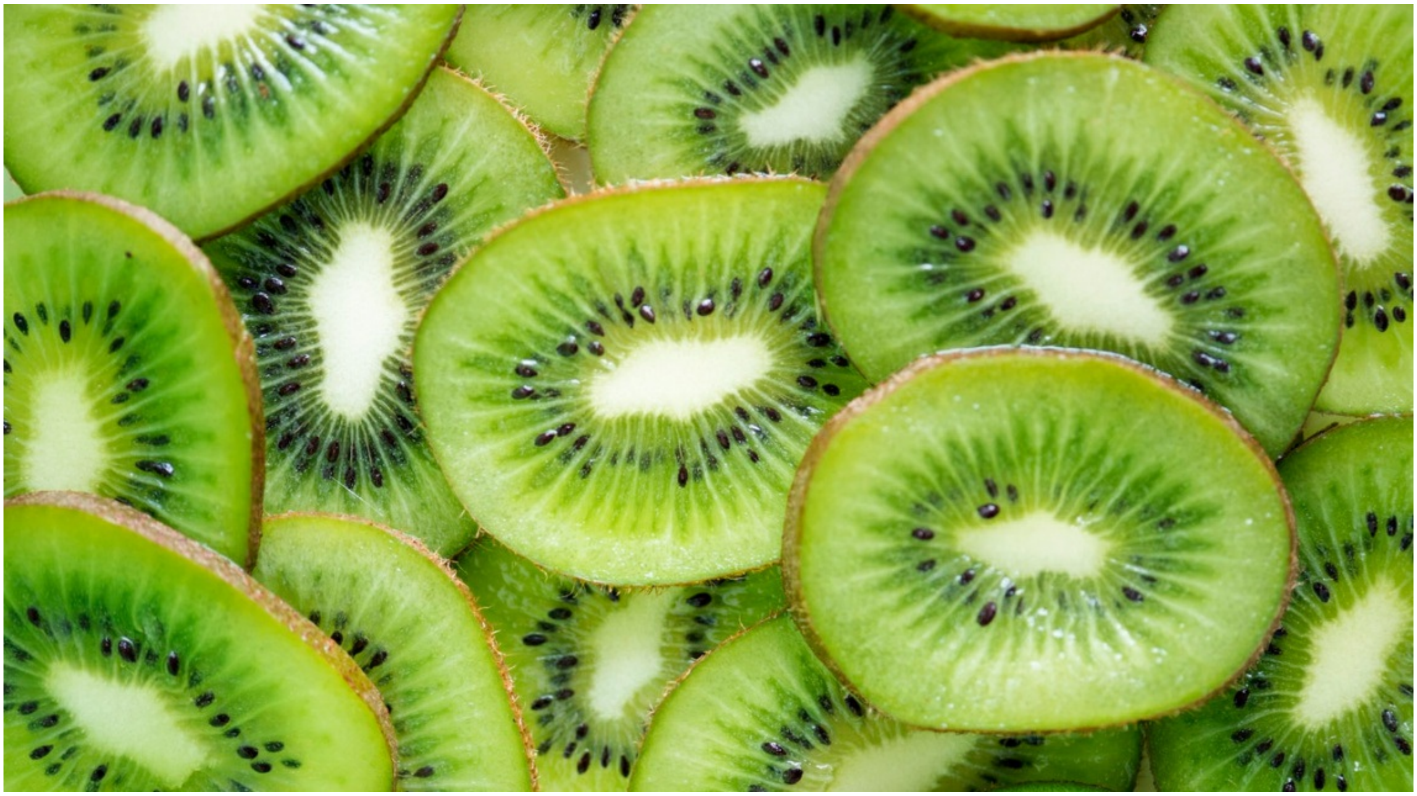
39讲线性回归（上）：如何使用高斯消元求解线性方程组



你好，我是黄申。

之前我使用Boston Housing的数据，阐述了如何使用多元线性回归。可是，计算机系统究竟是如何根据观测到的数据，来拟合线性回归模型呢？这两节，我就从最简单的线性方程组出发，来说说如何求解线性回归的问题。

在第29讲中，我讲过机器学习中两类很重要的方法：回归分析以及线性回归。回归分析属于监督式学习算法，主要研究一个或多个随机变量y_1，y_2，…，y_i与另一些变量x_{1}，x_{2}，…，x_{k}之间的关系。其中，我们将$y_{1}，y_{2}、…，y_{i}$称为因变量，$x_1，x_2，…，x_k$称为自变量。按照不同的维度，我们可以把回归分为三种。

- 按照自变量数量，当自变量x的个数大于1时就是多元回归。
- 按照因变量数量，当因变量y个数大于1时就是多重回归。
- 按照模型种类，如果因变量和自变量为线性关系时，就是线性回归模型；如果因变量和自变量为非线性关系时时，就是非线性回归分析模型。

高斯消元法

对于回归分析来说，最简单的情形是只有一个自变量和一个因变量，且它们大体上是有线性关系的，这就是一元线性回归。对应的模型很简单，就是$Y=a+bX+ε$。这里的X是自变量，Y是因变量，a是截距，b是自变量的系数。前面这些你估计都很熟悉，最后还有个$ε$，这表示随机误差，只不过我们通常假定随机误差的均值为0。进一步来说，如果我们暂时不考虑a和ε，把它扩展为多元的形式，那么就可以得到类似下面这种形式的方程：

$b_1·x_1+b_2·x_2+…+b_{n-1}·x_{n-1} +b_n·x_n=y$

假设我们有多个这样的方程，就能构成线性方程组，我这里列出一个例子。

$2x_1+x_2+x_3=0$

$4x_1+2x_2+x_3=56$
$2x_1-x_2+4x_3=4$

对于上面这个方程组，如果存在至少一组$x_1、x_2$和x_3使得三个方程都成立，那么就叫方程有解；如果没有，那么我们就说方程无解。如果方程有解，那么解可能是唯一，也可能是多个。我们通常关心的是，方程组是不是有解，以及x_1一直到x_n分别是多少。

为了实现这个目的，人们想了很多方法来求解方程组，这些方法看起来多种多样，其实主要就是两大类，直接法和迭代法。

直接法就是通过有限次的算术运算，计算精确解。而迭代法，我们在第3讲就提到过，它是一种不断用变量的旧值递推新值的过程。我们可以用迭代法不断地逼近方程的精确解。

这里，我就从上面这个方程组的例子出发，阐述最常见的高斯消元法，以及如何使用矩阵操作来实现它。

高斯消元法主要分为两步，**消元**（Forward Elimination）和**回代**（Back Substitution）。所谓消元，就是要减少某些方程中元的数量。如果某个方程中的元只剩一个了x_m了，那么这个自变量x_m的解就能知道了。所谓的回代，就是把已知的解x_m代入到方程式中，求出其他未知的解。

我们先从消元开始，来看这个方程组。

$2x_1+x_2+x_3=0$
$4x_1+2x_2+x_3=56$
$2x_1-x_2+4x_3=4$

首先保持第一个方程不变，然后消除第二个和第三个方程中的x_1。对于第二个方程，方法是让第二个方程式减去第一个方程式的两倍，方程的左侧为：

$(4x_1+2x_2+x_3)-2(2x_1+x_2+x_3)=-x_3$

方程的右侧变为：

$56-2·0=56$

所以第二个方程变为：

$-x_3=56$

这样三个方程式就变为：

$2x_1+x_2+x_3=0$
$-x_3=56$
$2x_1-x_2+4x_3=4$

对于第三个方程同样如此，我们需要去掉其中的x_1。方法是让第三个方程减去第一个方程，之后三个方程式变为：

$2x_2+x_2+x_3=0$
$-x_3=56$
$-2x_2+3x_3=4$

至此，我们使用第一个方程式作为参照，消除了第二个和第三个方程式中的x_1，我们称这里的第一个方程式为“主元行”。

接下来，我们要把第二个方程式作为“主元行”，来消除第三个方程中的x_2。你应该能发现，第二个方程中的x_2已经没

有了，失去了参照，这个时候我们需要把第二个方程和第三个方程互换，变为：

$2x_1+x_2+x_3=0$
$-2x_1+3x_3=4$
$-x_3=56$

到了这个时候，由于第三个方程以及没有x_2了，所以无需再消元。如果还有x_2，那么就需要参照第二个方程式来消除第三个方程中的x_2。

观察一下现在的方程组，第一个方程有3个自变量，第二个方程有2个自变量，第三个方程只有1个自变量。这个时候，我们就可以从第三个方程开始，开始回代的过程了。通过第三个方程，显然我们可以得到$x_3=-56$，然后把这个值代入第二个方程，就可以得到$x_2 = -86$。最后把x_2和x_3的值代入第一个方程式，我们可以得到$x_1=71$。

使用矩阵实现高斯消元法

如果方程和元的数量很小，那么高斯消元法并不难理解。可是如果方程和元的数量很多，整个过程就变得比较繁琐了。实际上，我们可以把高斯消元法转为矩阵的操作，便于自己的理解和记忆。

为了进行矩阵操作，首先我们要把方程中的系数b_i转成矩阵，我们把这个矩阵记作B。对于上面的方程组示例，系数矩阵为：

$$B=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

那么，最终我们通过消元，把系数矩阵B变为：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

从次可以看出，消元的过程就是把原始的系数矩阵变为上三角矩阵。这里的上三角矩阵表示，矩阵中只有主对角线以及主对角线以上的三角部分里有数字。我们用U表示上三角矩阵。

而回代呢，我们最终得到的结果是：

$x_1=71$
$x_2=-86$

$x_3=-56$

我们可以把这几个结果看作：

$1·x_1+0·x_2+0·x_3=71$
$0·x_1+1·x_2+0·x_3=-86$
$0·x_1+0·x_2+1·x_3=-56$

再把系数写成矩阵的形式，就是：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

发现没？这其实就是单位矩阵。所以说，回代的过程是把上三角矩阵变为单位矩阵的过程。

为了便于后面的回代计算，我们也可以把方程式等号右边的值加入到系数矩阵，我们称这个新的矩阵为**增广矩阵**，我把这个矩阵记为A。

好，现在让我们来观察一下这个增广矩阵A。

$$A=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 1 & 56 \\ 2 & -1 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

对于这个矩阵，我们的最终目标是，把除了最后一列之外的部分，变成单位矩阵，而此时最后一列中的每个值，就是每个自变量所对应的解了。

之前我已经讲过矩阵相乘在向量空间模型、PageRank算法和协同过滤推荐中的应用。这里，我们同样可以使用这种操作来进行消元。为了方便你理解，我们可以遵循之前消元的步骤一步步来看。

还记得这个方程组消元的第一步吗？对，首先保持第一个方程不变，然后消除第二个和第三个方程中的x_1。这就意味着要把$A2，1$和$A3$，1变为0。

对于第一个方程式，如果要保持它不变，我们可以让向量$[1, 0, 0]$左乘A。对于第二个方程，具体操作是让第二个方程式减去第一个方程式的两倍，达到消除x_1的目的。我们可以让向量$[-2, 1, 0]$左乘A。对于第三个方程式，具体操作是让第三个方程式减去第一个方程式，达到消除x_1的目的。我们可以让向量$[-1, 0, 1]$左乘A。我们使用这三个行向量组成

一个矩阵$E1$。

$$E_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此，我们可是用下面这个矩阵$E1$和A的点乘，来实现消除第二个和第三个方程式中x_1的目的。

$$E_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 1 & 56 \\ 2 & -1 & 4 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 56 \\ 0 & -2 & 3 & 4 \end{bmatrix}$$

你会发现，由于使用了增广矩阵，矩阵中最右边的一列，也就是方程等号右边的数值也会随之发生改变。

下一步是消除第三个方程中的x_2。依照之前的经验，我们要把第二个方程式作为“主元行”，来消除第三个方程中的x_2。可是第二个方程中的x_2已经没有了，失去了参照，这个时候我们需要把第二个方程和第三个方程互换。这种互换的操作如何使用矩阵来实现呢？其实不难，例如使用下面这个矩阵$E2$左乘增广矩阵A。

$$E_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

上面这个矩阵第一行$[1 0 0]$的意思就是我们只取第一行的方程，而第二行$[0 0 1]$的意思是只取第三个方程，而第三行$[0 1 0]$表示只取第二个方程。

我们先让$E1$左乘A，然后再让$E2$左乘$E1A$的结果，就能得到消元后的系数矩阵。

$$E_2(E_1A)=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&1&0\\0&0&-1&56\\0&-2&3&4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&1&1&0\\0&-2&3&4\\0&0&-1&56\end{bmatrix}$$

我们把$E1$点乘$E2$的结果记作$E3$，并把$E3$称为消元矩阵。

$$E_2(E_1A)=(E_2E_1)A=\left(\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\-1&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix}2&1&1&0\\4&2&1&56\\2&-1&4&4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\-1&0&1\\-2&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&1&0\\4&2&1&56\\2&-1&4&4\end{bmatrix}=E_3A$$

$$E_3=\begin{bmatrix}1&0&0\\-1&0&1\\-2&1&0\end{bmatrix}$$

对于目前的结果矩阵来说，除了最后一列，它已经变成了一个上三角矩阵，也就是说消元步骤完成。接下来，我们要使得最后一列之外的部分变成一个单位矩阵，就能得到最终的方程组解。和消元不同的是，我们将从最后一行开始。对于最后一个方程，我们只需要把所有系数取反就行了，所以会使用下面这个矩阵$S1$实现。

$$S_1=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$$

$$S_1(E_3A)=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&1&0\\0&-2&3&4\\0&0&-1&56\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&1&1&0\\0&-2&3&4\\0&0&1&-56\end{bmatrix}$$

接下来要去掉第二个方程中的x_3，我们要把第二个方程减去3倍的第三个方程，然后除以-2。首先是减去3倍的第三个方程。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 172 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}$$

然后把第二个方程除以-2。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 172 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -86 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}$$

最后，对于第一个方程，我们要把第一个方程减去第二个和第三个方程，最后除以2，我把这几步合并了，并列在下方。

$$\begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -86 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -86 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 71 \\ 0 & 1 & 0 & -86 \\ 0 & 0 & 1 & -56 \end{bmatrix}$$

最终，结果矩阵的最后一列就是方程组的解。我们把回代部分的矩阵，都点乘起来。

$$S=\begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 & 5/4 \\ 0 & -1/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

而消元矩阵$E3$为：

$$E_3=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

我们可以让矩阵S左乘矩阵$E3$，就会得到下面的结果。

$$SE_3=\begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 & 5/4 \\ 0 & -1/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -9/4 & 5/4 & 1/4 \\ 7/2 & -3/2 & -1/2 \\ 2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

我们把这个矩阵记作SE，把乘以最初的系数矩阵B，就得到了一个单位矩阵。根据逆矩阵的定义，SE就是B的逆矩阵。换个角度来思考，使用消元法进行线性方程组求解的过程，就是在找系数矩阵的逆矩阵的过程。

总结

今天我们一起探讨了求解线性方程组最常见的方法之一，高斯消元法。这个方法主要包含了消元和回代两个步骤。这些步骤都可以使用矩阵的操作来进行。从矩阵的角度来说，消元就是把系数矩阵变为上三角矩阵，而回代是把这个上三角矩阵变为单位矩阵。我们可以直接把用于消元和回代的矩阵，用于由系数和因变量值组成的增广矩阵，并获得最终的方程解。

线性方程组的概念，也是线性回归分析的基础。在线性回归时，我们也能获得由很多观测数据值所组成的方程组。但是，在进行线性回归分析时，方程组的处理方式和普通的方程组求解有一些不同。其中有两个最主要的区别。

第一个区别是，在线性回归分析中，样本数据会告诉我们自变量和因变量的值，要求的是系数。而在线性方程组中，我们已知系数和因变量的值，要求的是自变量的值。

第二个区别是，在线性回归分析中，方程的数量要远远大于自变量的数量，而且我们不要求每个方程式都是完全成立。这里，不要求完全成立的意思是，拟合出来的因变量值可以和样本数据给定的因变量值存在差异，也就允许模型拟合存在误差。模型拟合的概念我在上一模块的总结篇中重点讲解了，所以你应该能理解，模型的拟合不可能100%完美，这和我们求解线性方程组精确解的概念是不同的。

正是因为这两点差异，我们无法直接使用消元法来求解线性回归。下一节，我会来详细解释，如何使用最小二乘法来解决线性回归的问题。

思考题

请分别写出下面这个方程组的消元矩阵和回代矩阵，并求出最终的解。

$x_1-2x_2+x_3-4x_4=4$
$x_2-x_3+x_4=-3$
$x_1+3x_2+x_4=1$
$-7x_2+3x_3+x_4=-3$

欢迎留言和我分享，也欢迎你在留言区写下今天的学习笔记。你可以点击“请朋友读”，把今天的内容分享给你的好友，和他一起精进。

极客时间
程序员的数学基础课
在实战中重新理解数学
黄申
LinkedIn 资深数据科学家
新版升级：点击「请朋友读」，10位好友免费读，邀请订阅更有现金奖励。

精选留言