偏最小二乘法回归（Partial Least Squares Regression）

JerryLead@ISCAS
csxulijie@gmail.com
2011 年 8 月 20 日星期六

1. 问题

这节我们请出最后的有关成分分析和回归的神器 PLSR。PLSR 感觉已经把成分分析和回归发挥到极致了，下面主要介绍其思想而非完整的教程。让我们回顾一下最早的 Linear Regression 的缺点：如果样例数 m 相比特征数 n 少（m<n）或者特征间线性相关时，由于X^TX（n*n 矩阵）的秩小于特征个数（即X^TX不可逆）。因此最小二乘法$\theta = (X^TX)^{-1}X^T\vec{y}$ 就会失效。

为了解决这个问题，我们会使用 PCA 对样本 X（m*n 矩阵）进行降维，不妨称降维后的 X 为 X’（m*r 矩阵，一般加了’就表示转置，这里临时改变下），那么 X’的秩为 r（列不相关）。

2. PCA Revisited

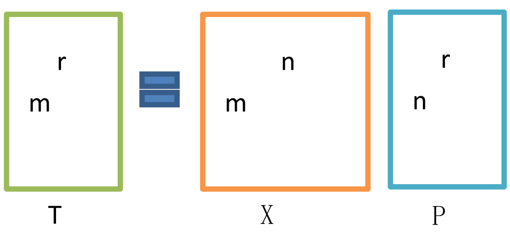
所谓磨刀不误砍柴工，这里先回顾下 PCA。

令 X 表示样本，含有 m 个样例$\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}\}$，每个样例特征维度为 n，$x^{(i)} = \{x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots x_n^{(i)}\}$。假设我们已经做了每个特征均值为 0 处理。

如果 X 的秩小于 n，那么 X 的协方差矩阵$\frac{1}{m}X^TX$的秩小于 n，因此直接使用线性回归的话不能使用最小二乘法来求解出唯一的θ，我们想使用 PCA 来使得X^TX可逆，这样就可以用最小二乘法来进行回归了，这样的回归称为主元回归（PCR）。

PCA 的一种表示形式：

$T = XP$



其中 X 是样本矩阵，P 是 X 的协方差矩阵的特征向量（当然是按照特征值排序后选取的前 r 个特征向量），T 是 X 在由 P 形成的新的正交子空间上的投影（也是样本 X 降维后的新矩阵）。

在线性代数里面我们知道，实对称阵 A 一定存在正交阵 P，使得$P^{-1}AP$为对角阵。因此可以让X^TX的特征向量矩阵 P 是正交的。

其实 T 的列向量也是正交的，不太严谨的证明如下：

$T^T T=(XP)^T(XP)=P^T X^T XP=P^T(P\Lambda P^T)P=P^T P\Lambda P^T P=\Lambda$

其中利用了$X^T X=P\Lambda P^T$，这是求 P 的过程，Λ是对角阵，对角线上元素就是特征值λ。这里对 P 做了单位化，即$P^T P=I$。这就说明了 T 也是正交的， P 是$X^T X$的特征向量矩阵，更进一步，T 是XX^T的特征向量矩阵（$XX^T T=XX^T XP=XP\Lambda P^T P=T\Lambda$）。

这样经过 PCA 以后，我们新的样本矩阵 T（m*r）是满秩的，而且列向量正交，因此直接代入最小二乘法公式，就能得到回归系数θ。

PCA 的另一种表示：

$X=M_1+M_2+M_3+\cdots+M_n=t_1 p_1^T+t_2 p_2^T+t_3 p_3^T+\cdots+t_n p_n^T=TP^T$（假设 X 秩为 n）

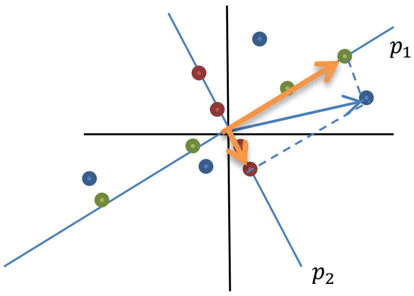
这个公式其实和上面的表示方式$T=XP$没什么区别。

$T=XP\rightarrow TP^T=XPP^T\rightarrow X=TP^T$　（当然我们认为 P 是 n*n 的，因此$P^T=P^{-1}$）

如果 P 是 n*r 的，也就是舍弃了特征值较小的特征向量，那么上面的加法式子就变成了

$X=M_1+M_2+M_3+\cdots+M_r+E=t_1 p_1^T+t_2 p_2^T+t_3 p_3^T+\cdots+t_r p_r^T+E=TP^T+E$

这里的 E 是残差矩阵。其实这个式子有着很强的几何意义，p_i是$X^T X$第i大特征值对应的归一化后的特征向量，t_i就是 X 在p_i上的投影。$t_i p_i^T$就是 X 先投影到p_i上，还以原始坐标系得到的 X’。下面这个图可以帮助理解：



黑色线条表示原始坐标系，蓝色的点是原始的 4 个 2 维的样本点，做完 PCA 后，得到两个正交的特征向量坐标p_1和p_2。绿色点是样本点在p_1上的投影（具有最大方差），红色点是在p_2上的投影。t_1的每个分量是绿色点在p_1上的截距，t_2是红色点在p_2上的截距。$t_i p_i^T$中的每个分量都可以看做是方向为p_i，截距为t_i相应分量大小的向量，如那个p_1上的橘色箭头。$t_i p_i^T$就得到了 X 在p_i的所有投影向量，由于p_1和p_2正交，因此$t_1 p_1^T+t_2 p_2^T$就相当于每个点的橘色箭头的加和，可想而知，得到了原始样本点。

如果舍弃了一些特征向量如p_2，那么通过$t_1 p_1^T$只能还原出原始点的部分信息（得到的绿色点，丢失了蓝色点在另一维度上的信息）。另外，P 有个名字叫做 loading 矩阵，T 叫做 score 矩阵。

3. PLSR 思想及步骤

我们还需要回味一下 CCA 来引出 PLSR。在 CCA 中，我们将 X 和 Y 分别投影到直线得到 u 和 v，然后计算 u 和 v 的 Pearson 系数（也就是 Corr(u,v)），认为相关度越大越好。形式化表示：

Maximize $a^T Cov(x,y)b$ Subject to: $a^T Var(x)a=1, b^T Var(y)b=1$

其中 a 和 b 就是要求的投影方向。

想想 CCA 的缺点：对特征的处理方式比较粗糙，用的是线性回归来表示 u 和 x 的关系，u 也是 x 在某条线上的投影，因此会存在线性回归的一些缺点。我们想把 PCA 的成分提取技术引入 CCA，使得 u 和 v 尽可能携带样本的最主要信息。还有一个更重要的问题，CCA 是寻找 X 和 Y 投影后 u 和 v 的关系，显然不能通过该关系来还原出 X 和 Y，也就是找不到 X 到 Y 的直接映射。这也是使用 CCA 预测时大多配上 KNN 的原因。

而 PLSR 更加聪明，同时兼顾 PCA 和 CCA，并且解决了 X 和 Y 的映射问题。看 PCA Revisited 的那张图，假设对于 CCA，X 的投影直线是p_1，那么 CCA 只考虑了 X 的绿色点与 Y 在某条直线上投影结果的相关性，丢弃了 X 和 Y 在其他维度上的信息，因此不存在 X 和 Y 的映射。而 PLSR 会在 CCA 的基础上再做一步，由于原始蓝色点可以认为是绿色点和红色点的叠加，因此先使用 X 的绿色点t_1对 Y 做回归（$Y = t_1 r_1^T + F$，样子有点怪，两边都乘以r_1就明白了，这里的 Y 类似于线性回归里的X，t_1类似y），然后用 X 的红色点t_2对 Y 的剩余部分 F 做回归（得到r_2，$F = t_2 r_2^T + F'$）。这样 Y 就是两部分回归的叠加。当新来一个 x 时，投影一下得到其绿色点t_1和红色点t_2，然后通过 r 就可以还原出 Y，实现了 X 到 Y 的映射。当然这只是几何上的思想描述，跟下面的细节有些出入。

下面正式介绍 PLSR：

1） 设 X 和 Y 都已经过标准化（包括减均值、除标准差等）。
2） 设 X 的第一个主成分为p_1，Y 的第一个主成分为q_1，两者都经过了单位化。（这里的主成分并不是通过 PCA 得出的主成分）
3） $u_1 = Xp_1$，$v_1 = Yq_1$，这一步看起来和 CCA 是一样的，但是这里的 p 和 q 都有主成分的性质，因此有下面 4）和 5）的期望条件。
4） $Var(u_1) \to max, Var(v_1) \to max$，即在主成分上的投影，我们期望是方差最大化。
5） $Corr(u_1, v_1) \to max$，这个跟 CCA 的思路一致。
6） 综合 4）和 5)，得到优化目标$Cov(u_1, v_1) = \sqrt{Var(u_1)Var(v_1)}Corr(u_1, v_1) \to max$。

形式化一点：

Maximize $\langle Xp_1, Yq_1 \rangle$

Subject to: $\|p_1\| = 1, \|q_1\| = 1$

看起来比 CCA 还要简单一些，其实不然，CCA 做完一次优化问题就完了。但这里的p_1和q_1对 PLSR 来说只是一个主成分，还有其他成分呢，那些信息也要计算的。

先看该优化问题的求解吧：

引入拉格朗日乘子

$$\mathcal{L} = p_1^T X^T Y q_1 - \frac{\lambda}{2}(p_1^T p_1 - 1) - \frac{\theta}{2}(q_1^T q_1 - 1)$$

分别对p_1, q_1求偏导，得

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_1} = X^T Y q_1 - \lambda p_1 = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_1} = Y^T X p_1 - \theta q_1 = 0$$

从上面可以看出$\lambda = \theta$（两边都乘以 p 或 q，再利用=1 的约束）

下式代入上式得到

$$X^TYY^TXp_1 = \lambda^2 p_1$$

上式代入下式得到

$$Y^TXX^TYq_1 = \lambda^2 q_1$$

目标函数$\langle Xp_1, Yq_1\rangle \to p_1^T X^T Y q_1 \to \ p_1^T(\lambda p_1) \to \lambda$，要求最大。

因此p_1就是对称阵X^TYY^TX的最大特征值对应的单位特征向量，q_1就是Y^TXX^TY最大特征值对应的单位特征向量。

可见p_1和q_1是投影方差最大和两者相关性最大上的权衡，而 CCA 只是相关性上最大化。

求得了p_1和q_1，即可得到

$$u_1 = Xp_1$$
$$v_1 = Yq_1$$

这里得到的u_1和v_1类似于上图中的绿色点，只是在绿色点上找到了 X 和 Y 的关系。如果就此结束，会出现与 CCA 一样的不能由 X 到 Y 映射的问题。

利用我们在 PCA Revisited 里面的第二种表达形式，我们可以继续做下去，建立回归方程：

$$X = u_1 c_1^T + E$$
$$Y = v_1 d_1^T + G$$

这里的 c 和 d 不同于 p 和 q，但是它们之间有一定联系，待会证明。E 和 G 是残差矩阵。

我们进行 PLSR 的下面几个步骤：

1） $Y = u_1 r_1^T + F$，使用u_1对 Y 进行回归，原因已经解释过，先利用 X 的主成分对 Y 进行回归。

2） 使用最小二乘法，计算 c，d，r 分别为：

$$c_1 = \frac{X^T u_1}{\|u_1\|^2}$$
$$d_1 = \frac{Y^T v_1}{\|v_1\|^2}$$
$$r_1 = \frac{Y^T u_1}{\|u_1\|^2}$$

实际上这一步计算出了各个投影向量。

p_1和c_1的关系如下：

$$p_1^T c_1 = p_1^T \frac{X^T u_1}{\|u_1\|^2} = \frac{u_1^T u_1}{\|u_1\|^2} = 1$$

再谈谈p_1和c_1的关系，虽然这里将c_1替换成p_1可以满足等式要求和几何要求，而且p_1就是 X 投影出u_1的方向向量。但这里我们想做的是回归（让 E 尽可能小），因此根据最小二乘法得到的c_1一般与p_1不同。

3） 将剩余的 E 当做新的 X，剩余的 F 当做新的 Y，然后按照前面的步骤求出p_2和q_2，得到：

$$u_2 = Ep_2$$
$$v_2 = Fq_2$$

目标函数$\langle Ep_2, Fq_2\rangle \to p_2^T E^T F q_2 \to \ p_2^T(\lambda p_2) \to \lambda$，这个与前面一样，$p_2$和$q_2$分别是新的$E^TFF^TE$和$F^TEE^TF$的最大特征值对应的单位特征向量。

4） 计算得到第二组回归系数：

$$c_2 = \frac{E^T u_2}{\|u_2\|^2}$$

$$r_2 = \frac{F^T u_2}{\|u_2\|^2}$$

这里的u_2和之前的u_1是正交的，证明如下：

$$u_1^T u_2 = u_1^T E p_2 = u_1^T (X - u_1 c_1^T) p_2 = \left[u_1^T X - u_1^T u_1 \frac{u_1^T X}{\|u_1\|^2} \right] p_2 = 0$$

其实u_i和不同的u_j都是相互正交的。

同样p_i和不同的p_j也是正交的。

$$p_1^T p_2 = p_1^T \frac{1}{\lambda} E^T F q_2 = p_1^T \frac{1}{\lambda} E^T v_2 = \frac{1}{\lambda} p_1^T (X - u_1 c_1^T)^T v_2$$

$$= \frac{1}{\lambda} (X p_1 - u_1 c_1^T p_1)^T v_2 = \frac{1}{\lambda} (u_1 - u_1)^T v_2 = 0$$

但c_i和不同的c_j一般不是正交的。

5） 从上一步得到回归方程：

$$E = u_2 c_2^T + E'$$
$$F = u_2 r_2^T + F'$$

如果还有残差矩阵的话，可以继续计算下去。

6） 如此计算下去，最终得到：

$$X = u_1 c_1^T + u_2 c_2^T + u_3 c_3^T + \cdots + u_n c_n^T + E$$
$$Y = u_1 r_1^T + u_2 r_2^T + u_3 r_3^T + \cdots + u_n r_n^T + F$$

与 PCA 中表达式不一样的是这里的c_i和不同的c_j之间一般不是正交的。

其实这里不必一直计算到 n，可以采用类似于 PCA 的截尾技术，计算到合适的 r 即可。关于 r 数目的选取可以使用交叉验证方法，这与 PCA 里面的问题类似。

另外，p_i和c_j的关系是$p_i^T c_j = 1 (i = j), p_i^T c_j = 0 (i \neq j)$

上面的公式如果写成矩阵形式如下：

$$X = UC^T + E$$
$$Y = UR^T + F = XPR^T + F = XB + F$$

这就是$X \to Y$的回归方程，其中$B = PR^T$。

在计算过程中，收集一下 P 和 R 的值即可。

7） 使用 PLSR 来预测。

从 6)中可以发现 Y 其实是多个回归的叠加（其实$u_1 r_1^T$已经回归出 Y 的最主要信息）。我们在计算模型的过程中，得到了 p 和 r。那么新来一个 x，首先计算 u（这里的 u 变成了实数，而不是向量了），得到

$u_1 = x^T p_1,\ u_2 = x^T p_2,\ u_3 = x^T p_3 \ldots$

然后代入 Y 的式子即可求出预测的 y 向量，或者直接代入$y^T = x^T B$

8） 至此，PLSR 的主要步骤结束。

4. PLSR 相关问题

1） 其实不需要计算 v 和 q，因为我们使用 u 去做 Y 的回归时认为了$u_i = cv_i$，其中 c 是常数。之所以这样是因为前面提到过的 Y 可以首先在 X 的主要成分上做回归，然后将 Y 的残差矩阵在 X 的残差矩阵的主要成分上做回归。最后 X 的各个成分回归之和就是 Y。

2） 一般使用的 PLSR 求解方法是迭代化的求解方法，称之为 NIPALS，还有简化方法 SIMPLS，这些方法在一般论文或参考文献中提供的网址里都有，这里就不再贴了。

3） PLSR 里面还有很多高级话题，比如非线性的 Kernel PLSR，异常值检测，带有缺失值的处理方法，参数选择，数据转换，扩展的层次化模型等等。可以参考更多的论文有针对性的研究。

5. 一些感悟

本文试图将 PCA、CCA、PLSR 综合起来对比、概述和讨论，不免对符号的使用稍微都点混乱，思路也有穿插混淆。还是以推导出的公式为主进行理解吧。另外，本文有很多个人理解在里面，难免有误，还望批评指正。提供 PDF 版本，只是为了格式好看些。

之前也陆陆续续地关注了一些概率图模型和时间序列分析，以后可能会转向介绍这两方面的内容，也会穿插一些其他的内容。说实话，自学挺吃力的，尤其对我这样一个不是专业搞 ML 的人来说，也需要花大量时间。感叹国外的资料多，lecture 多，视频多，可惜因为我这的网速和 GFW 原因，看不了教学视频，真是遗憾。

6. 参考文献：

1. PARTIAL LEAST-SQUARES REGRESSION: A TUTORIAL. Paul Geladi and Bruce R. Kowalski
2. 王惠文一偏最小二乘回归方法及应用
3. Partial Least Squares (PLS) Regression.
4. A Beginner's Guide to Partial Least Squares Analysis
5. Nonlinear Partial Least Squares: An Overview
6. http://www.statsoft.com/textbook/partial-least-squares/
7. Canonical Correlation a Tutorial
8. Pattern Recognition And Machine Learning