线性回归

Herbert002

2021年12月1日

摘要

尽量通俗易懂,基于理工科本科数学水平的线性回归笔记.

目录

1	线性回归的通俗理解	1
2	线性回归的简要历史	1
3	一元线性回归	1
4	多元线性回归	1
5	附录	6

1 线性回归的通俗理解

线性回归的通俗理解.

2 线性回归的简要历史

高尔顿爵士关于身高体重的实验.

3 一元线性回归

我们先考虑一元线性回归.

4 多元线性回归

多元线性回归是指回归变量个数大于等于 2 的线性回归. 回归平方和服从卡方分布的证明

$$SSR = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - \overline{y})^{2}$$

$$= [\hat{y} - 1\overline{y}]^{T} [\hat{y} - 1\overline{y}]$$

$$= [X(X^{T}X)^{-1}X^{T}y - 1(1^{T}1)^{-1}1^{T}y]^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T}y - 1(1^{T}1)^{-1}1^{T}y]$$

$$= y^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - 1(1^{T}1)^{-1}1^{T}]^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - 1(1^{T}1)^{-1}1^{T}]y$$
(1)

上式中, $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$,是一个元素均为 1 的列向量. 响应变量均值可以表示为 $\overline{y} = (\mathbf{1}^T \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T \mathbf{y}$. 接下来证明 $\mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T - \mathbf{1} (\mathbf{1}^T \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T$ 是对称矩阵.

$$[X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]^{T} = [X(X^{T}X)^{-1}X^{T}]^{T} - [\mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]^{T}$$

$$= X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}$$
(2)

得证.

证明 $X(X^TX)^{-1}X^T - \mathbf{1}(\mathbf{1}^T\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^T$ 是幂等的.

如果说矩阵 A 是幂等的,则有 $A = AA = \cdots = A^n$

证明 $X(X^TX)^{-1}X^T - 1(1^T1)^{-1}1^T$ 的幂等性,需要先证明如下结论.

$$X(X^TX)^{-1}X^T\mathbf{1} = \mathbf{1}$$

$$\mathbf{1}^TX(X^TX)^{-1}X^T = \mathbf{1}^T$$
(3)

 $X \in \mathbb{R}^{n \times (k+1)}$ 可以分解为 $X = [\mathbf{1} \ X_R]$, 其中 $X_R \in \mathbb{R}^{n \times k}$, 则有

$$\boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1}^{T} \\ \boldsymbol{X}_{R}^{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{1} \ \boldsymbol{X}_{R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{1} & \boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{X}_{R} \\ \boldsymbol{X}_{R}^{T}\boldsymbol{1} & \boldsymbol{X}_{R}^{T}\boldsymbol{X}_{R} \end{bmatrix}$$
(4)

显然, X^TX 是对称矩阵,其逆矩阵也是对称矩阵,假设其为

$$(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} = \begin{bmatrix} a & \boldsymbol{b}^T \\ \boldsymbol{b} & \boldsymbol{C} \end{bmatrix}$$
 (5)

其中, $a \in \mathbb{R}$ 是个标量, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^k$, $\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{k \times k}$, 则有

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}^{T}\mathbf{1} & \mathbf{1}^{T}\mathbf{X}_{R} \\ \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{1} & \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{X}_{R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & \mathbf{b}^{T} \\ \mathbf{b} & \mathbf{C} \end{bmatrix}
= \begin{bmatrix} \mathbf{1}^{T}\mathbf{1}a + \mathbf{1}^{T}\mathbf{X}_{R}\mathbf{b} & \mathbf{1}^{T}\mathbf{1}\mathbf{b}^{T} + \mathbf{1}^{T}\mathbf{X}_{R}\mathbf{C} \\ \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{1}a + \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{X}_{R}\mathbf{b} & \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{1}\mathbf{b}^{T} + \mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{X}_{R}\mathbf{C} \end{bmatrix}
= \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0}^{T} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{k} \end{bmatrix}$$
(6)

上式中 $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^k$, $I_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 是单位矩阵. 观察最后一个等号前后矩阵的第一行,显然有

$$\mathbf{1}^{T}\mathbf{1}a + \mathbf{1}^{T}X_{R}\mathbf{b} = 1$$

$$\mathbf{1}^{T}\mathbf{1}\mathbf{b}^{T} + \mathbf{1}^{T}X_{R}C = \mathbf{0}^{T}$$
(7)

再看 $X(X^TX)^{-1}X^T$, 如下

$$\mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{1} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} \ \mathbf{X}_{R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b^{T} \\ b & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{1}^{T} \\ \mathbf{X}_{R}^{T} \end{bmatrix} \mathbf{1}
= \begin{bmatrix} a\mathbf{1} + \mathbf{X}_{R}b & \mathbf{1}b^{T} + \mathbf{X}_{R}C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{1}^{T} \\ \mathbf{X}_{R}^{T} \end{bmatrix} \mathbf{1}
= \begin{bmatrix} a\mathbf{1}\mathbf{1}^{T} + \mathbf{X}_{R}b\mathbf{1}^{T} + \mathbf{1}b^{T}\mathbf{X}_{R}^{T} + \mathbf{X}_{R}C\mathbf{X}_{R}^{T} \end{bmatrix} \mathbf{1}
= a\mathbf{1}\mathbf{1}^{T}\mathbf{1} + \mathbf{X}_{R}b\mathbf{1}^{T}\mathbf{1} + \mathbf{1}b^{T}\mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{1} + \mathbf{X}_{R}C\mathbf{X}_{R}^{T}\mathbf{1}$$
(8)

观察上式最后一个等号的右边,第一项中 $\mathbf{1}^T\mathbf{1}\in\mathbb{R}$,第三项中 $\mathbf{b}^T\mathbf{X}_R^T\mathbf{1}$ 都是标量,标量的转置是其本身,再结合 (7) 式,第一项和第三项的和

$$a\mathbf{1}\mathbf{1}^{T}\mathbf{1} + \mathbf{1}\boldsymbol{b}^{T}\boldsymbol{X}_{R}^{T}\mathbf{1} = a(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})\mathbf{1} + (\boldsymbol{b}^{T}\boldsymbol{X}_{R}^{T}\mathbf{1})\mathbf{1}$$

$$= a(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})\mathbf{1} + (\mathbf{1}^{T}\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{b})\mathbf{1}$$

$$= [a(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1}) + (\mathbf{1}^{T}\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{b})]\mathbf{1}$$

$$= \mathbf{1}$$
(9)

结合 (7) 式, 再看第二项和第四项的和

$$\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{b}\boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{1} + \boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}_{R}^{T}\boldsymbol{1} = [[\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{b}\boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{1} + \boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}_{R}^{T}\boldsymbol{1}]^{T}]^{T}$$

$$= [\boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{1}\boldsymbol{b}^{T}\boldsymbol{X}_{R}^{T} + \boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{C}^{T}\boldsymbol{X}_{R}^{T}]^{T}$$

$$= [(\boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{1}\boldsymbol{b}^{T} + \boldsymbol{1}^{T}\boldsymbol{X}_{R}\boldsymbol{C}^{T})\boldsymbol{X}_{R}^{T}]^{T}$$

$$= [\boldsymbol{0}^{T}\boldsymbol{X}_{R}^{T}]^{T}$$

$$= \boldsymbol{0}$$

$$(10)$$

回看 (8) 式,可得 $X(X^TX)^{-1}X^T\mathbf{1} = \mathbf{1}$,同理可得 $\mathbf{1}^TX(X^TX)^{-1}X^T = \mathbf{1}^T$. 推导过程中,需要注意矩阵和向量的维数.

接下来就有

$$[X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]^{2}$$

$$= [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}][X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]$$

$$= X(X^{T}X)^{-1}X^{T}X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}X(X^{T}X)^{-1}X^{T}$$

$$- X(X^{T}X)^{-1}X^{T}\mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T} + \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}\mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}$$

$$= X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T} + \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}$$

$$= X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}$$

$$= X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}$$

结合(2)式的结论,(1)式可继续推导为

$$SSR = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - \overline{y})^{2}$$

$$= y^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T}y - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]y$$

$$= y^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}][X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]y$$

$$= y^{T} [X(X^{T}X)^{-1}X^{T} - \mathbf{1}(\mathbf{1}^{T}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^{T}]y$$
(12)

至此,上面已经证明了 $X(X^TX)^{-1}X^T-1(1^T1)^{-1}1^T$ 是一个幂等的实对称矩阵. 接下来,将其简单表示为 Q ,则有

$$SSR = \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} \tag{13}$$

因为 $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是实对称矩阵,所以其可以正交对角化,即存在正交矩阵 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$,使得

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Q}\mathbf{P} = \mathbf{P}^{T}\mathbf{Q}\mathbf{P} = \mathbf{\Lambda} \tag{14}$$

其中, $\Lambda \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是实对角矩阵, 对角线上的元素是 Q 的 n 个特征值. 所以有

$$SSR = \mathbf{y}^{T} \mathbf{Q} \mathbf{y}$$

$$= \mathbf{y}^{T} \mathbf{P} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{P}^{T} \mathbf{y}$$

$$= (\mathbf{P}^{T} \mathbf{y})^{T} \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{P}^{T} \mathbf{y})$$
(15)

又因为Q是等幂矩阵,所以有

$$\Lambda^{2} = P^{T}QPP^{T}QP$$

$$= P^{T}Q^{2}P$$

$$= P^{T}QP$$

$$= \Lambda$$
(16)

可见 Λ 也是等幂的. 如果一个对角矩阵是等幂的,其对角元素要么是 1,要么是 0(可自行证明). 用 p_{ij} 表示 P 第 i 行第 j 列的元素. $P^T y \in \mathbb{R}^n$ 的第 i 个元素可以表示为 $\sum_{j=1}^n p_{ji}y_j$,带入 (15) 式,可得

$$SSR = (\mathbf{P}^{T}\mathbf{y})^{T}\mathbf{\Lambda}(\mathbf{P}^{T}\mathbf{y})$$

$$= \left[\sum_{j=1}^{n} p_{j1}y_{j} \sum_{j=1}^{n} p_{j2}y_{j} \cdots \sum_{j=1}^{n} p_{jn}y_{j}\right] \begin{bmatrix} \lambda_{1} & & \\ & \lambda_{2} & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} p_{j1}y_{j} \\ \sum_{j=1}^{n} p_{j2}y_{j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{n} p_{jn}y_{j} \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i} (\sum_{j=1}^{n} p_{ji}y_{j})^{2}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} (\sum_{j=1}^{n} p_{ji}y_{j})^{2}$$

$$(17)$$

上式中,m是对角矩阵 Λ 对角元素为1的个数.

当 $\beta = 0$ 时, $y = X\beta + \epsilon = \epsilon$,则有

$$SSR = \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} p_{ji} y_{j} \right)^{2} = \sum_{j=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} p_{ji} \epsilon_{j} \right)^{2}$$
 (18)

则有

上面倒数第二个推导 (\downarrow) 需要证明 $\frac{1}{\sigma}\sum_{j=1}^n p_{ji}\epsilon_j$ 和 $\frac{1}{\sigma}\sum_{j=1}^n p_{jl}\epsilon_j$ 之间的独立性,如下

$$Cov(\frac{1}{\sigma}\sum_{j=1}^{n}p_{ji}\epsilon_{j}, \frac{1}{\sigma}\sum_{j=1}^{n}p_{jl}\epsilon_{j}) = \frac{1}{\sigma^{2}}Cov(\sum_{j=1}^{n}p_{ji}\epsilon_{j}, \sum_{j=1}^{n}p_{jl}\epsilon_{j})$$

$$= \frac{1}{\sigma^{2}}\sum_{j=1}^{n}\sum_{h=1}^{n}Cov(p_{ji}\epsilon_{j}, p_{hl}\epsilon_{h})$$

$$= \frac{1}{\sigma^{2}}\sum_{j=1}^{n}\sum_{h=1}^{n}p_{ji}p_{hl}Cov(\epsilon_{j}, \epsilon_{h})$$

$$= \frac{1}{\sigma^{2}}\sum_{j=1}^{n}\sum_{h=1}^{n}p_{ji}p_{hl}\cdot 0$$

$$= 0$$

$$(20)$$

上式中,因为 ϵ_i 之间相互独立,所以 $Cov(\epsilon_i,\epsilon_j)=0$. 协方差为 0 的两个正态分布,相互独立. 独立性得证.

最后,来看看上面这个卡方分布的自由度 m ,到底是多少. 上面已经说过,是对角矩阵 Λ 的对角元素要么是 1,要么是 0,m 是 1 的个数,也就是说,m 也是对角矩阵 Λ 的迹,所以

5 附录 6

$$m = trace(\boldsymbol{\Lambda})$$

$$= trace(\boldsymbol{P}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{P})$$

$$= trace(\boldsymbol{P} \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{Q})$$

$$= trace(\boldsymbol{Q})$$

$$= trace[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T - \mathbf{1}(\mathbf{1}^T \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T]$$

$$= trace[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T] - trace[\mathbf{1}(\mathbf{1}^T \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T]$$

$$= trace[\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1}] - trace[\mathbf{1}^T \mathbf{1}(\mathbf{1}^T \mathbf{1})^{-1}]$$

$$= trace(\boldsymbol{I}_{k+1}) - trace(\boldsymbol{I}_1)$$

$$= k + 1 - 1$$

$$= k$$
(21)

上式中的 k 就是回归模型中回归变量的个数. 推导过程中使用到了矩阵迹的性质。

到此,我们已经基本完整地证明了回归平方和 $\frac{1}{\sigma^2}SSR$ 服从自由度为 k 的卡方分布,用数学表达式表示为

$$\frac{1}{\sigma^2}SSR \sim \chi^2(k) \tag{22}$$

5 附录

定理一

实对称矩阵 $\pmb{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 必定正交相似于实对角矩阵 $\pmb{\Lambda}$,即存在正交矩阵 \pmb{P} ,使得 $\pmb{P}^{-1}\pmb{A}\pmb{P} = \pmb{P}^T\pmb{A}\pmb{P} = \pmb{\Lambda}$,其中 $\pmb{\Lambda}$ 对角线上的元素是 \pmb{A} 的 n 个特征值.

证明可请参考线性代数的教材.

定理二

矩阵迹的运算有如下性质:

$$trace(\mathbf{A}\mathbf{B}) = trace(\mathbf{B}\mathbf{A})$$

$$trace(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = trace(\mathbf{A}) + trace(\mathbf{B})$$

$$trace(c\mathbf{A}) = c \cdot trace(\mathbf{A})$$
(23)