41 | 线性回归（下）：如何使用最小二乘法进行效果验证？

2019-03-20 黄申

程序员的数学基础课 进入课程 >

讲述：黄申
时长 09:31 大小 8.73M

你好，我是黄申。

上一节我们已经解释了最小二乘法的核心思想和具体推导过程。今天我们就用实际的数据操练一下，这样你的印象就会更加深刻。我会使用几个具体的例子，演示一下如何使用最小二乘法的结论，通过观测到的自变量和因变量值，来推算系数，并使用这个系数来进行新的预测。

基于最小二乘法的求解

假想我们手头上有一个数据集，里面有 3 条数据记录。每条数据记录有 2 维特征，也就是 2 个自变量，和 1 个因变量。

数据记录ID	特征1（自变量x1）	特征2（自变量x2）	因变量
1	0	1	1.5
2	1	-1	-0.5
3	2	8	14

如果我们假设这些自变量和因变量都是线性的关系，那么我们就可以使用如下这种线性方程，来表示数据集中的样本：

$$b_1 \cdot 0 + b_2 \cdot 1 = 1.5$$
$$b_1 \cdot 1 - b_2 \cdot 1 = -0.5$$
$$b_1 \cdot 2 + b_2 \cdot 8 = 14$$

也就是说，我们通过观察数据已知了自变量 x_1、x_2 和因变量 _y_ 的值，而要求解的是 b_1 和 b_2 这两个系数。如果我们能求出 b_1 和 b_2，那么在处理新数据的时候，就能根据新的自变量 x_1 和 x_2 的取值，来预测 y 的值。

可是我们说过，由实际项目中的数据集所构成的这类方程组，在绝大多数情况下，都没有精确解。所以这个时候我们没法使用之前介绍的高斯消元法，而是要考虑最小二乘法。根据上一节的结论，我们知道对于系数矩阵 B，有：

$$B = (X'X)^{-1}X'Y$$

既然有了这个公式，要求 B 就不难了，让我们从最基本的几个矩阵开始。

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix}$$

$$Y = \begin{bmatrix} 1.5 \\ -0.5 \\ 14 \end{bmatrix}$$

$$X' = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 15 \\ 15 & 66 \end{bmatrix}$$

矩阵 $(X'X)^{-1}$ 的求解稍微繁琐一点。逆矩阵的求法我还没讲解过，之前我们说过线性方程组之中，高斯消元和回代的过程，就是把系数矩阵变为单位矩阵的过程。我们可以利用这点，来求解 X^{-1}。我们把原始的系数矩阵 X 列在左边，然后把单位矩阵列在右边，像 $[X|I]$ 这种形式，

其中 I 表示单位矩阵。

然后我们对左侧的矩阵进行高斯消元和回代，把左边矩阵 X 变为单位矩阵。同时，我们也把这个相应的矩阵操作运用在右侧。这样当左侧变为单位矩阵之后，那么右侧的矩阵就是原始矩阵 X 的逆矩阵 X^{-1}，具体证明如下：

$[X|I]$
$[X^{-1}X|X^{-1}I]$
$[I|X^{-1}I]$
$[I|X^{-1}]$

好了，给定下面的 $X'X$ 矩阵之后，我们使用上述方法来求 $(X'X)^{-1}$ 。我把具体的推导过程列在了这里。

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 15 & 66 & 0 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 0 & 21 & -3 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 0 & 22/7 & -5/7 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 22/35 & -1/7 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right]$$

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 22/35 & -1/7 \\ -1/7 & 1/21 \end{bmatrix}$$

求出 $(X'X)^{-1}$ 之后，我们就可以使用 $B=(X'X)^{-1}X'Y$ 来计算矩阵 B。

$$(X'X)^{-1}X' = \begin{bmatrix} 22/35 & -1/7 \\ -1/7 & 1/21 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{bmatrix}$$

$$B = (X'X)^{-1}X'Y = \begin{bmatrix} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.5 \\ -0.5 \\ 14 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.5 \end{bmatrix}$$

最终，我们求出系数矩阵为 $[11.5]$，也就是说 $b_1 = 1, b_2 = 1.5$。实际上，这两个数值是精确解。我们用高斯消元也是能获得同样结果的。接下来，让我稍微修改一下 y 值，让这个方程组没有精确解。

$$b_1 \cdot 0 + b_2 \cdot 1 = 1.4$$
$$b_1 \cdot 1 - b_2 \cdot 1 = -0.48$$
$$b_1 \cdot 2 + b_2 \cdot 8 = 13.2$$

你可以尝试高斯消元法对这个方程组求解，你会发现只要两个方程就能求出解，但是无论是哪两个方程求出的解，都无法满足第三个方程。

那么通过最小二乘法，我们能不能求导一个近似解，保证 _ε_ 足够小呢？下面，让我们遵循之前求解 $(X'X)^{-1}X'Y$ 的过程，来计算 B。

$$Y=\begin{bmatrix}1.4\\-0.48\\13.2\end{bmatrix}$$

$$(X'X)^{-1}X'=\begin{bmatrix}22/35 & -1/7\\-1/7 & 1/21\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1 & 2\\1 & -1 & 8\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1/7 & 27/35 & 4/35\\1/21 & -4/21 & 2/21\end{bmatrix}$$

$$B=(X'X)^{-1}X'Y=\begin{bmatrix}-1/7 & 27/35 & 4/35\\1/21 & -4/21 & 2/21\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1.4\\-0.48\\13.2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.938\\1.415\end{bmatrix}$$

计算完毕之后，你会发现两个系数的值分别变为 $b_1=0.938, b_2=1.415$。由于这不是精确解，所以让我们看看有了这系数矩阵 B 之后，原有的观测数据中，真实值和预测值的差别。

首先我们通过系数矩阵 B 和自变量矩阵 X 计算出来预测值。

$$\hat{Y}=XB=\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & -1\\2 & 8\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.938\\1.415\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.415\\-0.477\\13.196\end{bmatrix}$$

然后是样本数据中的观测值。这里我们假设这些值是真实值。

$$Y = \begin{bmatrix} 1.4 \\ -0.48 \\ 13.2 \end{bmatrix}$$

根据误差 ε 的定义，我们可以得到：

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - \hat{y}\right)^2 = \sqrt{(1.4-1.415)^2 + (-0.48+0.477)^2 + (13.2-13.196)^2} = 0.0158$$

说到这里，你可能会怀疑，通过最小二乘法所求得的系数 $b_1 = 0.949$ 和 $b_2 = 1.415$，是不是能让 ε 最小呢？这里，我们随机的修改一下这两个系数，变为 $b_1 = 0.95$ 和 $b_2 = 1.42$，然后我们再次计算预测的 y 值和 ε。

$$\hat{Y}_1 = XB_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.95 \\ 1.42 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.42 \\ -0.47 \\ 13.26 \end{bmatrix}$$

很明显，0.064 是大于之前的 0.0158。

这两次计算预测值 _y_ 的过程，其实也是我们使用线性回归，对新的数据进行预测的过程。简短地总结一下，线性回归模型根据大量的训练样本，推算出系数矩阵 B，然后根据新数据的自变量 X 向量或者矩阵，计算出因变量的值，作为新数据的预测。

Python 代码实现

这一部分，我们使用 Python 的代码，来验证一下之前的推算结果是不是正确，并看看最小二乘法和 Python sklearn 库中的线性回归，这两种结果的对比。

首先，我们使用 Python numpy 库中的矩阵操作来实现最小二乘法。主要的函数操作涉及矩阵的转置、点乘和求逆。具体的代码和注释我列在了下方。

复制代码

```
from numpy import *

x = mat([[0,1],[1,-1],[2,8]])
y = mat([[1.4],[-0.48],[13.2]])

# 分别求出矩阵 X'、X'X、(X'X) 的逆
# 注意，这里的 I 表示逆矩阵而不是单位矩阵
print("X 矩阵的转置 X'：\n", x.transpose())
print("\nX'点乘 X：\n", x.transpose().dot(x))
print("\nX'X 矩阵的逆\n", (x.transpose().dot(x)).I)

print("\nX'X 矩阵的逆点乘 X'\n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()))
print("\n 系数矩阵 B：\n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()).dot(y))
```

通过上述代码，你可以看到每一步的结果，以及最终的矩阵 B。你可以把输出结果和之前手动推算的结果进行对比，看看是不是一致。

除此之外，我们还可把最小二乘法的线性拟合结果和 sklearn 库中的 LinearRegression().fit() 函数的结果相比较，具体的代码和注释我也放在了这里。

复制代码

```
import pandas as pd
from sklearn.linear_model import LinearRegression

df = pd.read_csv("/Users/shenhuang/Data/test.csv")
df_features = df.drop(['y'], axis=1)     #Dataframe 中除了最后一列，其余列都是特征，或者说
df_targets = df['y']                     #Dataframe 最后一列是目标变量，或者说因变量

print(df_features, df_targets)
regression = LinearRegression().fit(df_features, df_targets)        # 使用特征和目标数据，
print(regression.score(df_features, df_targets))        # 拟合程度的好坏
print(regression.intercept_)
print(regression.coef_)            # 各个特征所对应的系数
```

其中，test.csv 文件的内容我也列在了这里。

x_1, x_2, y
$0, 1, 1.4$
$1, -1, -0.48$
$2, 8, 13.2$

这样写是为了方便我们使用 pandas 读取 csv 文件并加载为 dataframe。

在最终的结果中，1.0 表示拟合程度非常好，而 -0.014545454545452863 表示一个截距，[0.94909091 1.41454545] 表示系数 b_1 和 b_2 的值。这个结果和我们最小二乘法的结果有所差别，主要原因是 LinearRegression().fit() 默认考虑了有线性函数存在截距的情况。那么我们使用最小二乘法是不是也可以考虑有截距的情况呢？答案是肯定的，不过我们首先要略微修改一下方程组和矩阵 X。如果我们假设有截距存在，那么线性回归方程就要改写为：

$$b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + \ldots + b_{n-1} \cdot x_{n-1} + b_n \cdot x_n = y$$

其中，b_0 表示截距，而我们这里的方程组用例就要改写为：

$b_0 + b_1 \cdot 0 + b_2 \cdot 1 = 1.4$
$b_0 + b_1 \cdot 1 - b_2 \cdot 1 = -0.48$
$b_0 + b_1 \cdot 2 + b_2 \cdot 8 = 13.2$

而矩阵 X 要改写为：

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 8 \end{bmatrix}$$

然后我们再执行下面这段代码。

复制代码

```
from numpy import *

x = mat([[1,0,1],[1,1,-1],[1,2,8]])
y = mat([[1.4],[-0.48],[13.2]])

print("\n 系数矩阵 B: \n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()).dot(y))
```

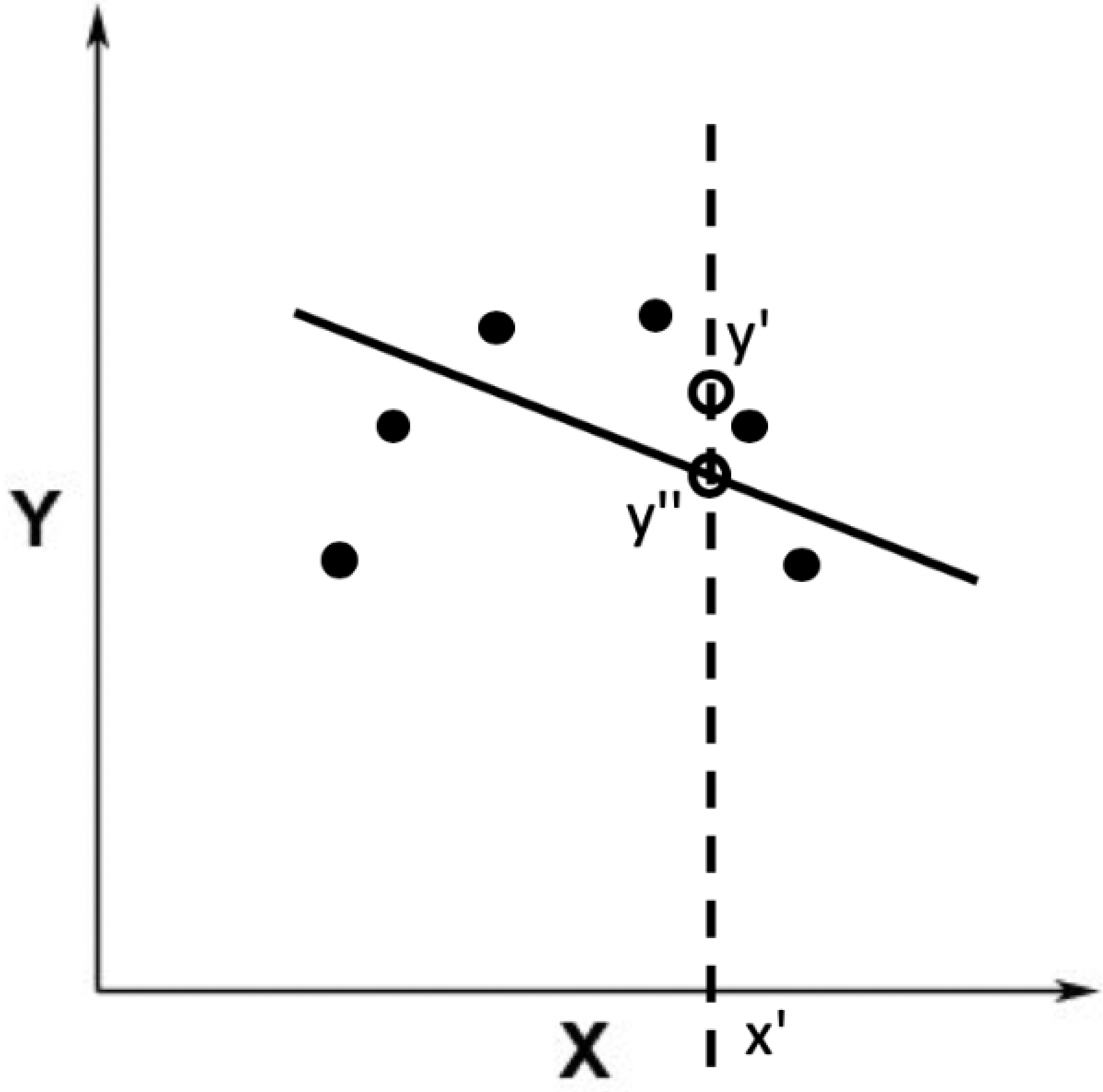
你就会得到：

复制代码

```
 系数矩阵 B:
     [[-0.01454545]
     [ 0.94909091]
     [ 1.41454545]]
```

这个结果和 LinearRegression().fit() 的结果就一致了。

需要注意的是，使用线性回归的时候，我们都有一个前提假设，那就是数据的自变量和因变量之间现线性关系。如果不是线性关系，那么使用线性模型来拟合的效果一定不好。比如，之前在解释欠拟合的时候，我用过下面这个例子。



上面这张图的数据分布并没有表达线性关系，所以我们需要对原始的数据进行非线性的变换，或者是使用非线性的模型来拟合。

那么，我们如何判断一个数据集是不是能用线性模型表示呢？在线性回归中，我们可以使用决定系数 R2。这个统计指标使用了回归平方和与总平方和之比，是反映模型拟合度的重要指标。它的取值在 0 到 1 之间，越接近于 1 表示拟合的程度越好、数据分布越接近线性关系。随着自变量个数的增加，R2 将不断增大，因此我们还需要考虑方程所包含的自变量个数对 R2 的影响，这个时候可使用校正的决定系数 Rc2。所以，在使用各种科学计算库进行线性回归时，你需要关注 R2 或者 Rc2，来看看是不是一个好的线性拟合。在之前的代码实践中，我们提到的 regression.score 函数，其实就是返回了线性回归的 R2。

总结

今天我们使用了具体的案例来推导最小二乘法的计算过程，并用 Python 代码进行了验证。通过最近 3 节的讲解，相信你对线性方程组求精确解、求近似解、以及如何在线性回归中运用这些方法，有了更加深入的理解。

实际上，从广义上来说，最小二乘法不仅可以用于线性回归，还可以用于非线性的回归。其主要思想还是要确保误差ε最小，但是由于现在的函数是非线性的，所以不能使用求多元方程求解的办法来得到参数估计值，而需要采用迭代的优化算法来求解，比如梯度下降法、随机梯度下降法和牛顿法。

思考题

我这里给出一个新的方程组，请通过最小二乘法推算出系数的近似解，并使用你熟悉的语言进行验证。

$$
\begin{aligned}
&b_1 + b_2 \cdot 3 + b_3 \cdot (-7) = -7.5 \\
&b_1 \cdot 2 + b_2 \cdot 5 + b_3 \cdot 4 = 5.2 \\
&b_1 \cdot (-3) + b_2 \cdot (-7) + b_3 \cdot (-2) = -7.5 \\
&b_1 \cdot 1 + b_2 \cdot 4 + b_3 \cdot (-12) = -15
\end{aligned}
$$

欢迎留言和我分享，也欢迎你在留言区写下今天的学习笔记。你可以点击“请朋友读”，把今天的内容分享给你的好友，和他一起精进。

上一篇 40 | 线性回归（中）：如何使用最小二乘法进行直线拟合？

下一篇 42 | PCA主成分分析（上）：如何利用协方差矩阵来降维？

精选留言 (5)

写留言

余泽锋
2019-04-24

import numpy as np
X = np.mat([[1, 3, -7], [2, 5, 4], [-3, -7, -2], [1, 4, -12]])
Y = np.mat([[-7.5], [5.2], [-7.5], [-15]])
B1 = X.transpose().dot(X).I
B2 = B1.dot(X.transpose())...

展开

叮当猫
2019-04-17

文中有提到，如何判断一个数据集是否可以用线性模型来表示，可以使用决定系数R2，随着自变量个数不断增加，R2将不断增大，这时需要用Rc2，而其中R2就是regression.score，那请问Rc2是库里面的什么呢？

作者回复: 这是个好问题，我查了sklearn.linear_mode好像不提供这个数据。

你可以尝试一下statsmodels.api.OLS这个包，里面应该可以返回rsquared_adj

qinggeouy...
2019-03-30

"""
思考题同理
"""
x = np.mat([[1, 3, -7], [2, 5, 4], [-3, -7, -2], [1, 4, -12]])
y = np.mat([[-7.5], [5.2], [-7.5], [-15]])...

展开

Cest la ...
2019-03-25

老师好! 后面可以来一节PLS偏最小二乘的原理讲解和应用么

作者回复: 可以考虑到后面加餐的时候来一篇

Joe
2019-03-21

回答与疑问：
1. 非线性关系的数据拟合，可以先将自变量转为非线性。如转化为多项式（sklearn的PolynomialFeatures）。再用线性回归的方法去拟合。
2. 请问老师对于求解逆矩阵有没有什么高效的方法？
附上以前写的polyfit方法，请老师指点。谢谢...
展开

作者回复: 写得很好，至于逆矩阵更好的求法，我要查一下资料看看有无更优的解。