41讲线性回归（下）：如何使用最小二乘法进行效果验证

你好，我是黄申。

上一节我们已经解释了最小二乘法的核心思想和具体推导过程。今天我们就用实际的数据操练一下，这样你的印象就会更加深刻。我会使用几个具体的例子，演示一下如何使用最小二乘法的结论，通过观测到的自变量和因变量值，来推算系数，并使用这个系数来进行新的预测。

基于最小二乘法的求解

假想我们手头上有一个数据集，里面有3条数据记录。每条数据记录有2维特征，也就是2个自变量，和1个因变量。

数据记录ID	特征1（自变量*x1*）	特征2（自变量*x2*）	因变量
1	0	1	1.5
2	1	-1	-0.5
3	2	8	14

如果我们假设这些自变量和因变量都是线性的关系，那么我们就可以使用如下这种线性方程，来表示数据集中的样本：

$b_1·0+b_2·1=1.5$

$b_1·1-b_2·1=-0.5$

$b_1·2+b_2·8=14$

也就是说，我们通过观察数据已知了自变量x_1、x_2和因变量_y_的值，而要求解的是b_1和b_2这两个系数。如果我们能求出b_1和b_2，那么在处理新数据的时候，就能根据新的自变量x_1和x_2的取值，来预测y的值。

可是我们说过，由实际项目中的数据集所构成的这类方程组，在绝大多数情况下，都没有精确解。所以这个时候我们没法使用之前介绍的高斯消元法，而是要考虑最小二乘法。根据上一节的结论，我们知道对于系数矩阵B，有：

$B=(X'X)^{-1}X'Y$

既然有了这个公式，要求B就不难了，让我们从最基本的几个矩阵开始。

$$X=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix}$$

$$Y=\begin{bmatrix} 1.5 \\ -0.5 \\ 14 \end{bmatrix}$$

$$X'=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix}$$

$$X'X=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5 & 15 \\ 15 & 66 \end{bmatrix}$$

矩阵$(X'X)^{-1}$的求解稍微繁琐一点。逆矩阵的求法我还没讲解过，之前我们说过线性方程组之中，高斯消元和回代的过程，就是把系数矩阵变为单位矩阵的过程。我们可以利用这点，来求解X^{-1}。我们把原始的系数矩阵X列在左边，然后

把单位矩阵列在右边，像$[X | I]$这种形式，

其中I表示单位矩阵。

然后我们对左侧的矩阵进行高斯消元和回代，把左边矩阵X变为单位矩阵。同时，我们也把这个相应的矩阵操作运用在右侧。这样当左侧变为单位矩阵之后，那么右侧的矩阵就是原始矩阵X的逆矩阵X^{-1}，具体证明如下：

$[X | I]$
$[X^{-1}X | X^{-1}I]$
$[I | X^{-1}I]$
$[I | X^{-1}]$

好了，给定下面的$X'X$矩阵之后，我们使用上述方法来求$(X'X)^{-1}$ 。我把具体的推导过程列在了这里。

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 15 & 66 & 0 & 1 \end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 0 & 21 & -3 & 1 \end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 15 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right]$$

$$=\left[\begin{array}{cc|cc} 5 & 0 & 22/7 & -5/7 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 22/35 & -1/7 \\ 0 & 1 & -1/7 & 1/21 \end{array}\right]$$

$$(X'X)^{-1}=\left[\begin{array}{cc} 22/35 & -1/7 \\ -1/7 & 1/21 \end{array}\right]$$

求出$(X'X)^{-1}$之后，我们就可以使用$B=(X'X)^{-1}X'Y$来计算矩阵B。

$$(X'X)^{-1}X'=\left[\begin{array}{cc} 22/35 & -1/7 \\ -1/7 & 1/21 \end{array}\right]\left[\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{array}\right]=\left[\begin{array}{ccc} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{array}\right]$$

$$B=(X'X)^{-1}X'Y=\left[\begin{array}{ccc} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{array}\right]\left[\begin{array}{c} 1.5 \\ -0.5 \\ 14 \end{array}\right]=\left[\begin{array}{c} 1 \\ 1.5 \end{array}\right]$$

最终，我们求出系数矩阵为$[1 1.5]$，也就是说$b_1 = 1$, $b_2 = 1.5$。实际上，这两个数值是精确解。我们用高斯消元也是能获得同样结果的。接下来，让我稍微修改一下y值，让这个方程组没有精确解。

$b_1·0+b_2·1=1.4$
$b_1·1-b_2·1=-0.48$
$b_1·2+b_2·8=13.2$

你可以尝试高斯消元法对这个方程组求解，你会发现只要两个方程就能求出解，但是无论是哪两个方程求出的解，都无法满足第三个方程。

那么通过最小二乘法，我们能不能求导一个近似解，保证_ε_足够小呢？下面，让我们遵循之前求解$(X'X)^{-1}X'Y$的过程，来计算B。

$$Y = \begin{bmatrix} 1.4 \\ -0.48 \\ 13.2 \end{bmatrix}$$

$$(X'X)^{-1}X' = \begin{bmatrix} 22/35 & -1/7 \\ -1/7 & 1/21 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{bmatrix}$$

$$B = (X'X)^{-1}X'Y = \begin{bmatrix} -1/7 & 27/35 & 4/35 \\ 1/21 & -4/21 & 2/21 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.4 \\ -0.48 \\ 13.2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.938 \\ 1.415 \end{bmatrix}$$

计算完毕之后，你会发现两个系数的值分别变为$b_1 = 0.938, b_2 = 1.415$。由于这不是精确解，所以让我们看看有了这系数矩阵B之后，原有的观测数据中，真实值和预测值的差别。

首先我们通过系数矩阵B和自变量矩阵X计算出来预测值。

$$\hat{Y} = XB = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.938 \\ 1.415 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.415 \\ -0.477 \\ 13.196 \end{bmatrix}$$

然后是样本数据中的观测值。这里我们假设这些值是真实值。

$$Y = \begin{bmatrix} 1.4 \\ -0.48 \\ 13.2 \end{bmatrix}$$

根据误差$ε$的定义，我们可以得到：

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - \hat{y} \right)^2 = \sqrt{(1.4 - 1.415)^2 + (-0.48 + 0.477)^2 + (13.2 - 13.196)^2} = 0.0158$$

说到这里，你可能会怀疑，通过最小二乘法所求得的系数$b_1 = 0.949$和$b_2 = 1.415$，是不是能让$ε$最小呢？这里，我们随机的修改一下这两个系数，变为$b_1 = 0.95$和$b_2 = 1.42$，然后我们再次计算预测的y值和$ε$。

$$\hat{Y}_1 = XB_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.95 \\ 1.42 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.42 \\ -0.47 \\ 13.26 \end{bmatrix}$$

很明显，0.064是大于之前的0.0158。

这两次计算预测值_y_的过程，其实也是我们使用线性回归，对新的数据进行预测的过程。简短地总结一下，线性回归模型根据大量的训练样本，推算出系数矩阵B，然后根据新数据的自变量X向量或者矩阵，计算出因变量的值，作为新数据的预测。

Python代码实现

这一部分，我们使用Python的代码，来验证一下之前的推算结果是不是正确，并看看最小二乘法和Python sklearn库中的线性回归，这两种结果的对比。

首先，我们使用Python numpy库中的矩阵操作来实现最小二乘法。主要的函数操作涉及矩阵的转置、点乘和求逆。具体的代码和注释我列在了下方。

```
from numpy import *

x = mat([[0,1],[1,-1],[2,8]])
y = mat([[1.4],[-0.48],[13.2]])

# 分别求出矩阵X'、X'X、(X'X)的逆
# 注意，这里的I表示逆矩阵而不是单位矩阵
print("X矩阵的转置X'：\n", x.transpose())
print("\nX'点乘X：\n", x.transpose().dot(x))
print("\nX'X矩阵的逆\n", (x.transpose().dot(x)).I)

print("\nX'X矩阵的逆点乘X'\n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()))
print("\n系数矩阵B：\n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()).dot(y))
```

通过上述代码，你可以看到每一步的结果，以及最终的矩阵B。你可以把输出结果和之前手动推算的结果进行对比，看看是不是一致。

除此之外，我们还可把最小二乘法的线性拟合结果和sklearn库中的LinearRegression().fit()函数的结果相比较，具体的代码和注释我也放在了这里。

```
import pandas as pd
from sklearn.linear_model import LinearRegression

df = pd.read_csv("/Users/shenhuang/Data/test.csv")
df_features = df.drop(['y'], axis=1)     #Dataframe中除了最后一列，其余列都是特征，或者说自变量
df_targets = df['y']                     #Dataframe最后一列是目标变量，或者说因变量

print(df_features, df_targets)
regression = LinearRegression().fit(df_features, df_targets)        #使用特征和目标数据，拟合线性回归模型
print(regression.score(df_features, df_targets))        #拟合程度的好坏
print(regression.intercept_)
print(regression.coef_)            #各个特征所对应的系数
```

其中，test.csv文件的内容我也列在了这里。

x_1,x_2,y
$0,1,1.4$
$1,-1,-0.48$
$2,8,13.2$

这样写是为了方便我们使用pandas读取csv文件并加载为dataframe。

在最终的结果中，1.0表示拟合程度非常好，而-0.014545454545452863表示一个截距，[0.94909091 1.41454545]表示系数b_1和b_2的值。这个结果和我们最小二乘法的结果有所差别，主要原因是LinearRegression().fit()默认考虑了有线性函数

存在截距的情况。那么我们使用最小二乘法是不是也可以考虑有截距的情况呢？答案是肯定的，不过我们首先要略微修改一下方程组和矩阵X。如果我们假设有截距存在，那么线性回归方程就要改写为：

$b_0+b_1·x_1+b_2·x_2+…+b_{n-1}·x_{n-1}+b_n·x_n=y$

其中，b_0表示截距，而我们这里的方程组用例就要改写为：

$b_0+b_1·0+b_2·1=1.4$
$b_0+b_1·1-b_2·1=-0.48$
$b_0+b_1·2+b_2·8=13.2$

而矩阵X要改写为：

$$X=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 8 \end{bmatrix}$$

然后我们再执行下面这段代码。

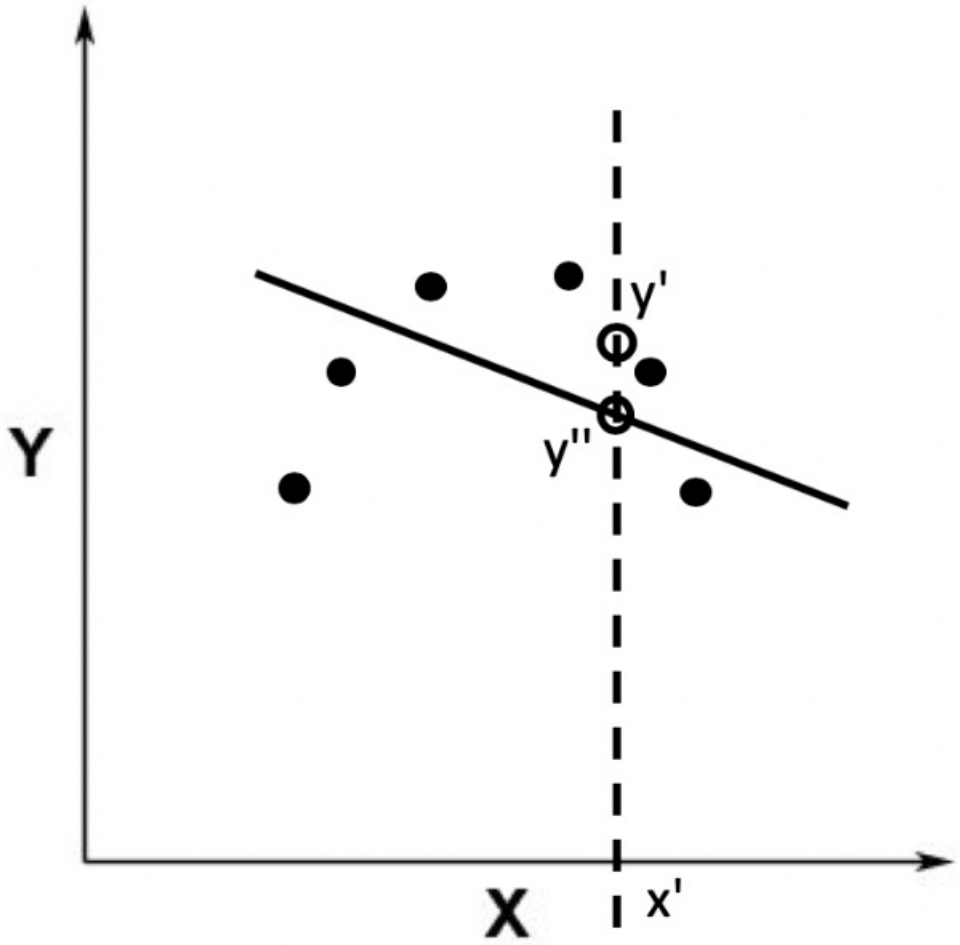
```
from numpy import *

x = mat([[1,0,1],[1,1,-1],[1,2,8]])
y = mat([[1.4],[-0.48],[13.2]])

print("\n系数矩阵B：\n", (x.transpose().dot(x)).I.dot(x.transpose()).dot(y))
```

你就会得到：

```
 系数矩阵B：
     [[-0.01454545]
     [ 0.94909091]
     [ 1.41454545]]
```

这个结果和LinearRegression().fit()的结果就一致了。

需要注意的是，使用线性回归的时候，我们都有一个前提假设，那就是数据的自变量和因变量之间现线性关系。如果不是线性关系，那么使用线性模型来拟合的效果一定不好。比如，之前在解释欠拟合的时候，我用过下面这个例子。



上面这张图的数据分布并没有表达线性关系，所以我们需要对原始的数据进行非线性的变换，或者是使用非线性的模型来拟合。

那么，我们如何判断一个数据集是不是能用线性模型表示呢？在线性回归中，我们可以使用决定系数R2。这个统计指标使用了回归平方和与总平方和之比，是反映模型拟合度的重要指标。它的取值在0到1之间，越接近于1表示拟合的程度越好、数据分布越接近线性关系。随着自变量个数的增加，R2将不断增大，因此我们还需要考虑方程所包含的自变量个数对R2的影响，这个时候可使用校正的决定系数Rc2。所以，在使用各种科学计算库进行线性回归时，你需要关注R2或者Rc2，来看看是不是一个好的线性拟合。在之前的代码实践中，我们提到的regression.score函数，其实就是返回了线性回归的R2。

总结

今天我们使用了具体的案例来推导最小二乘法的计算过程，并用Python代码进行了验证。通过最近3节的讲解，相信你对线性方程组求精确解、求近似解、以及如何在线性回归中运用这些方法，有了更加深入的理解。

实际上，从广义上来说，最小二乘法不仅可以用于线性回归，还可以用于非线性的回归。其主要思想还是要确保误差ε最小，但是由于现在的函数是非线性的，所以不能使用求多元方程求解的办法来得到参数估计值，而需要采用迭代的优化算法来求解，比如梯度下降法、随机梯度下降法和牛顿法。

思考题

我这里给出一个新的方程组，请通过最小二乘法推算出系数的近似解，并使用你熟悉的语言进行验证。

$b_1+b_2·3+b_3·(-7)=-7.5$

$b_1·2+b_2·5+b_3·4=5.2$

$b_1·(-3)+b_2·(-7)+b_3·(-2)=-7.5$

$b_1·1+b_2·4+b_3·(-12)=-15$

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。

精选留言

Joe

回答与疑问：

1. 非线性关系的数据拟合，可以先将自变量转为非线性。如转化为多项式（sklearn的PolynomialFeatures）。再用线性回归的方法去拟合。

2. 请问老师对于求解逆矩阵有没有什么高效的方法?

附上以前写的polyfit方法，请老师指点。谢谢

```
def oneDPolynomiaTransform(self, x_origin):
'''
@description: generate polynomial for 1D input data. rule: [x0, x0^2, x0^3,...,x0^degreee]
@param {type} x_origin- data before transformed[nX1]
@return: x_transformed- data after transformed[nXdegree]
'''
len_features = len(x_origin)
# polynomial feature data after transformed.
x_transformed = np.array([])
for i in range(len_features):
for j in range(self.degree+1):
x_transformed = np.append(
x_transformed, [(x_origin[i])**(j)])
x_transformed = x_transformed.reshape(-1, self.degree+1)
return x_transformed
```

2019-03-21 23:11

作者回复

写得很好，至于逆矩阵更好的求法，我要查一下资料看看有无更优的解。

2019-03-23 01:12