最小二乘法(Least Squares)在计算机中是一种用来求参数/最优化的方法（线性/非线性），wikipedia有较为详细的解释：http://en.wikipedia.org/wiki/Least_squares。

1）问题陈述：

The objective consists of adjusting the parameters of a model function to best fit a data set. A simple data set consists of *n* points (data pairs) (x_i, y_i), *i* = 1, ..., *n*, where x_i is an independent variable and y_i is a dependent variable whose value is found by observation. The model function has the form $f(x, \beta)$, where the *m* adjustable parameters are held in the vector $\boldsymbol{\beta}$. The goal is to find the parameter values for the model which "best" fits the data. The least squares method finds its optimum when the sum, *S*, of squared residuals

$$S = \sum_{i=1}^{n} {r_i}^2$$

is a minimum.

A residual is defined as the difference between the actual value of the dependent variable and the value predicted by the model.

$$r_i = y_i - f(x_i, \boldsymbol{\beta}).$$

2）背景：

Least Squares最早是用在天体运动学中，也就是用在了著名的发现谷神星的故事里——1801年，意大利天文学家朱赛普·皮亚齐发现了第一 颗小行星谷神星。经过40天的跟踪观测后，由于谷神星运行至太阳背后，使得皮亚齐失去了谷神星的位置。随后全世界的科学家利用皮亚齐的观测数据开始寻找谷神星，但是根据大多数人计算的结果来寻找谷神星都没有结果。时年24岁的高斯也计算了谷神星的轨道。奥地利天文学家海因里希·奥尔伯斯根据高斯计算出来的轨道重新发现了谷神星。

3）如何测量谷神星位置？

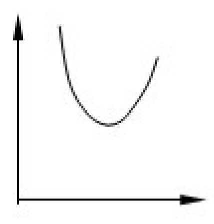
为了理解最小二乘法的作用，我们不妨来模拟下高斯求解谷神星位置的大致过程，可以假设谷神星的运动轨迹符合以下**线性**方程：

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

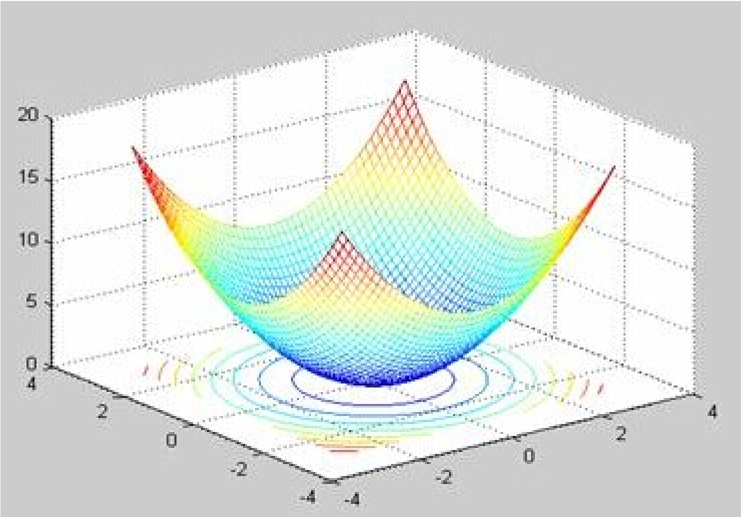
当然行星运行轨迹的方程不会是这样，但是不妨假设为这样。

现在我们有三个参数β_0、β_1、β_2，另外根据百科等描述，高斯当时拿到了三组观测值，也就是(y_1, x_1)、(y_2, x_2)、(y_3, x_3)，那么现在问题就变成了：利用观测到的三组样本去求解方程里三个参数的最优值，该如何求解？

高斯想到的是用最小二乘法，最小二乘法的基本公式其实就是残差的平方和，为什么使用这个公式可以看下图：



可以看出残差平方的图形是一个凹形曲线，极值点就是为0的时候，再看下更多维度的情况：



现在我们有三组观测值来求解三个参数，且S = 0：

$$S = \sum_{i=1}^{n} {r_i}^2$$

$$r_i = y_i - f(x_i, \boldsymbol{\beta})$$

要求得三个参数β_0、β_1、β_2，很容易想到要找出三个方程组，这样才能求出对应个数的参数，如果我们计算各参数的偏导数，同时设偏导数为0，就能够得到这样的三个方程了。（因为在凹点处，斜率为0，也就是参数最优（在图形底部）的时候$\frac{\partial S}{\partial \beta_i}$）

三组观测值带入到S中，再对S分别求三个参数的偏导后，则可以得到三个方程组，回顾一下代数：三个线性方程组求三个参数的方法叫做**求解线性方程组**，这种线性方程组往往都存在**closed-form solution**即**闭合解、封闭解、解析解**的，也就是有固定的解的形式，可以直接套用。

线性方程组求解的方法：
http://jpkc.wuse.edu.cn/xxds/xxdsjpkc/Html/tongji/text/ch03/se03/right3_3_1.htm

也可以转换为矩阵的方式来求解：http://www2.edu-edu.com.cn/lesson_crs78/self/j_4184/soft/ch0201.html

求出三个参数后，我们就可以根据时间等未知数来推测神谷星的位置y了。

学数学的时候往往不知道这些数学理论到底有什么用，通过这个例子可以看出数学的确是无处不在！

相关维基：

http://zh.wikipedia.org/zh/%E6%9C%80%E5%B0%8F%E4%BA%8C%E4%B9%98%E6%B3%95

http://en.wikipedia.org/wiki/Linear_least_squares_(mathematics)

4）非线性最小二乘法

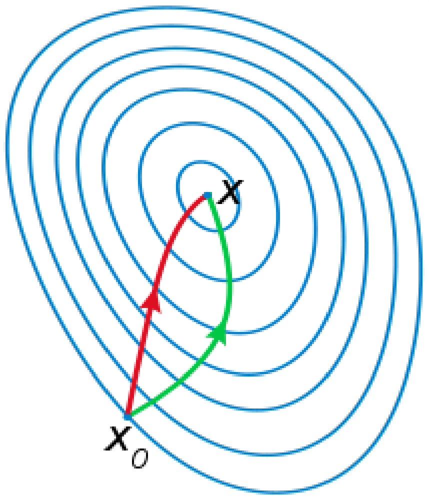
在以上推测谷神星位置的方法中，我们假设了一个线性函数，并通过对各参数偏导的求解，得到对应个数的方程组，将问题转换为**线性方程组的求解问题**，但是这只适用于线性函数，而实际使用中，例如许多机器学习算法中，我们使用和构造的函数并非线性函数，例如sigmoid函数：

$$S(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}}.$$

因为是非线性的，导数通常是含有独立变量的函数形式，是没有**解析解**的，那遇到这种情况又该如何求解呢？

既然有线性方程组求解的方法，那自然就有非线性方程组求解方法，大牛们早就弄得透透的了。

这里记录两种方法，一种叫做**梯度下降法**，另一种叫做**牛顿法**，先给个直观的图来解释，这两种方法收敛的效果，如下图所示：



红色形似直线的路径是使用梯度下降法收敛的效果，而绿色曲线是使用牛顿法收敛的效果图，简单的描述梯度下降法就是一阶偏导，使用平面去切割每一步，而牛顿法是二阶偏导，使用曲面去切割，是导数的导数，不但考虑哪一步下去最快，还考虑下去之后的加速度是否也快，能不能抄近道。

梯度下降法参考资料：

http://v.163.com/movie/2008/1/B/O/M6SGF6VB4_M6SGHJ9BO.html

http://blog.csdn.net/acdreamers/article/details/27660519

牛顿法参考资料：

http://v.163.com/movie/2008/1/E/D/M6SGF6VB4_M6SGHKAED.html

http://blog.csdn.net/luoleicn/article/details/6527049

非线性最小二乘法维基地址：

http://en.wikipedia.org/wiki/Non-linear_least_squares

5）实际使用

最小二乘法在机器学习等领域有广泛的应用，如果构造的是线性模型，就可以用线性解法，如果是非线性模型，则可以使用非线性的优化方法。

这就很好的给了实际使用以理论支撑，工程师只需要使用恰当的假设和模型，就可以利用各种完备的数学理论去求解模型，比自己动手写各种ugly的规则要省事多了。

Andrew的机器学习课程中有关于房价预测的例子，其中就用到了最小二乘法，ESL一书中开篇第二章就介绍了该方法，可见此方法在机器学习领域是基础中的基础，属于必须要了解的部分。