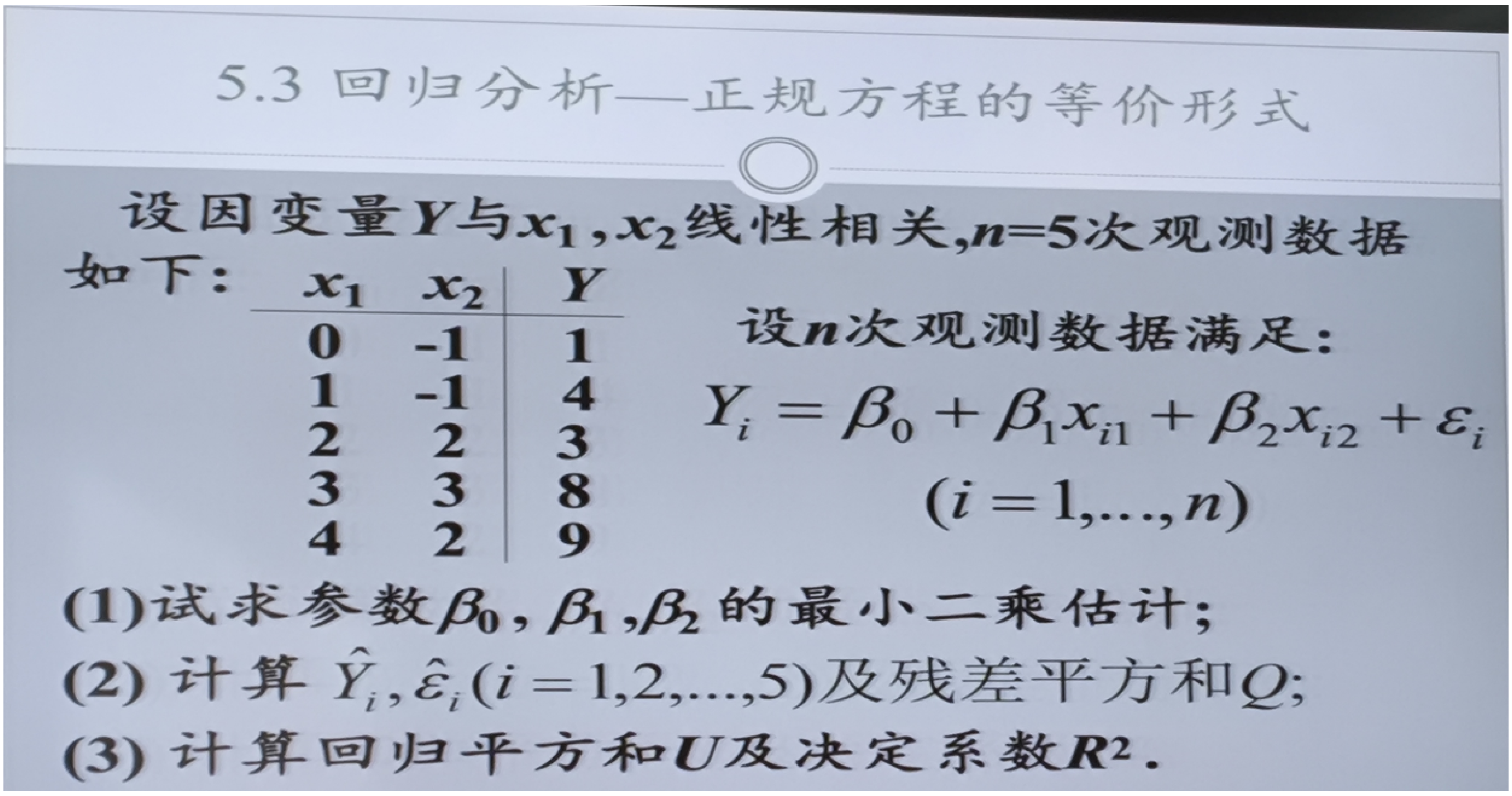
## 题型：求多元线性回归




**关键词：正规方程，残差平方和，总离差平方和，回归平方和，决定系数**

我们需要根据给定的数据，建立回归模型 $Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$。

以下是详细的解题步骤：

## 第一步：整理数据与构建矩阵

首先列出数据矩阵 $X$（注意第一列全为1，对应截距项 $\beta_0$）和观测向量 $Y$。

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 3 \\ 1 & 4 & 2 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 3 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix}$$

计算必要的求和统计量：

- $n = 5$
- $\sum x_1 = 0+1+2+3+4 = 10$
- $\sum x_2 = -1-1+2+3+2 = 5$
- $\sum Y = 1+4+3+8+9 = 25$，则 $\bar{Y} = 5$

---

## (1) 试求参数 $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ 的最小二乘估计

利用正规方程（Normal Equations）公式：$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$

**1. 计算 $X^T X$ 矩阵：**

$$X^T X = \begin{bmatrix} n & \sum x_1 & \sum x_2 \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1 x_2 \\ \sum x_2 & \sum x_1 x_2 & \sum x_2^2 \end{bmatrix}$$

- $\sum x_1^2 = 0+1+4+9+16 = 30$
- $\sum x_2^2 = 1+1+4+9+4 = 19$
- $\sum x_1 x_2 = 0(-1)+1(-1)+2(2)+3(3)+4(2) = 0-1+4+9+8 = 20$

$$X^T X = \begin{bmatrix} 5 & 10 & 5 \\ 10 & 30 & 20 \\ 5 & 20 & 19 \end{bmatrix}$$

**2. 计算 $X^TY$ 向量：**

$$X^TY = \begin{bmatrix} \sum Y \\ \sum x_1 Y \\ \sum x_2 Y \end{bmatrix}$$

- $\sum Y = 25$
- $\sum x_1 Y = 0(1) + 1(4) + 2(3) + 3(8) + 4(9) = 0 + 4 + 6 + 24 + 36 = 70$
- $\sum x_2 Y = -1(1) - 1(4) + 2(3) + 3(8) + 2(9) = -1 - 4 + 6 + 24 + 18 = 43$

$$X^TY = \begin{bmatrix} 25 \\ 70 \\ 43 \end{bmatrix}$$

**3. 解线性方程组：**

$$\begin{cases} 5\hat{\beta}_0 + 10\hat{\beta}_1 + 5\hat{\beta}_2 = 25 \quad \cdots(1) \\ 10\hat{\beta}_0 + 30\hat{\beta}_1 + 20\hat{\beta}_2 = 70 \quad \cdots(2) \\ 5\hat{\beta}_0 + 20\hat{\beta}_1 + 19\hat{\beta}_2 = 43 \quad \cdots(3) \end{cases}$$

- 由 (1) 式化简除以 5：$\hat{\beta}_0 + 2\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 = 5 \Rightarrow \hat{\beta}_0 = 5 - 2\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2 \quad \cdots(4)$
- 将 (2) 式减去 2倍的 (1) 式：
  $(10\hat{\beta}_0 + 30\hat{\beta}_1 + 20\hat{\beta}_2) - 2(5\hat{\beta}_0 + 10\hat{\beta}_1 + 5\hat{\beta}_2) = 70 - 50$
  $10\hat{\beta}_1 + 10\hat{\beta}_2 = 20 \Rightarrow \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 = 2 \Rightarrow \hat{\beta}_1 = 2 - \hat{\beta}_2 \quad \cdots(5)$
- 将 (3) 式减去 (1) 式：
  $10\hat{\beta}_1 + 14\hat{\beta}_2 = 18 \Rightarrow 5\hat{\beta}_1 + 7\hat{\beta}_2 = 9 \quad \cdots(6)$

将 (5) 代入 (6)：
$5(2 - \hat{\beta}_2) + 7\hat{\beta}_2 = 9$
$10 - 5\hat{\beta}_2 + 7\hat{\beta}_2 = 9$
$2\hat{\beta}_2 = -1 \Rightarrow \boldsymbol{\hat{\beta}_2 = -0.5}$

求 $\hat{\beta}_1$：
$\hat{\beta}_1 = 2 - (-0.5) \Rightarrow \boldsymbol{\hat{\beta}_1 = 2.5}$

求 $\hat{\beta}_0$：
$\hat{\beta}_0 = 5 - 2(2.5) - (-0.5) = 5 - 5 + 0.5 \Rightarrow \boldsymbol{\hat{\beta}_0 = 0.5}$

**结论 (1)：**
参数的最小二乘估计为：
$\hat{\beta}_0 = 0.5, \quad \hat{\beta}_1 = 2.5, \quad \hat{\beta}_2 = -0.5$
回归方程为：$\hat{Y} = 0.5 + 2.5x_1 - 0.5x_2$

---

## (2) 计算 $\hat{Y}_i, \hat{\varepsilon}_i$ 及残差平方和 $Q$

利用回归方程 $\hat{Y}_i = 0.5 + 2.5x_{i1} - 0.5x_{i2}$ 进行计算。
残差 $\hat{\varepsilon}_i = Y_i - \hat{Y}_i$。

| $i$ | $x_1$ | $x_2$ | $Y$ | $\hat{Y}$ **(计算过程)** | $\hat{Y}$ **(拟合值)** | $\hat{\varepsilon}$ **(残差)** | $\hat{\varepsilon}^2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0 | -1 | 1 | $0.5 + 2.5(0) - 0.5(-1) = 0.5 + 0 + 0.5$ | **1** | **0** | 0 |
| 2 | 1 | -1 | 4 | $0.5 + 2.5(1) - 0.5(-1) = 0.5 + 2.5 + 0.5$ | **3.5** | **0.5** | 0.25 |
| 3 | 2 | 2 | 3 | $0.5 + 2.5(2) - 0.5(2) = 0.5 + 5 - 1$ | **4.5** | **-1.5** | 2.25 |
| 4 | 3 | 3 | 8 | $0.5 + 2.5(3) - 0.5(3) = 0.5 + 7.5 - 1.5$ | **6.5** | **1.5** | 2.25 |
| 5 | 4 | 2 | 9 | $0.5 + 2.5(4) - 0.5(2) = 0.5 + 10 - 1$ | **9.5** | **-0.5** | 0.25 |

**残差平方和 $Q$：**
$Q = \sum \hat{\varepsilon}_i^2 = 0 + 0.25 + 2.25 + 2.25 + 0.25 = 5$

**结论 (2)：**

- 拟合值 $\hat{Y}$ 为：**1, 3.5, 4.5, 6.5, 9.5**
- 残差 $\hat{\varepsilon}$ 为：**0, 0.5, -1.5, 1.5, -0.5**
- 残差平方和 $Q = 5$

---

## *(3) 计算回归平方和 $U$ 及决定系数 $R^2$*

**第一步：计算“样本和均值的差值平方和”（即总离差平方和 $SST$）**
已知样本均值 $\bar{Y}=5$，原始数据 $Y=[1,4,3,8,9]$。

$$\begin{aligned} SST &= (1-5)^2+(4-5)^2+(3-5)^2+(8-5)^2+(9-5)^2 \\ &= (-4)^2+(-1)^2+(-2)^2+3^2+4^2 \\ &= 16+1+4+9+16 \\ &= \mathbf{46} \end{aligned}$$

**第二步：获取“样本和预测的差值平方和”（即残差平方和 $Q$）**
根据第(2)问的计算结果，预测值与真实值的误差平方总和为：
$Q=\mathbf{5}$

**第三步：计算决定系数 $R^2$**
利用公式：$R^2=1-\frac{\text{样本和预测的差值平方和}}{\text{样本和均值的差值平方和}}$

$$\begin{aligned} R^2 &= 1-\frac{Q}{SST} \\ &= 1-\frac{5}{46} \\ &= 1-0.1087 \\ &\approx \mathbf{0.8913} \end{aligned}$$

**第四步：计算回归平方和 $U$**
回归平方和 $U$ 代表被模型解释的部分（即 $SST$ 中扣除 $Q$ 的部分，也是分子）：

$$U=SST-Q=46-5=\mathbf{41}$$

**(3) 问最终结果：**

- 回归平方和 $U=\mathbf{41}$
- 决定系数 $R^2\approx\mathbf{0.8913}$

## *决定系数：衡量拟合的好坏*

为什么“波动大”的时候，哪怕预测有误差，我们也认为“还行”？

假设我们要预测两个东西：

- **场景A（波动极大）：** 预测某支股票的价格，它在 10元 到 1000元 之间剧烈波动（$SST$ 也就是分母非常大）。
  - 如果你的模型预测它也是几百块，哪怕误差有个几十块（$Q$ 分子较大），相对于那个几百块的巨大波动范围，这点误差微不足道。
  - **结果：** $\frac{Q}{SST}$ 很小，$R^2$ 很高（接近1）。
  - **含义：** 虽然不准，但你的模型成功捕捉到了“大趋势”。
- **场景B（波动极小）：** 预测一包标准食盐的重量，它就在 499克 到 501克 之间波动（$SST$ 也就是分母非常小）。
  - 如果你的模型预测误差有 10克（$Q$ 分子和场景A一样大），这简直是灾难性的错误，因为连平均值的波动都没这么大。
  - **结果：** $\frac{Q}{SST}$ 会变得巨大（甚至超过1），$R^2$ 会变得很差（甚至变成负数）。
  - **含义：** 在这种精细的场景下，同样的绝对误差是不可接受的。