A Story of OLS Linear Regression

24 鸡兔同笼 2

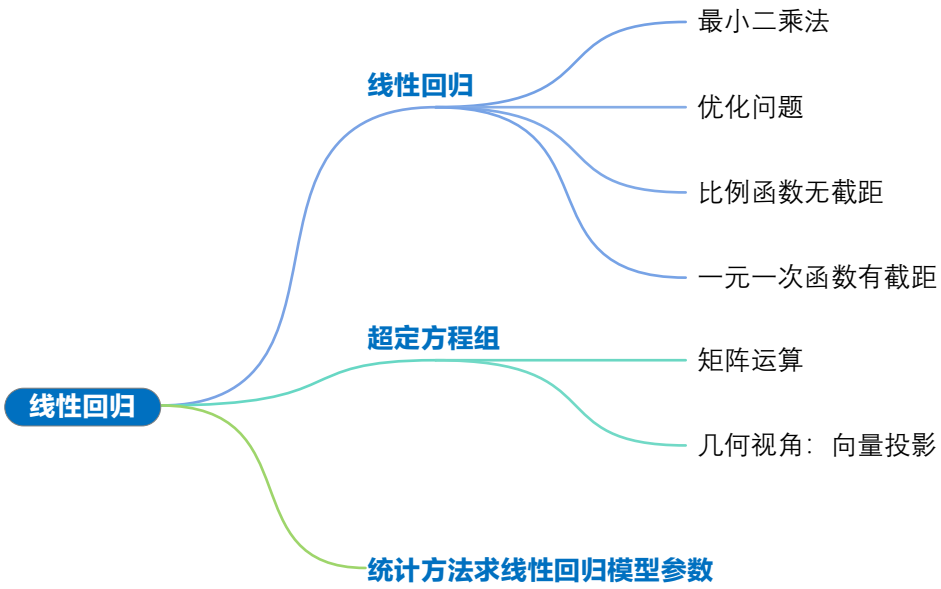
之线性回归风暴

只有带着对数学纯粹的爱去接近她，数学才会向你展开它的神秘所在。

Mathematics reveals its secrets only to those who approach it with pure love, for its own beauty.

—— 阿基米德 (Archimedes) | 古希腊数学家、物理学家 | 287 ~ 212 BC

- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- `matplotlib.pyplot.scatter()` 绘制散点图
- `numpy.array()` 创建 array 数据类型
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.linalg.solve()` 求解线性方程组
- `numpy.linspace()`产生连续均匀向量数值
- `numpy.meshgrid()` 创建网格化数据
- `numpy.random.randint()` 产生随机整数
- `numpy.random.seed()` 设定初始化随机状态
- `plot_wireframe()` 绘制三维单色线框图
- `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图
- `sympy.abc` 引入符号变量
- `sympy.diff()` 求解符号导数和偏导解析式
- `sympy.evalf()` 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- `sympy.simplify()` 简化代数式
- `sympy.solvers.solve()` 符号方程求根
- `sympy.symbols()` 定义符号变量
- `sympy.utilities.lambdify.lambdify()` 将符号代数式转化为函数



24.1 鸡兔数量的有趣关系

清江一曲抱村流，长夏江村事事幽。

舶来的线性代数知识悄悄地改变着小村，村民们凡事都要用这个数学工具探究一番。

大家这次盯上了一个养鸡养兔的小妙招。老人常言“两鸡一兔，百毒不入”。也就是说，不管最开始养多少鸡兔，当鸡兔大概达到 2:1 这个比例，便达到某种神奇的平衡，鸡兔都健健康康。

农夫决定一探究竟，他搜集村中 20 位养鸡大户的鸡兔数量，总结在表 1。

表 1. 20 户农户鸡兔数量关系

养鸡数量，y	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88	44	33	57	16	22	52
养兔数量，x	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52	20	18	33	12	11	28

将表 1 数据以散点方式绘制在方格纸上得到图 1。老农隐隐觉得这个 2:1 的比例关系好像的确存在。

但是，农夫并不满足于此，他想找到鸡兔达到平衡时确切的数学关系；于是乎，他想到了想到了比例函数和一元函数，决心探究一番。

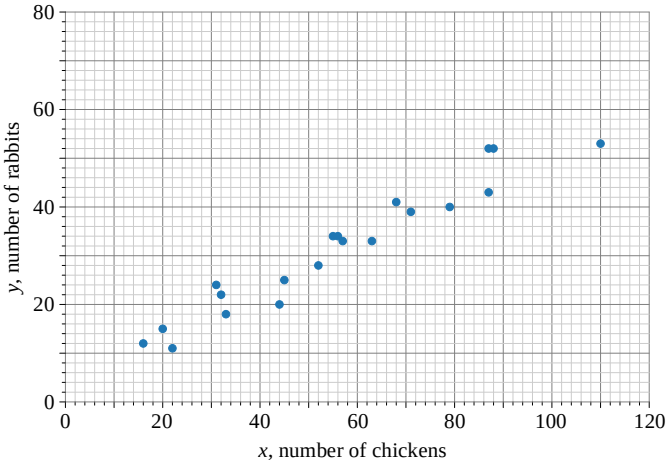


图 1. 平衡时，各家鸡兔数量关系

24.2 试试比例函数：$y = ax$

观察图 1，农夫首先想到用比例函数。

比例函数假设平衡时鸡兔数量好像呈现的某种比例关系：

$$\hat{y} = ax \tag{1}$$

其中，为了区分数据 y，$\hat{y}$ 上加了个帽子表示预测。

农夫在方格纸上，用红笔画出一系列通过原点的斜线，得到图 2。

老农先是觉得 a 取 0.5 比较好，但是又觉得 a 取 0.6 也不差。他隐约觉得 a 应该在 0.5 和 0.6 之间。

如何找到合理的 a 值？

这个问题让他陷入了沉思。显然，他需要找到一条红线足够靠近图 2 所有散点。那么，问题来了——如何量化“足够靠近”？

他决定先找几个值试试看。

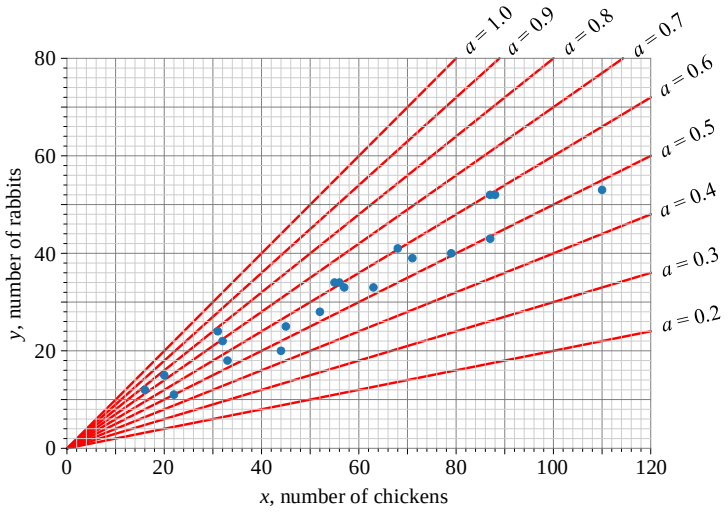


图 2. 平衡时，各家鸡兔数量好像呈现某种比例关系

$a = 0.4$

农夫先试了 $a = 0.4$，这时比例函数为：

$$\hat{y} = 0.4x \tag{2}$$

将 $x = 110$ (鸡的数量) 代入 (2)，得到 44 (兔的数量) 这个预测值。

$$\hat{y}\big|_{x=110} = 0.4 \times 110 = 44 \tag{3}$$

当 $x = 110$ 时，真实值 y 和预测值 $\hat{y}$ 两者的误差 e 为：

$$e\big|_{x=100} = y - \hat{y} = 53 - 44 = 9 \tag{4}$$

农夫觉得从这个误差值入手，可能会找到合适的 a 值，并确定一条合理的比例函数。

于是乎，农夫开始计算 $\hat{y} = 0.4x$ 这个比例函数条件下，图 1 中每个点的误差值。

最后，他得到图 3。图中，竖直黄色线段代表实际数据和比例函数估值之间的误差，也就是不同 x 对应的 e。

农夫翻阅舶来的数学典籍，发现了最小二乘法；仔细研读后，他决定拿来一试。

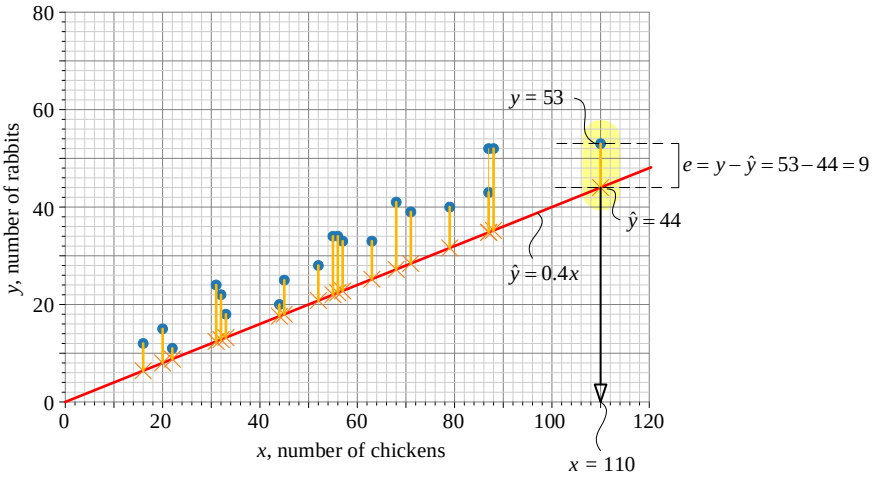


图 3. a = 0.4 时，实际数据和比例函数估值之间的误差

24.3 最小二乘法

书上写道：“最小二乘法通过最小化误差的平方和，寻找数据的最佳回归参数匹配。”

误差平方和最小化

农夫已经得到了一系列 e 值，只需要对 e 平方！

他把计算得到的分步数据记录在表 2 中。表第一、二行数值分别为鸡、兔实际数量，第三行为 $\hat{y} = 0.4x$ 估算得到的兔子数量，第四行为误差 $e = y - \hat{y}$，即实际兔数减去估算兔数，第五行为误差的平方值 e^2。

表 2 第五行 e^2 求和得到误差平方和为 1756.28。

表 2. a 取 0.4 时，估计值、误差、误差平方

养鸡数量 x	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88
养兔数量 y	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52
$\hat{y}=0.4x$ 估算兔数	12.8	44	28.4	31.6	18	8	22.4	22	34.8	27.2	34.8	25.2	12.4	35.2
误差 e	9.2	9	10.6	8.4	7	7	11.6	12	17.2	13.8	8.2	7.8	11.6	16.8
误差平方 e^2	84.6	81	112.3	70.5	49	49	134.5	144	295.8	190.4	67.2	60.8	134.5	282.2

农夫突然意识到，e^2 不就是以 e 的绝对值为边长的正方形面积嘛！真是“行到水穷处，坐看云起时。”

有了这个几何视角，他绘制得到了图 4。图 4 中所有的正方形的边长为不同 x 位置的误差 e。将这些蓝色正方形面积相加得到面积和，即误差之和：

$$\sum_{i=1}^{20}\left(e^{(i)}\right)^2=\sum_{1}^{20}\left(y^{(i)}-\hat{y}^{(i)}\right)^2=\sum_{1}^{20}\left(y^{(i)}-ax^{(i)}\right)^2 \tag{5}$$

找到让上式值最小的 a，就可以让图 4 中正方形面积之和最小。

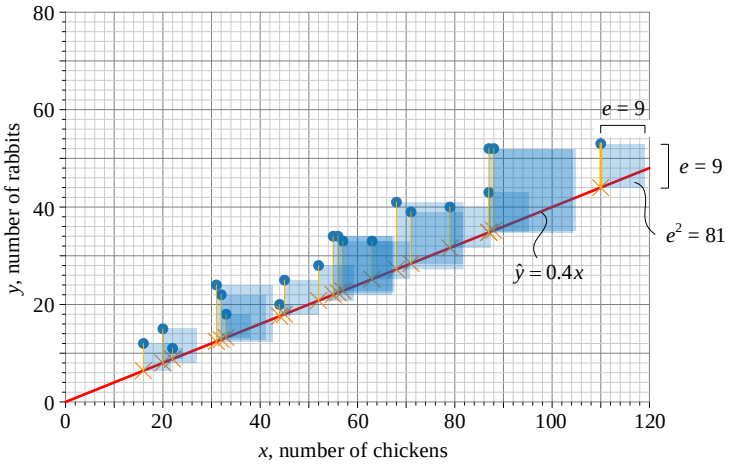


图 4. a = 0.4 时，可视化误差平方

a = 0.5

他决定再试几个值，比如 a = 0.5 时，比例函数为：

$$\hat{y}=0.5x \tag{6}$$

表 3 给出 a 取 0.5 时，不同 x 对应的估计值 $\hat{y}$ 、误差 e、误差平方 e^2。

经过计算可以发现 (6) 这个比例函数模型条件下，误差平方和为 422。

几何角度来看，图 5 中的正方形面积之和看上去确实比图 4 要小。

表 3. a 取 0.5 时，估计值、误差、误差平方

养鸡数量 x	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88
养兔数量 y	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52
$\hat{y}=0.5x$ 估算兔数	16	55	35.5	39.5	22.5	10	28	27.5	43.5	34	43.5	31.5	15.5	44
误差 e	6	−2	3.5	0.5	2.5	5	6	6.5	8.5	7	−0.5	1.5	8.5	8
误差平方 e^2	36	4	12.25	0.25	6.25	25	36	42.25	72.25	49	0.25	2.25	72.25	64

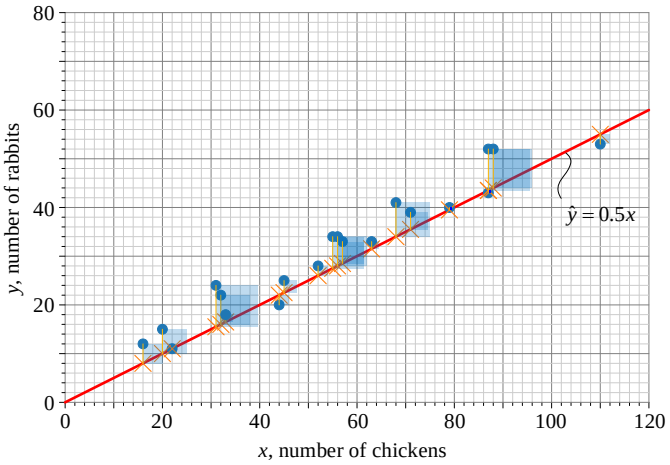


图 5. a = 0.5 时，可视化误差平方

a = 0.6

农夫又试了试 a = 0.6，比例函数为：

$$\hat{y}=0.6x \tag{7}$$

经过表 4 计算求得误差平方和为 396.28。图 6 可视化误差平方和。

农夫感觉到，似乎在 0.5 和 0.6 之间存在一个更好的 a，能够让误差平方和最小。

但是，这样徒手计算，一个一个值算，终究不是办法。

表 4. a 取 0.6 时，估计值、误差、误差平方

养鸡数量 x	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88
养兔数量 y	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52
$\hat{y}=0.6x$ 估算兔数	19.2	66	42.6	47.4	27	12	33.6	33	52.2	40.8	52.2	37.8	18.6	52.8
误差 e	2.8	−13	−3.6	−7.4	−2	3	0.4	1	−0.2	0.2	−9.2	−4.8	5.4	−0.8
误差平方 e^2	7.84	169	12.96	54.76	4	9	0.16	1	0.04	0.04	84.64	23.04	29.16	0.64

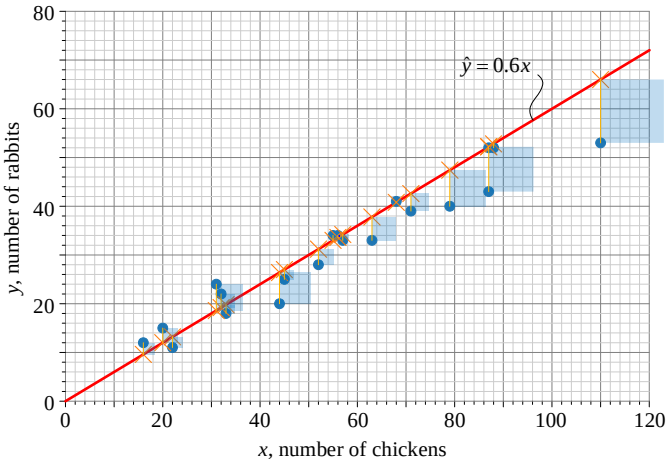


图 6. a = 0.6 时，可视化误差平方

目标函数

观察 (5)，他发现 $x^{(i)}$ 和 $y^{(i)}$ 都是给定数值，而式中唯一的变量就是 a。也就是说，把 a 看做一个未知数，(5) 可以写成一个函数 $f(a)$:

$$f(a)=\sum_{1}^{20}\left(y^{(i)}-ax^{(i)}\right)^2 \tag{8}$$

而最小化误差对应的就是让上述函数值取得最小值！农夫想到这里，高兴地不住拍手。

农夫把所有的 $x^{(i)}$ 和 $y^{(i)}$ 代入上式，整理并得到函数具体解析式:

$$f(a)=65428a^2-72228a+20179 \tag{9}$$

他惊奇地发现，竟然得到了一元二次函数！这个函数，我懂啊！

如图 7 所示，这个一元二次函数的图像是一条开口朝上的抛物线，具有凸性。显然，函数在对称轴处取得最小值。而这个一元二次函数就是优化问题中的目标函数，优化变量为 a。

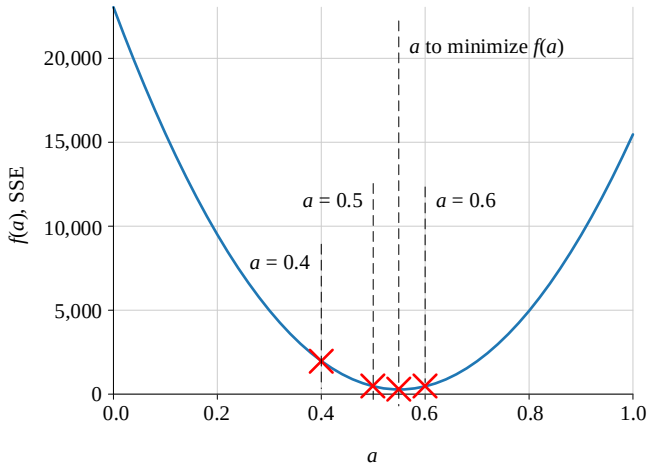


图 7. 函数 $f(a)$ 图像

解析法求解优化问题

利用导数这个数学工具，对 $f(a)$ 求一阶导数，得到 $f'(a)$：

$$f'(a)=130856a-72228 \tag{10}$$

$f'(a)=0$ 得到 $f(a)$ 取得最小值时 a 的值，记做 a^*：

$$a^*=\frac{18057}{32714}\approx 0.552 \tag{11}$$

这个 a^*就是农夫要找的最佳 a 值，它让误差平方和最小。

此时，对应的最优比例函数为：

$$\hat{y}=0.552x \tag{12}$$

带回检验

农夫决定用“土办法”再算算 a^*对应的估计值、误差、误差平方这几个数值，他得到表 5。

此时，误差平方和为 245.32，明显小于 $a=0.5$ 或 $a=0.6$ 这两种情况。

他不忘绘制图 6，看看正方形的面积到底怎样。

表 5. a 取 0.5504 时，估计值、误差、误差平方

养鸡数量 x	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88
养兔数量 y	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52
$\hat{y}=0.5504x$ 估算兔数	17.6	60.5	39.1	43.5	24.8	11.0	30.8	30.3	47.9	37.4	47.9	34.7	17.1	48.4
误差 e	4.4	-7.5	-0.1	-3.5	0.2	4.0	3.2	3.7	4.1	3.6	-4.9	-1.7	6.9	3.6
误差平方 e^2	19.2	56.9	0.0	12.1	0.1	15.9	10.1	13.9	16.9	12.8	23.9	2.8	48.1	12.7

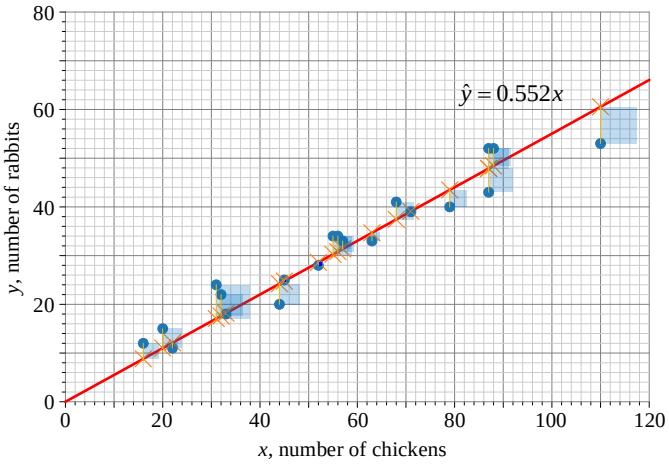
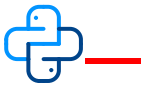


图 8. a = 0.552 时，可视化误差平方

农夫如获至宝，不住地说“最小二乘法，好！真好！”。

他回过头再次翻阅数学典籍，又仔仔细细把最小二乘方法反复研读几遍。兴奋之余，他想让自己的数学模型再复杂一点，决定试试一元一次函数。



Bk3_Ch24_1.py 绘制本节图像，并求解最优化问题。

```
# Bk3_Ch24_1

from sympy.abc import a
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def fig_decor(ax):

    plt.xlabel('$x$ (number of chickens)')
    plt.ylabel('$y$ (number of rabbits)')

    plt.axis('scaled')
    ax.set_xlim([0, 120])
    ax.set_ylim([0, 80])

    plt.xticks(np.arange(0, 120 + 1, step=10))
    plt.yticks(np.arange(0, 80 + 1,  step=10))

    plt.minorticks_on()
    ax.grid(which='minor', linestyle=':',
            linewidth='0.5', color=[0.8, 0.8, 0.8])

    ax.spines['top'].set_visible(False)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['bottom'].set_visible(False)
    ax.spines['left'].set_visible(False)

    ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])

# generate data

num_chickens = np.array([32, 110, 71, 79, 45, 20, 56, 55, 87, 68, 87, 63, 31, 88])
num_rabbits  = np.array([22, 53, 39, 40, 25, 15, 34, 34, 52 , 41, 43, 33, 24, 52])
# scatter plot

fig, ax = plt.subplots()

plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

fig_decor(ax)

#%% generate f(a), sum of squared errors (SSE), symbolic

from sympy import *

y_pred = a*num_chickens

f_a_SSE = np.sum((num_rabbits - y_pred)**2)

f_a_SSE = simplify(f_a_SSE)

print(f_a_SSE)
```

```
#%% plot f(a) versus a

a_array = np.linspace(0,1,51)

f_a_SSE_fcn = lambdify(a, f_a_SSE)

SSE_array = f_a_SSE_fcn(a_array)

# first-order differential
df_da_SSE = diff(f_a_SSE, a)
print(df_da_SSE)

# solution of a
a_star_only = solve(df_da_SSE, a)

print(a_star_only)

a_star_only = a_star_only[0].evalf()

SSE_min = f_a_SSE_fcn(a_star_only)

fig, ax = plt.subplots()

plt.plot(a_array, SSE_array)
plt.axvline(x=a_star_only, linestyle = '--')
plt.plot(a_star_only, SSE_min, 'rx', markersize = 16)

plt.xlabel('a, slope')
plt.ylabel('f(a), sum of squared errors, SSE')
ax.set_xlim([a_array.min(), a_array.max()])
ax.set_ylim([0, SSE_array.max()])

ax.grid(linestyle=':', linewidth='0.5', color=[0.8, 0.8, 0.8])

ax.spines['top'].set_visible(False)
ax.spines['right'].set_visible(False)

#%% y = ax model

def plot_square(x,y1,y2):

    if y2 > y1:
        temp = y2;
        y2 = y1;
        y1 = temp;

    d = y1 - y2;

    plt.fill(np.vstack((x, x + d, x + d, x)),
             np.vstack((y2, y2, y1, y1)),
             facecolor='b', edgecolor='none',
             alpha = 0.3)

x_array = np.linspace(0,150,10)[:, None]

y_pred = a_star_only*x_array

fig, ax = plt.subplots()

plt.plot(x_array, y_pred, color = 'r')
plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

num_rabbits_predicted = a_star_only*num_chickens

plt.plot(np.vstack((num_chickens,num_chickens)),
         np.vstack((num_rabbits, num_rabbits_predicted)),
         color = np.array([255,182,0])/255)

for i in range(0,len(num_rabbits_predicted)):
    plot_square(num_chickens[i],num_rabbits[i],num_rabbits_predicted[i]);
```

```
fig_decor(ax)
```

24.4 再试试一次函数：$y = ax + b$

农夫知道，比例函数通过原点，也就是纵轴截距为 0。而一元函数则没有这个限制。

他决定试一下如下这个一元函数，看看是否有更好的结果：

$$\hat{y} = ax + b \tag{13}$$

这个一元函数对应的误差平方和为：

$$\sum_{i=1}^{20}\left(e^{(i)}\right)^2 = \sum_{1}^{20}\left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right)^2 = \sum_{1}^{20}\left(y^{(i)} - ax^{(i)} - b\right)^2 \tag{14}$$

式中，$x^{(i)}$ 和 $y^{(i)}$ 都是给定的样本数据。也就是说，上式有两个自变量，有两个需要优化的参数 a、b。

农夫还是决定暴力求解一番，将 $x^{(i)}$ 和 $y^{(i)}$代入 (14)，整理并得到二元函数 $f(a, b)$ 解析式：

$$f(a,b) = 65428a^2 + 1784ab - 72228a + 14b^2 - 1014b + 20179 \tag{15}$$

这不就是是二元二次函数，我也懂啊！几何角度不就是个开口朝上的旋转椭圆面嘛！农夫再次惊叹数学的精妙！

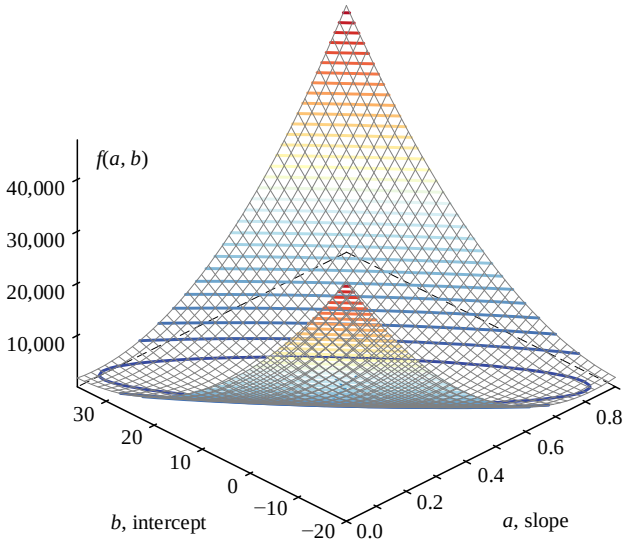


图 9. 误差平方和 $f(a, b)$ 随 a、b 变化构造的开口向上抛物曲面

用偏导求极值点

计算 $f(a, b)$ 最小值极值点处，利用 $f(a, b)$ 对 a、b 求偏导为 0 为条件，构造两个等式：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial a} = 130856a + 1784b - 72228 = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial b} = 1784a + 28b - 1014 = 0 \end{cases} \tag{16}$$

联立等式，求得最优解：

$$\begin{cases} a^* = \dfrac{513}{1157} \approx 0.4434 \\ b^* = \dfrac{18429}{2314} \approx 7.9641 \end{cases} \tag{17}$$

图 10 告诉我们这个最优解就在旋转椭圆中心位置。农夫看着图 10，嘴里叨叨着“椭圆真是个好东西！哪都离不开它！”

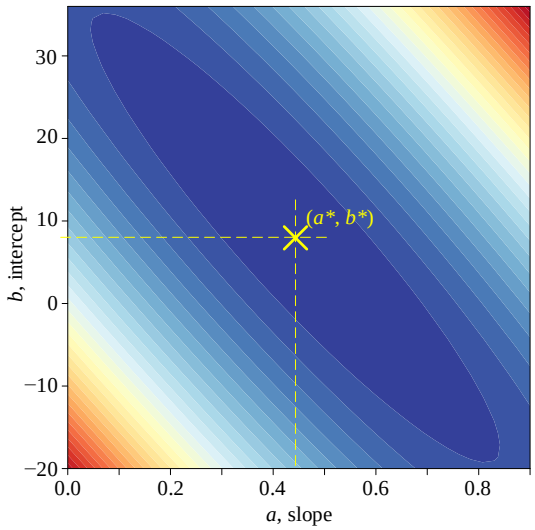


图 10. $f(a, b)$ 平面等高线和最优解位置

(17) 对应的一次函数：

$$\hat{y} = 0.4434x + 7.9641 \tag{18}$$

这就是农夫要找的最佳一次函数！

带回检验

农夫还是想用“土办法”再验算一遍！

他用 (18) 一步步仔细运算，并在将分步结果记录在表 6 中。农夫最终，并求得误差平方和为 128.67，这比之前的比例函数对应的误差平方和还要小。

他不怕麻烦，又画了图 11。图中，一次函数的截距为正。

表 6. $a = 0.4434$、$b = 7.9641$ 时，估计值、误差、误差平方

养鸡数量 x	32	110	71	79	45	20	56	55	87	68	87	63	31	88
养兔数量 y	22	53	39	40	25	15	34	34	52	41	43	33	24	52
$\hat{y} = 0.4863x + 4.312$	19.9	57.8	38.8	42.7	26.2	14.0	31.5	31.1	46.6	37.4	46.6	34.9	19.4	47.1
误差 e	2.1	-4.8	0.2	-2.7	-1.2	1.0	2.5	2.9	5.4	3.6	-3.6	-1.9	4.6	4.9
误差平方 e^2	4.5	23.1	0.0	7.5	1.4	0.9	6.0	8.7	28.9	13.1	13.1	3.8	21.3	23.9

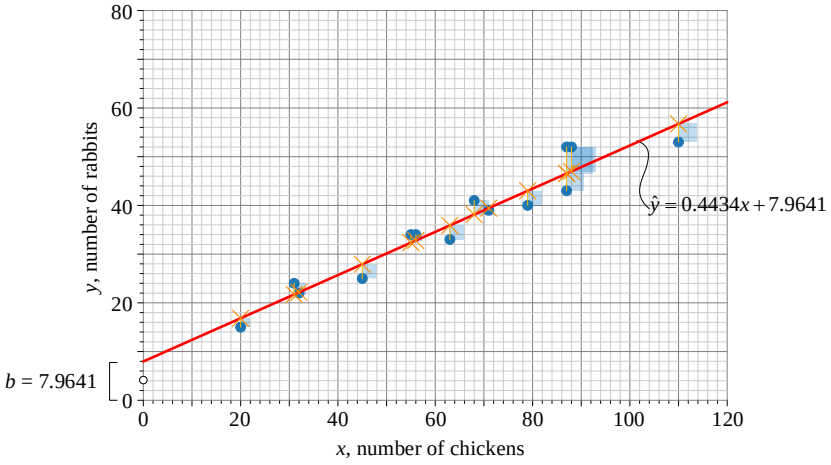


图 11. $a = 0.4434$、$b = 7.9641$ 时，可视化误差平方

Bk3_Ch24_2.py 绘制本节图像，并求解优化问题。

```
# Bk3_Ch24_2

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def fig_decor(ax):

    plt.xlabel('$x$ (number of chickens)')
    plt.ylabel('$y$ (number of rabbits)')

    plt.axis('scaled')
    ax.set_xlim([0, 120])
    ax.set_ylim([0, 80])

    plt.xticks(np.arange(0, 120 + 1, step=10))
    plt.yticks(np.arange(0, 80 + 1,  step=10))
```

```
    plt.minorticks_on()
    ax.grid(which='minor', linestyle=':',
            linewidth='0.5', color=[0.8, 0.8, 0.8])

    ax.spines['top'].set_visible(False)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['bottom'].set_visible(False)
    ax.spines['left'].set_visible(False)
    ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])

num_chickens = np.array([32, 110, 71, 79, 45, 20, 56, 55, 87, 68, 87, 63, 31, 88])
num_rabbits  = np.array([22, 53, 39, 40, 25, 15, 34, 34, 52, 41, 43, 33, 24, 52])

#%% generate f(a, b), sum of squared errors (SSE), symbolic
from sympy.abc import a, b
from sympy import *

y_pred = a*num_chickens + b

f_ab_SSE = np.sum((num_rabbits - y_pred)**2)

f_ab_SSE = simplify(f_ab_SSE)

print(f_ab_SSE)

#%% plot f(a) versus a

a_array = np.linspace(0,0.9,40)
b_array = np.linspace(-20,36,40)

aa,bb = np.meshgrid(a_array,b_array)

f_ab_SSE_fcn = lambdify((a,b), f_ab_SSE)

SSE_matrix = f_ab_SSE_fcn(aa,bb)
# SSE_matrix = SSE_matrix.evalf()

# first-order partial differential
df_da_SSE = diff(f_ab_SSE, a)
print(df_da_SSE)

df_db_SSE = diff(f_ab_SSE, b)
print(df_db_SSE)

# solution of (a,b)

sol = solve([df_da_SSE, df_db_SSE], [a, b])

print(sol)

a_star = sol[a]
b_star = sol[b]

a_star = a_star.evalf()
b_star = b_star.evalf()

print(a star)
print(b_star)

SSE_min = f_ab_SSE_fcn(a_star,b_star)
print(SSE_min)

fig, ax = plt.subplots(subplot kw={'projection': '3d'})

ax.plot_wireframe(aa,bb, SSE_matrix,
                  color = [0.5,0.5,0.5],
                  linewidth = 0.25)

plt.plot(a_star, b_star, SSE_min,
         marker = 'x', markersize = 12)
```

```
colorbar = ax.contour(aa,bb, SSE_matrix,30,
             cmap = 'RdYlBu_r')

fig.colorbar(colorbar, ax=ax)

ax.set_proj_type('ortho')

ax.set_xlabel('$a$, slope')
ax.set_ylabel('$b$, intercept')
ax.set_zlabel('$Sum of squared errors')
plt.tight_layout()
ax.set_xlim(aa.min(), aa.max())
ax.set_ylim(bb.min(), bb.max())

ax.view_init(azim=-135, elev=30)

ax.grid(False)
plt.show()

fig, ax = plt.subplots()

colorbar = ax.contourf(aa,bb, SSE_matrix, 30, cmap='RdYlBu_r')
fig.colorbar(colorbar, ax=ax)
plt.plot(a_star, b_star, marker = 'x', markersize = 12)

ax.set_xlim(aa.min(), aa.max())
ax.set_ylim(bb.min(), bb.max())

ax.set_xlabel('$a$, slope')
ax.set_ylabel('$b$, intercept')
# plt.gca().set_aspect('equal', adjustable='box')

plt.show()

#%% y = ax + b model

def plot_square(x,y1,y2):

    if y2 > y1:
        temp = y2;
        y2 = y1;
        y1 = temp;

    d = y1 - y2;

    plt.fill(np.vstack((x, x + d, x + d, x)),
             np.vstack((y2, y2, y1, y1)),
             facecolor='b', edgecolor='none',
             alpha = 0.3)

x_array = np.linspace(0,150,10)[:, None]

y_pred = a_star*x_array + b_star

fig, ax = plt.subplots()

plt.plot(x_array, y_pred, color = 'r')
plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

num_rabbits_predicted = a_star*num_chickens + b_star

plt.plot(np.vstack((num_chickens,num_chickens)),
         np.vstack((num_rabbits, num_rabbits_predicted)),
         color = np.array([255,182,0])/255)

plt.plot(num_chickens, num_rabbits_predicted,
         linestyle = 'None', marker = 'x',
         markerfacecolor = 'darkorange',
         markeredgecolor = 'darkorange',
         markersize = 10)
```

```
for i in range(0,len(num_rabbits_predicted)):
    plot_square(num_chickens[i],num_rabbits[i],num_rabbits_predicted[i]);

fig_decor(ax)
```

24.5 再探黄鼠狼惊魂夜：超定方程组

突然间，一道灵光闪过！

农夫回想，那夜黄鼠狼来偷鸡抓兔，邻居甲、乙、丙、丁四人数头数、脚数时，为了估算鸡兔数量，他采用的舶来线性代数典籍中的超定方程组的求解方法。

回过头来看自己手中的线性回归问题，“这不也是一个超定方程组吗？！”

比例函数

他立刻摊开纸，把表 1 数据写成列向量形式：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}22\\53\\\vdots\\28\end{bmatrix} \tag{19}$$

农夫将比例函数模型写成：

$$\boldsymbol{y}=a\boldsymbol{x} \tag{20}$$

即

$$\underbrace{\begin{bmatrix}22\\53\\\vdots\\28\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y}}=a\underbrace{\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}} \tag{21}$$

只有一个未知数 a，但是方程组有 20 个方程，这显然也是一个超定方程组！

农夫顿时兴奋起来，他用黄鼠狼惊魂夜一模一样的方法求解：

$$a=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{22}$$

实际上，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 是一个 1×1 矩阵，也就是一个数字；它的逆就是 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 这个数字的倒数。

将 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 具体数值代入 (22)，得到：

$$a=\left(\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}@\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix}\right)^{-1}@\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}@\begin{bmatrix}22\\53\\\vdots\\28\end{bmatrix}=0.552 \tag{23}$$

农夫惊呼，“得来全不费工夫啊！”这个结果和他用最小二乘法得到结果完全一致。

一元函数

灵光再现，他立刻疾步多取回些纸笔，将一元函数这个模型也写成矩阵形式：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}22\\53\\\vdots\\28\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y}}=a\underbrace{\begin{bmatrix}32\\110\\\vdots\\52\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}}+b\underbrace{\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{1}} \tag{24}$$

即，

$$\hat{\boldsymbol{y}}=a\boldsymbol{x}+b\boldsymbol{1} \tag{25}$$

$\boldsymbol{1}$ 叫做全 1 列向量。

只有二个未知数 a、b，但是方程组有 20 个方程，这明显也是一个超定方程组。

将 (25) 写成：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{1} & \boldsymbol{x}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\begin{bmatrix}b\\a\end{bmatrix} \tag{26}$$

令，

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{1} & \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 32\\1 & 110\\\vdots & \vdots\\1 & 52\end{bmatrix} \tag{27}$$

(26) 则写成：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{X}\begin{bmatrix}b\\a\end{bmatrix} \tag{28}$$

求解超定方程组，得到：

$$\begin{bmatrix}b\\a\end{bmatrix}=\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{29}$$

将 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 具体数值代入 (29)，得到：

$$\begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 1 & 32 \\ 1 & 110 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 52 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} @ \begin{bmatrix} 1 & 32 \\ 1 & 110 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 52 \end{bmatrix} \right)^{-1} @ \left(\begin{bmatrix} 1 & 32 \\ 1 & 110 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 52 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} @ \begin{bmatrix} 22 \\ 53 \\ \vdots \\ 28 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 14 & 892 \\ 892 & 65428 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 507 \\ 36114 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.9641 \\ 0.4434 \end{bmatrix} \tag{30}$$

几何视角

农夫知道，凡是有向量的地方，就有几何！

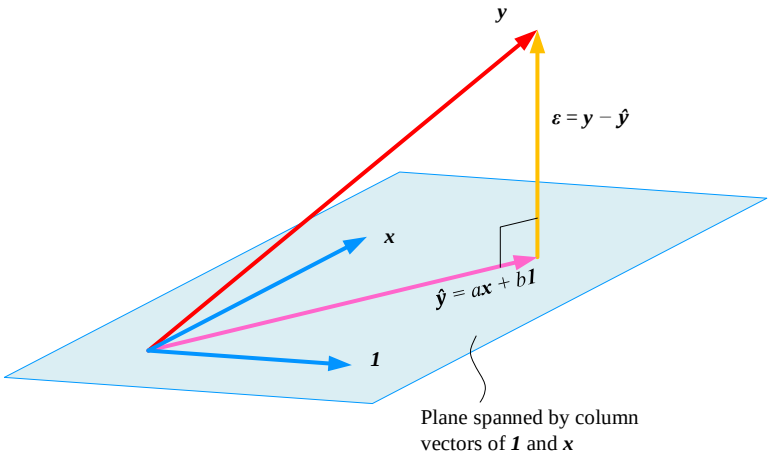


图 12. 几何角度解释一元最小二乘结果，二维平面

上述解法肯定可以通过几何角度解释。如图 12 所示，将 $\boldsymbol{y}$ 向量向 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{1}$ 张成的平面 H 投影，得到结果为向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$；而误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y} - (a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{1}) \tag{31}$$

误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 显然垂直于 H，即 ε 分别垂直 $\boldsymbol{1}$ 和 $\boldsymbol{x}$。

也就是说：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{1} \quad &\Rightarrow \quad \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - (a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{1})\right) = 0 \\ \boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{x} \quad &\Rightarrow \quad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - (a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{1})\right) = 0 \end{aligned} \tag{32}$$

以上两式合并：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{1} & \boldsymbol{x} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X} \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} \right) = \boldsymbol{0} \tag{33}$$

整理得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{34}$$

等式左右分别左边乘以 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的逆，不就得到 (29) 嘛！

“嗟夫！我的神仙姑奶奶！”，这个结果让农夫惊呆了半晌。

带回检验

醒过神来，他把比例函数和一次函数对应的图像都画在一幅图上，如图 13。

“朝闻道夕死可矣！”线性代数的魅力让农夫彻底折服。

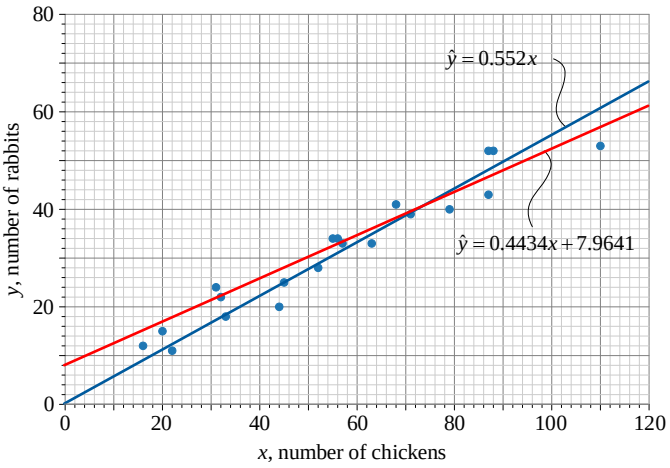


图 13. 比较比例模型和线性模型

Bk3_Ch24_3.py 求解本节优化问题，并绘制图 13。

```
# Bk3_Ch24_3

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def fig_decor(ax):

    plt.xlabel('$x$ (number of chickens)')
    plt.ylabel('$y$ (number of rabbits)')

    plt.axis('scaled')
    ax.set_xlim([0, 120])
    ax.set_ylim([0, 80])

    plt.xticks(np.arange(0, 120 + 1, step=10))
    plt.yticks(np.arange(0, 80 + 1,  step=10))
```

```
    plt.minorticks_on()
    ax.grid(which='minor', linestyle=':',
            linewidth='0.5', color=[0.8, 0.8, 0.8])

    ax.spines['top'].set_visible(False)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['bottom'].set_visible(False)
    ax.spines['left'].set_visible(False)

    ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])

num_chickens = np.array([32, 110, 71, 79, 45, 20, 56, 55, 87, 68, 87, 63, 31, 88])
num_rabbits  = np.array([22, 53, 39, 40, 25, 15, 34, 34, 52, 41, 43, 33, 24, 52])

# scatter plot

fig, ax = plt.subplots()

plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

fig_decor(ax)

#%% proportional function, y = ax

x_array = np.linspace(0,150,10)[:, None]

x = num_chickens[:, None]
y = num_rabbits[:, None]

a_star_only = np.linalg.inv(x.T@x)@x.T@y

y_pred = a_star_only*x_array

fig, ax = plt.subplots()

plt.plot(x_array, y_pred, color = 'r')
plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

fig_decor(ax)

#%% linear function, y = ax + b

X = np.hstack((np.ones_like(x),x))

sol = np.linalg.inv(X.T@X)@X.T@y

a_star_ = sol[0]
b_star_ = sol[1]


a_star, b_star = np.polyfit(num_chickens, num_rabbits, 1)
y_pred = a_star*x_array + b_star

fig, ax = plt.subplots()

plt.plot(x array, y pred, color = 'r')
plt.scatter(num_chickens, num_rabbits)

fig_decor(ax)
```

25.6 统计方法求解回归参数

突然间，农夫想起前几日在一本叫做《概率统计》的数学典籍中一个有趣的公式，它赶忙取来典籍，找到如下这个公式：

$$y=\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}(x-\mu_X)+\mu_Y=\underbrace{\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}}_{a}x+\underbrace{\left(-\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}\mu_X+\mu_Y\right)}_{b}y \tag{35}$$

其中，μ_X 为 X 均值，μ_Y 为 Y 均值；σ_X 为 X 的标准差，σ_Y 为 Y 的标准差；$\rho_{X,Y}$ 为 X 和 Y 的相关性系数。

农夫意识到，从统计角度，也可以用 (35) 计算一元一次线性回归模型。

他赶紧利用表 1 数据计算得到均值、标准差和相关性系数等值：

$$\begin{cases}\mu_X=63.714\\ \mu_Y=36.214\end{cases},\quad \begin{cases}\sigma_X=25.712\\ \sigma_Y=11.826\end{cases},\quad \rho_{X,Y}=0.96397 \tag{36}$$

这样可以计算得到参数 a 和 b：

$$\begin{aligned}a&=\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}=0.96397\times\frac{11.826}{25.712}=0.4434\\ b&=-\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}\mu_X+\mu_Y=-0.96397\times\frac{11.826}{25.712}\times63.714+36.214=7.9641\end{aligned} \tag{37}$$

这和前面的几种方法结果完全吻合！农夫顿悟，原来最小二乘法线性回归是几何、向量、优化、概率统计的完美合体！

他不忘绘制图 14 这幅图，农夫发现图中回归直线通过 (μ_X, μ_Y) 这点。

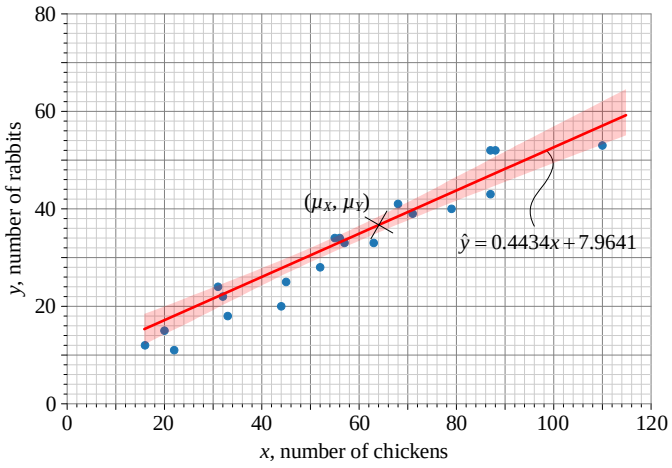
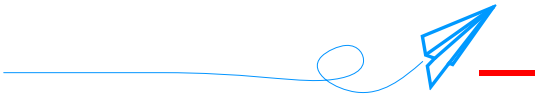


图 14. 利用统计方法获得线性模型

Bk3_Ch24_4.py 代码绘制图 14。

```
# Bk3_Ch24_4

import numpy as np
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt

def fig_decor(ax):

    plt.xlabel('$x$ (number of chickens)')
    plt.ylabel('$y$ (number of rabbits)')

    plt.axis('scaled')
    ax.set_xlim([0, 120])
    ax.set_ylim([0, 80])

    plt.xticks(np.arange(0, 120 + 1, step=10))
    plt.yticks(np.arange(0, 80 + 1,  step=10))
    plt.minorticks_on()
    ax.grid(which='minor', linestyle=':',
            linewidth='0.5', color=[0.8, 0.8, 0.8])

    ax.spines['top'].set_visible(False)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['bottom'].set_visible(False)
    ax.spines['left'].set_visible(False)
    ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])

num_chickens = np.array([32, 110, 71, 79, 45, 20, 56, 55, 87, 68, 87, 63, 31, 88])
num_rabbits  = np.array([22, 53, 39, 40, 25, 15, 34, 34, 52, 41, 43, 33, 24, 52])

sigma_X = num_chickens.std(ddof = 1)
sigma_Y = num_rabbits.std(ddof = 1)
rho_XY = np.corrcoef(num_chickens, num_rabbits)[1][0]
mean_X = num_chickens.mean()
mean_Y = num_rabbits.mean()

a = rho_XY*sigma_Y/sigma_X
b = -a*mean_X + mean_Y

print('=== Slope, a ===')
print(a)
print('=== Intercept, b ===')
print(b)

x_array = np.linspace(0,120,20)
fig, ax = plt.subplots()
sns.regplot(x=num_chickens, y=num_rabbits, ax = ax,  truncate=False,
            line_kws={"color": "red"});

plt.plot(mean_X,mean_Y, marker = 'x', markerfacecolor = 'r',
         markersize = 12)
fig_decor(ax)

#%% use sklearn

from sklearn.linear_model import LinearRegression

x = num_chickens.reshape((-1, 1))
y = num_rabbits

model = LinearRegression().fit(x, y)
print('Slope, a:', model.coef_)
print('Intercept, b:', model.intercept_)
```



农夫落笔刹那，毫无防备之间，黑云压城城欲摧。

农夫赶忙起身关紧门窗，只见窗外云浪翻腾，道道长龙电光从西方汹汹而来！闪电撕开天幕，列缺霹雳，丘峦崩摧。

瞬时，天河倾注，拳头大的雨滴敲击着大地，冲刷每一条沟壑，涤荡每一片浮尘。

农夫却毫无惧色，他喜出望外，仰天长啸道，“天上之水啊！上善若水啊！好水，好水！”

未完待续。