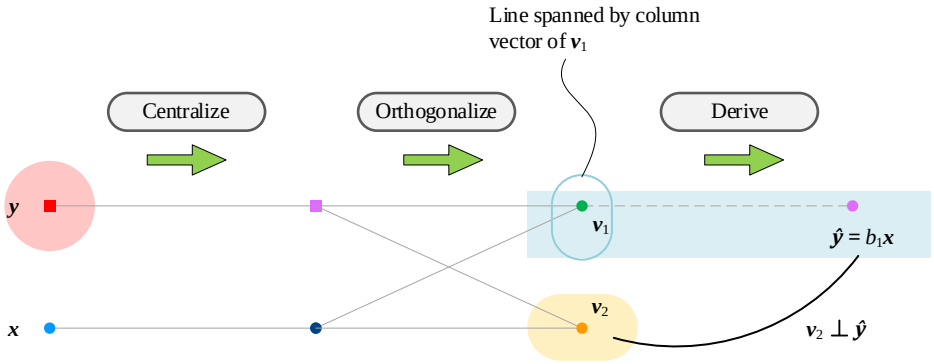


图 7. 一元正交回归 TLS 数据关系

图 8 所示为最小二乘法 OLS 一元线性回归系数，对应的一元 OLS 解析式为：

$$y = 1.1225x + 0.0018 \tag{29}$$

图 9 比较 OLS 和 TLS 结果。

OLS Regression Results

Dep. Variable:	AAPL	R-squared:	0.687
Model:	OLS	Adj. R-squared:	0.686
Method:	Least Squares	F-statistic:	549.7
Date:	Thu, 07 Oct 2021	Prob (F-statistic):	4.55e-65
Time:	07:08:46	Log-Likelihood:	678.03
No. Observations:	252	AIC:	-1352.
Df Residuals:	250	BIC:	-1345.
Df Model:	1		
Covariance Type:	nonrobust		

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
const	0.0018	0.001	1.759	0.080	-0.000	0.004
SP500	1.1225	0.048	23.446	0.000	1.028	1.217

Omnibus:	52.424	Durbin-Watson:	1.864
Prob(Omnibus):	0.000	Jarque-Bera (JB):	210.804
Skew:	0.777	Prob(JB):	1.68e-46
Kurtosis:	7.203	Cond. No.	46.1

图 8. 最小二乘法 OLS 一元线性回归结果

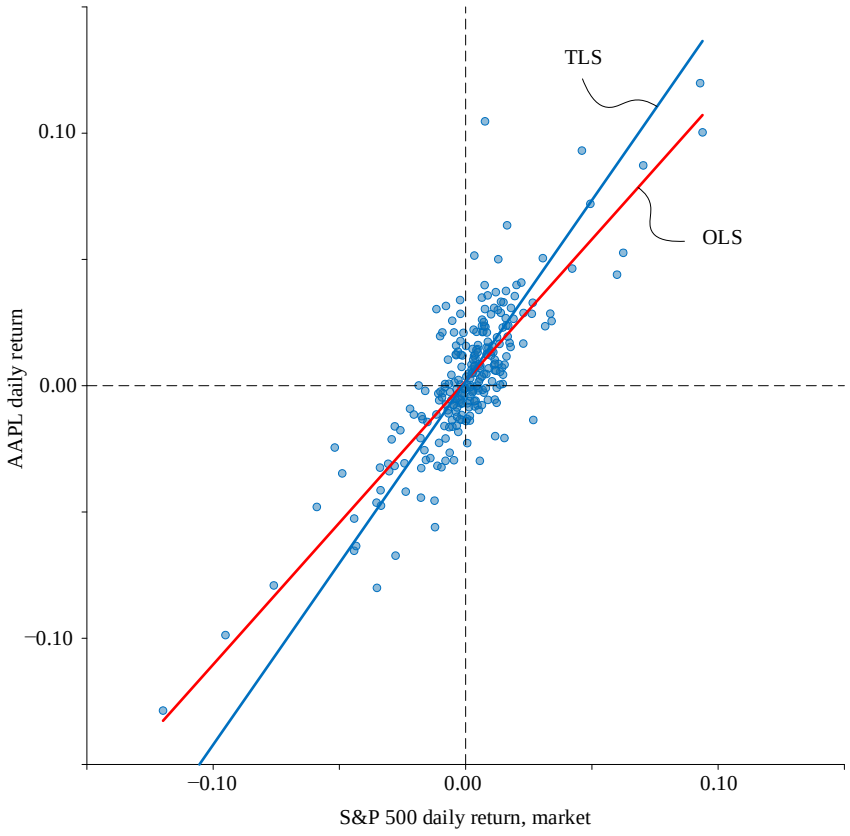


图 9. 比较 OLS 和 TLS 结果

Bk7_Ch16_01.ipynb 绘制本节图像。

16.4 二元正交回归

这一节用主成分分析讨论二元正交回归。

首先也是对数据进行中心化处理：

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_1 - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1), \quad \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_2 - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2), \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} - \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) \tag{30}$$

根据 PCA 计算法则，首先求解协方差矩阵。由于 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$ 和 $\boldsymbol{y}$ 已经为中心化矩阵，因此协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 通过下式计算获得。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{31}$$

为了方便计算，本节也计算不考虑系数 $1/(n-1)$。

正交回归解析式表达：

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 \tag{32}$$

构造二元 $F(x_1, x_2, y)$ 函数如下：

$$F(x_1, x_2, y) = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 - y \tag{33}$$

$F(x_1, x_2, y)$ 法向量即平面 $f(x_1, x_2)$ 法向量 $\boldsymbol{n}$ 通过下式求解：

$$\boldsymbol{n} = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}, \frac{\partial F}{\partial x_2}, \frac{\partial F}{\partial y} \right)^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{34}$$

$\boldsymbol{n}$ 平行于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 矩阵 PCA 分解特征值最小特征向量，即：

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_3 = \lambda_3 \boldsymbol{v}_3 \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \boldsymbol{n} = \lambda_3 \boldsymbol{n} \tag{35}$$

整理得到：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ -1 \end{bmatrix} = \lambda_3 \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \left(\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 - \lambda_3\right) b_1 + \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 b_2 = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 b_1 + \left(\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 - \lambda_3\right) b_2 = \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{cases} \tag{36}$$

$\boldsymbol{n}$ 平行于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 矩阵 PCA 分解特征值最小特征向量 $\boldsymbol{v}_3$，构造如下等式并求解 b_1 和 b_2：

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ -1 \end{bmatrix} = k\boldsymbol{v}_3 \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ -1 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} v_{1,3} \\ v_{2,3} \\ v_{3,3} \end{bmatrix} \tag{37}$$

根据 (37) 最后一行，可以求得 k

$$k = \frac{-1}{v_{3,3}} \tag{38}$$

b_1 和 b_2 构成的列向量为：

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \frac{-1}{v_{3,3}} \begin{bmatrix} v_{1,3} \\ v_{2,3} \end{bmatrix} \tag{39}$$

回归方程常数项通过下式获得：

$$b_0 = \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) - \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \tag{40}$$

为了方便多元正交回归运算，令：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} \tag{41}$$

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \tag{42}$$

上式 $\boldsymbol{\Sigma}$ 也不考虑系数 $1/(n-1)$：

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_3 = \lambda_3\boldsymbol{v}_3 \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \boldsymbol{n} = \lambda_3\boldsymbol{n} \tag{43}$$

构造 $\boldsymbol{b} = [b_1, b_2]^{\mathrm{T}}$ 这样重新构造特征值和特征向量以及 $\boldsymbol{\Sigma}$ 之间关系：

$$\boldsymbol{n} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} \tag{44}$$

将 (44) 代入 (43)，整理得到 $\boldsymbol{b}$：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} = \lambda_3 \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{b} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} - \lambda_3\boldsymbol{I}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{45}$$

下一节将使用 (45) 这一解析式计算正交回归解析式系数。

图 10 回顾本章第一节介绍的二元正交回归坐标转换过程。

数据 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y}]$ 中心化后，用 PCA 正交化获得正交系 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$。$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 对应特征值由大到小。前两个主元向量 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 相互垂直，构成了一个平面 H，特征值最小主元 $\boldsymbol{v}_3$ 垂直于该平面。$\boldsymbol{n}$ 为 H 平面法向量，$\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两者平行。

图 10 还比较了 OLS 和 TLS 回归结果。值得大家注意的是，如图 10 上半部分所示，对于最小二乘回归 OLS，$\hat{\boldsymbol{y}}$ 在 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 构造的平面上；而如图 10 下半部分，正交回归 TLS 中，$\hat{\boldsymbol{y}}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 构造平面 H 上。

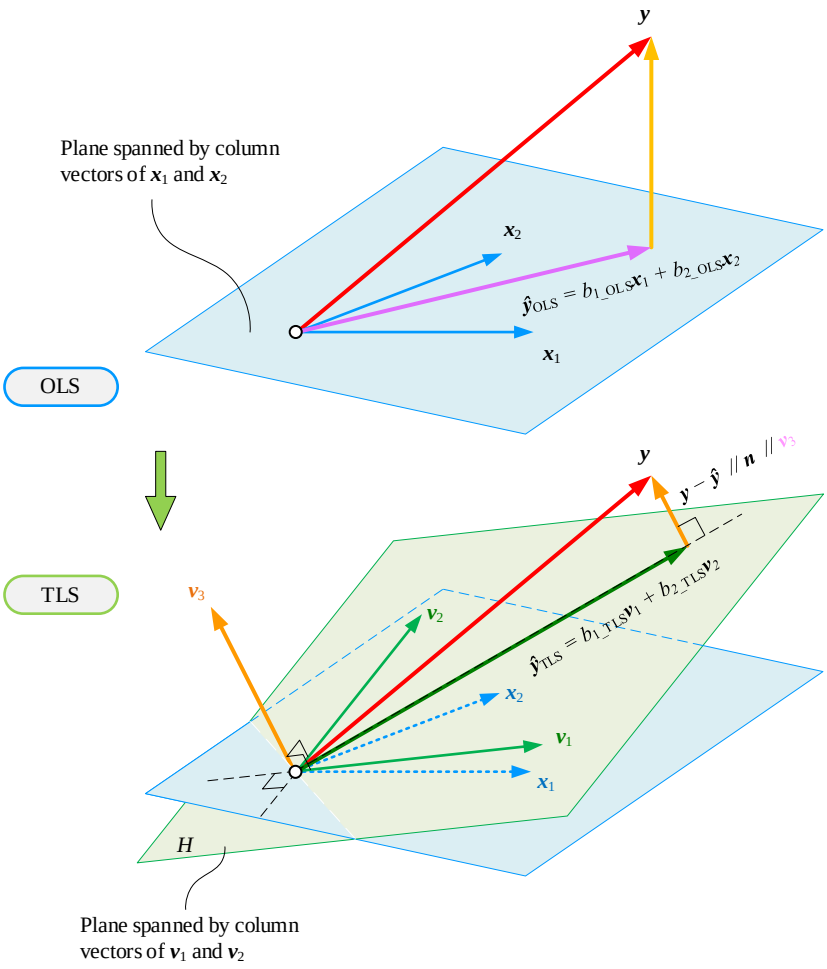


图 10. 几何角度解释二元正交回归坐标转换

图 11 解释二元正交回归数据关系。如前文反复强调，输入数据和输出数据都参与主成分分析，也就是正交化过程，因此特征向量既有“输入”成分，也有“输出”成分，呈现“你中有我，我中有你”。

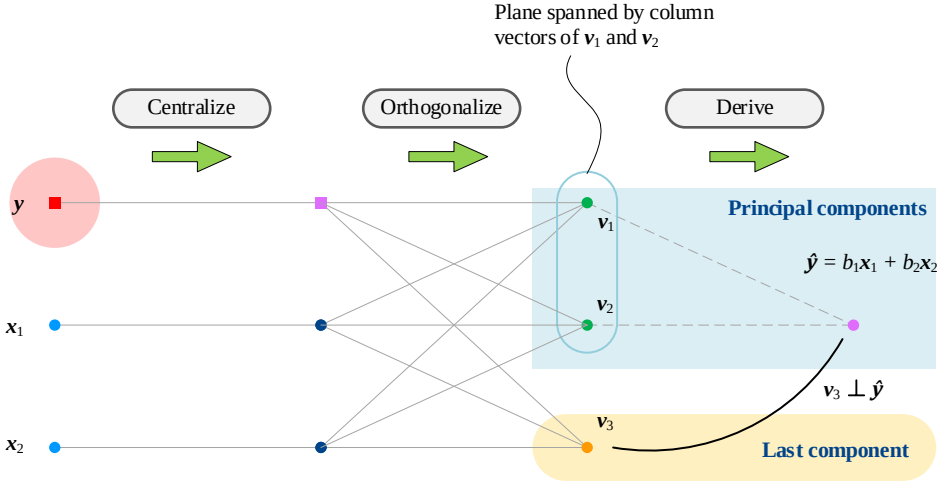


图 11. 二元正交回归数据关系

利用上一节介绍的 scipy.odr，可以求解一个二元正交回归的结果如下。利用主成分分析，我们可以获得相同正交回归的系数。

```
Beta: [-0.00061177  0.40795725  0.44382723]
Beta Std Error: [0.00057372 0.02454606 0.02864744]
Beta Covariance: [[ 5.46486647e-03 -2.24817813e-02  1.00466594e-02]
 [-2.24817813e-02  1.00032390e+01 -7.07446738e+00]
 [ 1.00466594e-02 -7.07446738e+00  1.36253753e+01]]
Residual Variance: 6.02314210079386e-05
Inverse Condition #: 0.16900716799896934
Reason(s) for Halting:
Sum of squares convergence
```

二元正交回归的平面解析式为：

$$y = 0.4079x_1 + 0.4438x_2 - 0.00061 \tag{46}$$

图 12 所示为最小二乘法 OLS 二元线性回归结果，对应的平面解析式如下：

$$y = 0.3977x_1 + 0.4096x_2 - 0.006 \tag{47}$$

OLS Regression Results

Dep. Variable:	SP500	R-squared:	0.830
Model:	OLS	Adj. R-squared:	0.829
Method:	Least Squares	F-statistic:	607.4
Date:	Thu, 07 Oct 2021	Prob (F-statistic):	1.69e-96
Time:	07:31:57	Log-Likelihood:	831.06
No. Observations:	252	AIC:	-1656.
Df Residuals:	249	BIC:	-1646.
Df Model:	2		
Covariance Type:	nonrobust		

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
const	-0.0006	0.001	-0.984	0.326	-0.002	0.001
AAPL	0.3977	0.024	16.326	0.000	0.350	0.446
MCD	0.4096	0.028	14.442	0.000	0.354	0.465

Omnibus:	37.744	Durbin-Watson:	1.991
Prob(Omnibus):	0.000	Jarque-Bera (JB):	157.710
Skew:	0.492	Prob(JB):	5.67e-35
Kurtosis:	6.749	Cond. No.	59.4

图 12. 最小二乘法 OLS 二元线性回归结果

图 13 比较 OLS 和 TLS 二元回归结果。

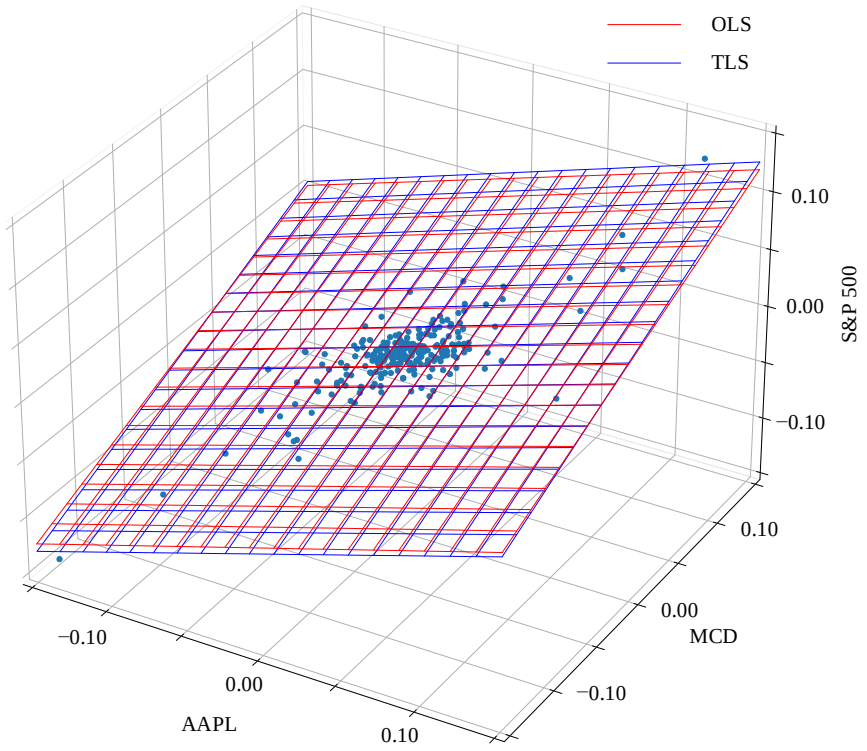


图 13. 比较 OLS 和 TLS 二元回归结果

Bk7_Ch16_02.ipynb 完成本节回归运算。

16.5 多元正交回归

下面，把上述思路推广到 D 维度 $\boldsymbol{X}$ 矩阵。首先中心化数据，获得如下两个中心化 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}$ 向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{T}\right)\boldsymbol{X}, \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} - \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) \tag{48}$$

为了表达方便，假设 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 已经为中心化数据；这样，构造回归方程式时，不必考虑常数项 b_0，即回归方程中没有截距项：

$$y = b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_{D-1} x_{D-1} + b_D x_D \tag{49}$$

为了进行 PCA 分解，首先计算 $[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}]$ 矩阵协方差矩阵。

$\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 均是中心化数据，不考虑系数 $1/(n-1)$，协方差矩阵通过下式简单运算获得：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{(D+1)\times(D+1)} = [\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \tag{50}$$

上述协方差矩阵行列宽度均为 $D+1$。对它进行特征值分解得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{51}$$

其中，

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_D & \\ & & & & \lambda_{D+1} \end{bmatrix}, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_D \geq \lambda_{D+1} \tag{52}$$

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D & \boldsymbol{v}_{D+1} \end{bmatrix}$$

特征值矩阵对角线特征值从左到右，由大到小。有了本章之前内容铺垫，相信读者已经清楚正交回归的矩阵运算过程，具体如图 14 所示。

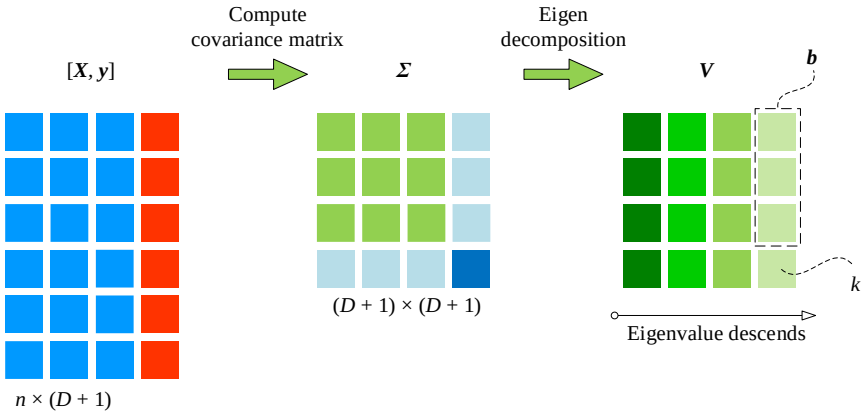


图 14. 多元正交回归矩阵运算过程

$\boldsymbol{V}$ 中第 1 到第 D 个列向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_D]$ 构造超平面 H，而 $\boldsymbol{v}_{D+1}$ 垂直于该超平面。

构造 $F(x_1, x_2, ..., x_D, y)$ 函数：

$$F\left(x_1, x_2, ..., x_D, y\right) = b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_{D-1} x_{D-1} + b_D x_D - y \tag{53}$$

$F(x_1, x_2, ..., x_D, y)$ 法向量即平面上 $f(x_1, x_2, ..., x_D)$ 法向量 $\boldsymbol{n}$ 通过下式求解：

$$\boldsymbol{n} = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}, ..., \frac{\partial F}{\partial x_D}, \frac{\partial F}{\partial y} \right)^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_D & -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} \tag{54}$$

这样重新构造特征值 λ_{D+1} 和特征向量 $\boldsymbol{v}_{D+1}$ 以及 $\boldsymbol{\Sigma}$ 之间关系。注意，$\boldsymbol{n}$ 平行 $\boldsymbol{v}_{D+1}$。$\boldsymbol{n}$ 对应 $\boldsymbol{\Sigma}$ 矩阵 PCA 分解特征值最小特征向量，即：

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_{D+1} = \lambda_{D+1}\boldsymbol{v}_{D+1} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \boldsymbol{n} = \lambda_{D+1}\boldsymbol{n} \tag{55}$$

求解获得多元正交回归系数列向量 $\boldsymbol{b}$ 解：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} = \lambda_{D+1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{b}_{\mathrm{TLS}} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} - \lambda_{D+1}\boldsymbol{I} \right)^{-1} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{56}$$

对比多元线性最小二乘系数向量结果：

$$\boldsymbol{b}_{\text{OLS}} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{57}$$

发现当 λ_{D+1} 等于 0 时，$\boldsymbol{y}$ 完全被 $\boldsymbol{X}$ 列向量解释，即两个共线性。

这里我们再次区分一下最小二乘法和正交回归。最小二乘法寻找因变量和自变量之间残差平方和最小超平面；几何角度上讲，将因变量投影在自变量构成超平面 H，使得残差向量垂直 H。正交回归则通过正交化自变量和因变量，构造一个新正交空间；这个新正交空间基底向量为分解得到主元向量，具体如图 15 所示。

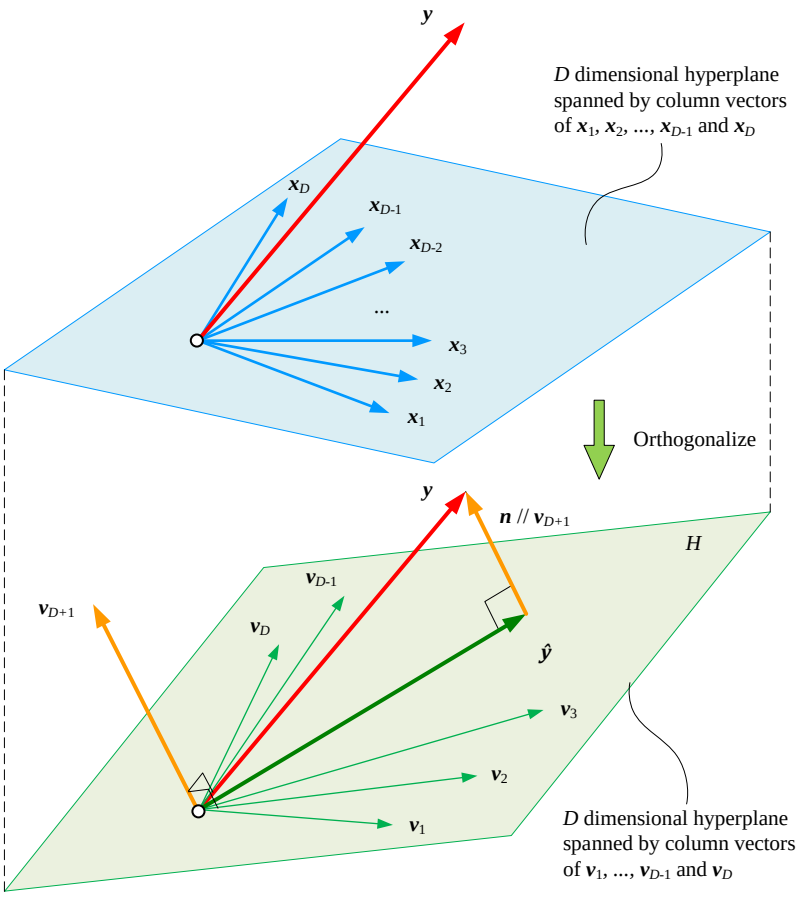


图 15. 几何角度解释多元正交回归

$\boldsymbol{n}$ 平行于数据 $[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}]$ PCA 分解特征值最小特征向量 $\boldsymbol{v}_{D+1}$，构造如下等式并求解 $b_1, \ldots, b_D$：

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_D \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} = k\boldsymbol{v}_{D+1} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ -1 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} v_{1,D+1} \\ v_{2,D+1} \\ \vdots \\ v_{D,D+1} \\ v_{D+1,D+1} \end{bmatrix} \tag{58}$$

求解 k 得到：

$$k = \frac{-1}{v_{D+1,D+1}} \tag{59}$$

求解 $\boldsymbol{b}$ 得到：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_D \end{bmatrix} = \frac{-1}{v_{D+1,D+1}} \begin{bmatrix} v_{1,D+1} \\ v_{2,D+1} \\ \vdots \\ v_{D,D+1} \end{bmatrix} \tag{60}$$

b_0 通过下式求得。

$$b_0 = \mathrm{E}(\boldsymbol{y}) - \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_D \end{bmatrix} \tag{61}$$

图 16 展示多元正交回归运算数据关系。看到数据 $[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}]$ 均参与到了正交化中；正交化结果为 $D+1$ 个正交向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D, \boldsymbol{v}_{D+1}]$。通过向量 $\boldsymbol{v}_{D+1}$ 垂直 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D$ 构成超平面，推导出多元正交回归解析式。

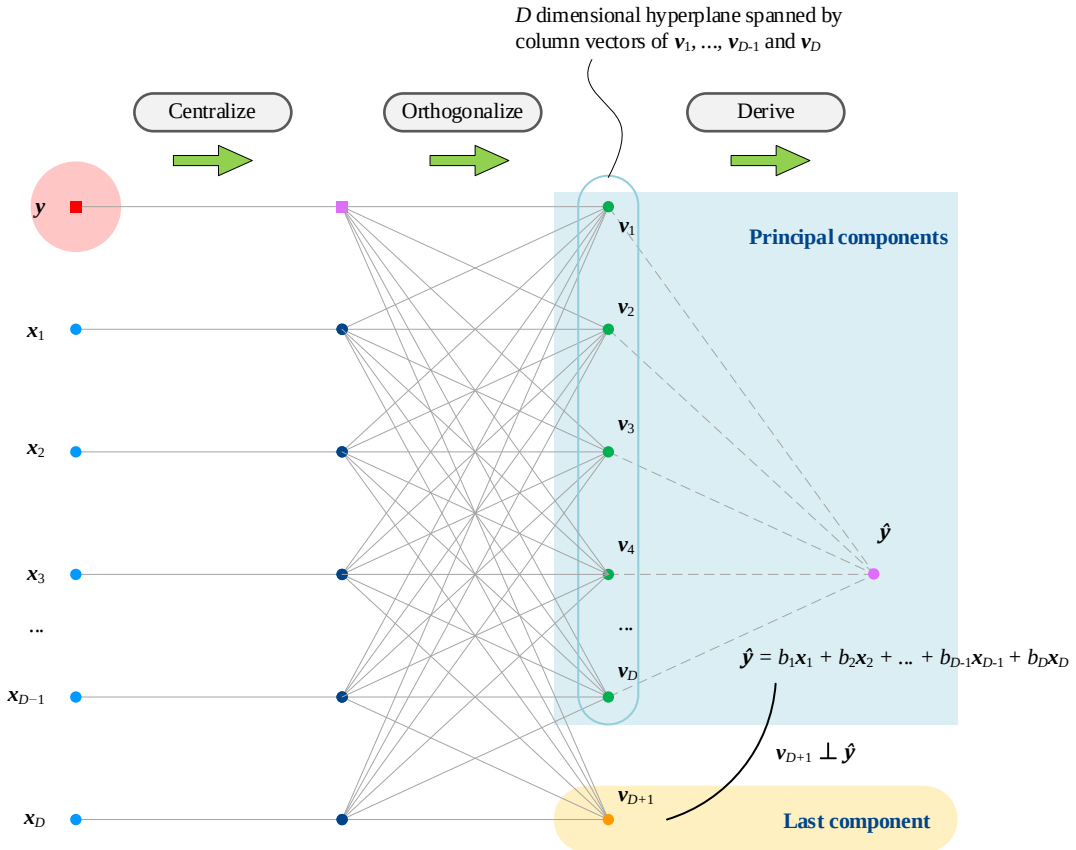


图 16. 多元正交回归运算数据关系

图 17 所示直方图，比较多元 TLS 回归和多元 OLS 回归系数。

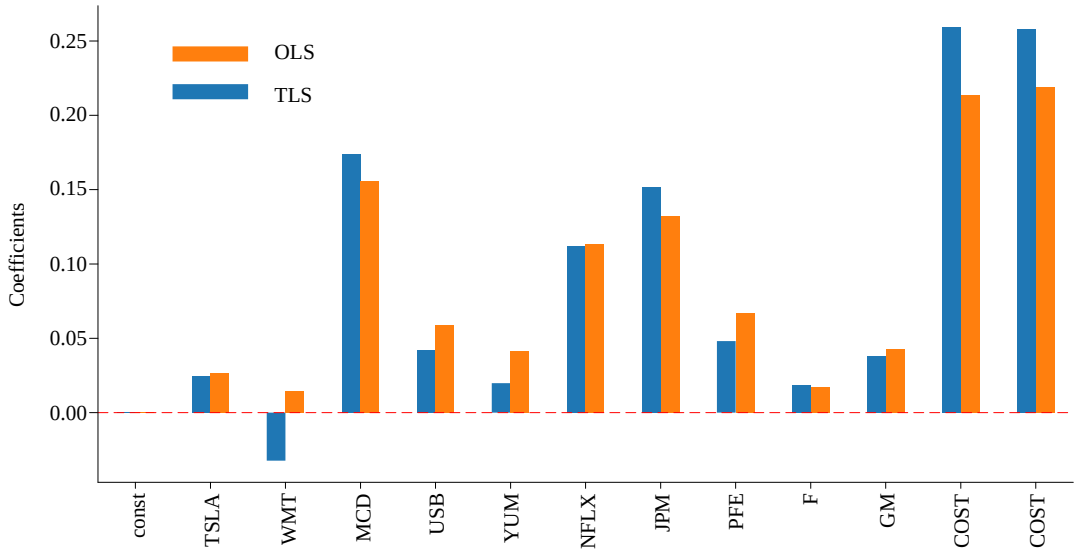


图 17. 比较多元 TLS 回归和多元 OLS 回归系数

Bk7_Ch16_03.ipynb 完成本节回归运算。

正交回归和最小二乘法回归都是回归分析中的方法，但它们之间有很大的区别。

OLS 通过最小化实际观测值与预测值之间的误差平方和，来确定回归系数。这种方法非常直观且易于理解，但存在一些缺点，例如当数据存在多重共线性时，OLS 的估计结果可能会变得不稳定，且估计结果受到极端值的影响较大。

与 OLS 不同，正交回归是一种基于主成分分析的回归方法。它通过将自变量通过主成分分析转换成互相正交的新变量，来消除自变量之间的多重共线性问题，从而提高回归分析的准确性和稳定性。

因此，正交回归方法相对于 OLS 方法更加鲁棒，适用于多重共线性较强的数据集，同时也能够在保证预测准确性的前提下，降低自变量的维度，提高回归模型的可解释性。