最小二乘法的推导　方便记忆

1.设拟合直线为 $y = a + bx$

2.有任意观察点（x_i, y_i）

3.观察点与拟合直线上的点，横坐标是相等的，纵坐标差一个距离，设这个距离为 d_i,则有$d_i = y_i - (a + bx_i)$

4.设 $D_i = \sum_{i=1}^{n} d_i^2$，则有当 D_i 取最小值的时候，拟合直线与观察点的拟合程度最高

5.下面开始求当什么时候时，D_i 取最小值

6. $D_i = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2$

7.对 D_i 求一阶偏导，分别求对 a 的和对 b 的一阶偏导

$$\frac{\partial D_i}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - a - bx_i)(-1) = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i) = -2(\sum_{i=1}^{n} y_i - na - b\sum_{i=1}^{n} x_i)$$

$$\frac{\partial D_i}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - a - bx_i)(-x_i) = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)x_i$$

$$= -2\sum_{i=1}^{n}(x_i y_i - ax_i - bx_i^2) = -2(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i - b\sum_{i=1}^{n} x_i^2)$$

8. D_i 分别对 a 和 b 的二阶偏导数大于或等于零，证明略，意义不大

9.令 D_i 分别对 a 和 b 的一阶偏导数等于零，解 a 和 b

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} y_i - na - b\sum_{i=1}^{n} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i - b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0 \end{cases}$$

令 $n\overline{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i, n\overline{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i$

代入上式，则有

吕君 2013 年夏

$$\begin{cases} n\overline{y} - na - bn\overline{x} = 0 \\ n\overline{xy} - an\overline{x} - bn\overline{x^2} = 0 \end{cases}$$

转为矩阵形式，消掉 n，则有$\begin{bmatrix} 1 & \overline{x} & \overline{y} \\ \overline{x} & \overline{x^2} & \overline{xy} \end{bmatrix}$

10.由高斯消元法，有

$$\begin{bmatrix} 1 & \overline{x} & \overline{y} \\ 0 & \overline{x^2} - (\overline{x})^2 & \overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y} \end{bmatrix}$$

11.解得

$$\begin{cases} a = \overline{y} - b\overline{x} \\ b = \dfrac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{\overline{x^2} - (\overline{x})^2} \end{cases}$$

后记，这种形式的公式显然比书上的形式好记一些，比较对称，如果愿意转换成书上的形式，可以上下都乘以一个 n

吕君 2013 年夏