最小二乘法

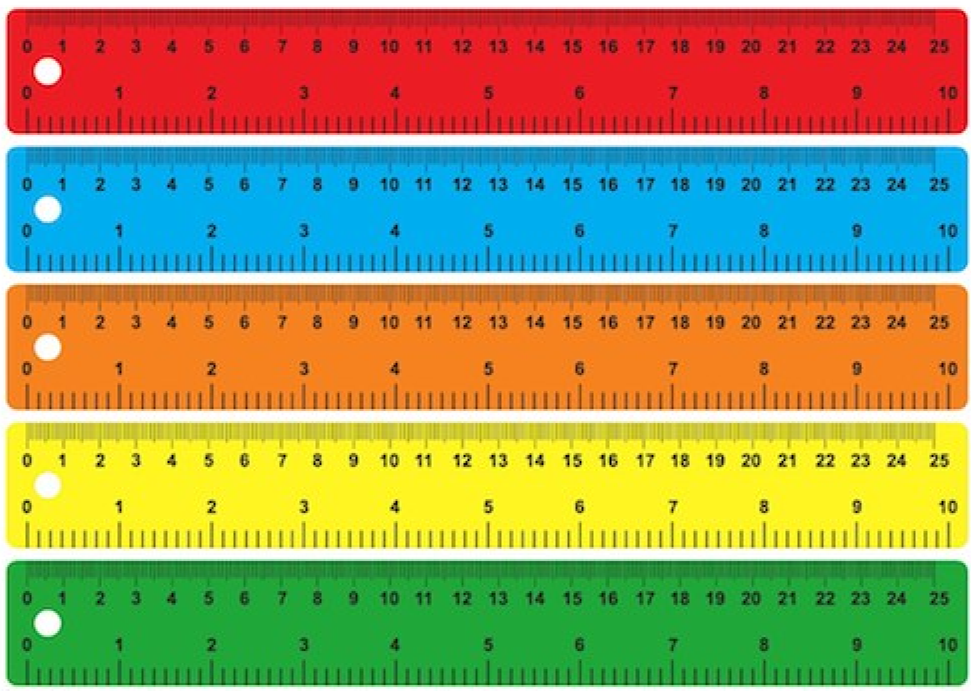
如何理解最小二乘法?

最小平方法是十九世纪统计学的主题曲。 从许多方面来看，它之于统计学就相当于十八世纪的微积分之于数学。

----乔治·斯蒂格勒的《The History of Statistics》

1 日用而不知

来看一个生活中的例子。比如说，有五把尺子：



用它们来分别测量一线段的长度，得到的数值分别为（颜色指不同的尺子）：

	长度
红	10.2
蓝	10.3
橙	9.8
黄	9.9
绿	9.8

之所以出现不同的值可能因为：

- 不同厂家的尺子的生产精度不同
- 尺子材质不同，热胀冷缩不一样
- 测量的时候心情起伏不定
- ……

总之就是有误差，这种情况下，一般取平均值来作为线段的长度：

$$\overline{x}=\frac{10.2+10.3+9.8+9.9+9.8}{5}=10$$

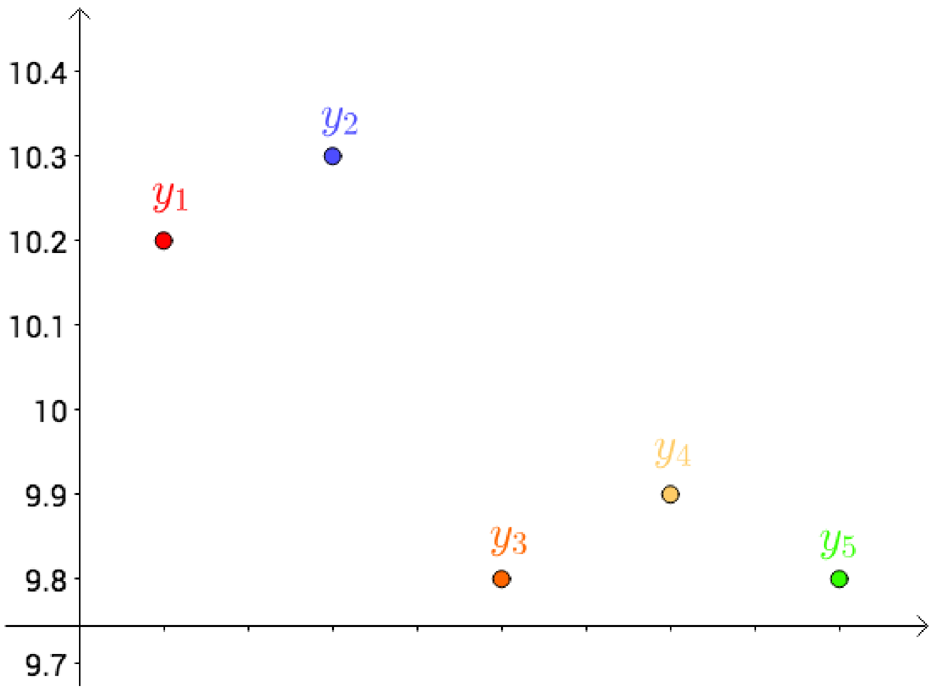
日常中就是这么使用的。可是作为很事'er的数学爱好者，自然要想下：

- 这样做有道理吗?
- 用调和平均数行不行?
- 用中位数行不行?
- 用几何平均数行不行?

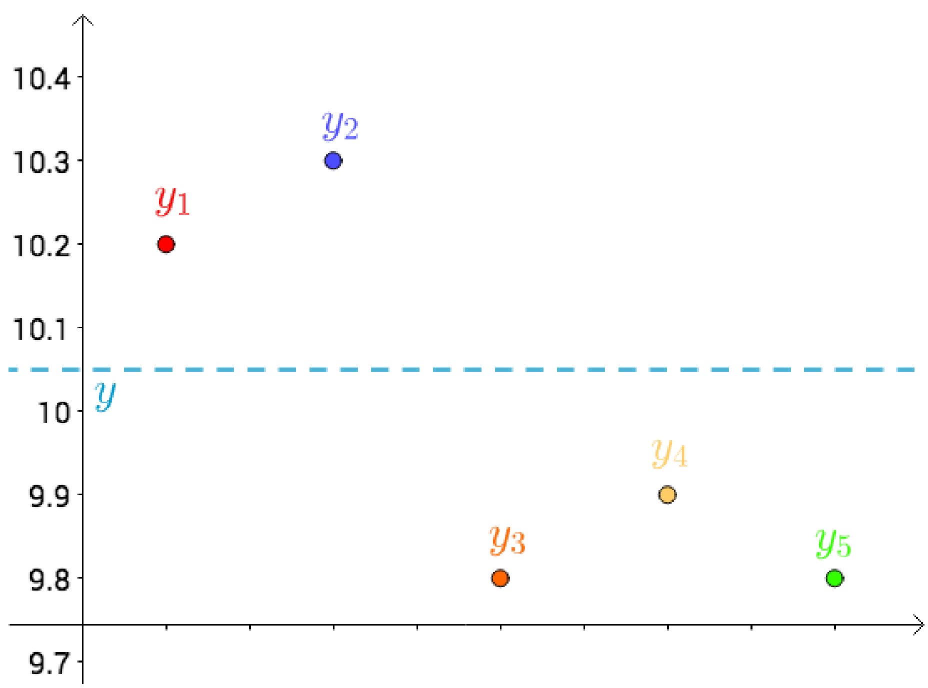
2 最小二乘法

换一种思路来思考刚才的问题。

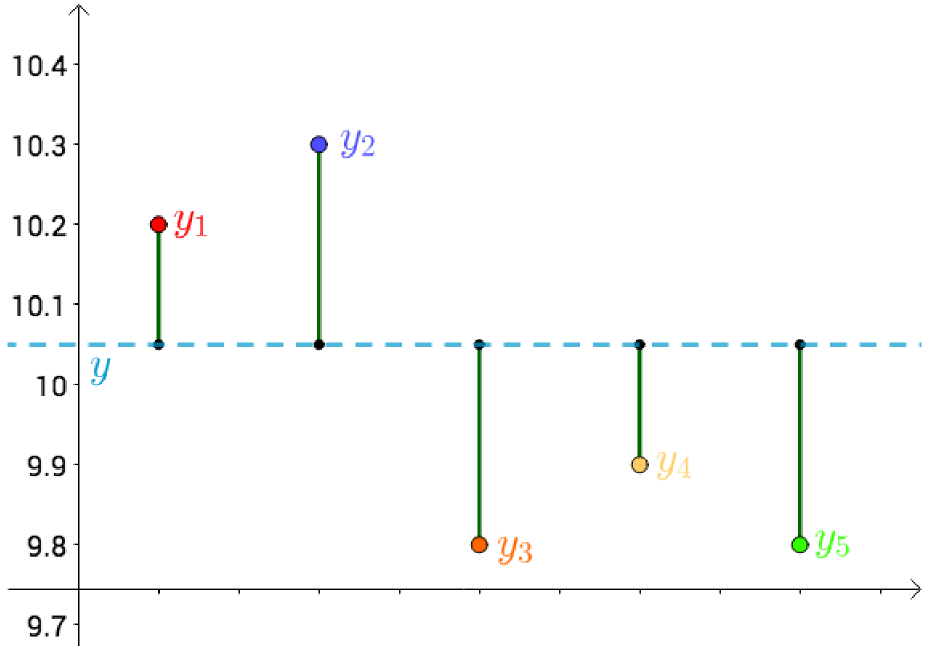
首先，把测试得到的值画在笛卡尔坐标系中，分别记作y_i：



其次，把要猜测的线段长度的真实值用平行于横轴的直线来表示（因为是猜测的，所以用虚线来画），记作y:



每个点都向y做垂线，垂线的长度就是$|y-y_i|$，也可以理解为测量值和真实值之间的误差：



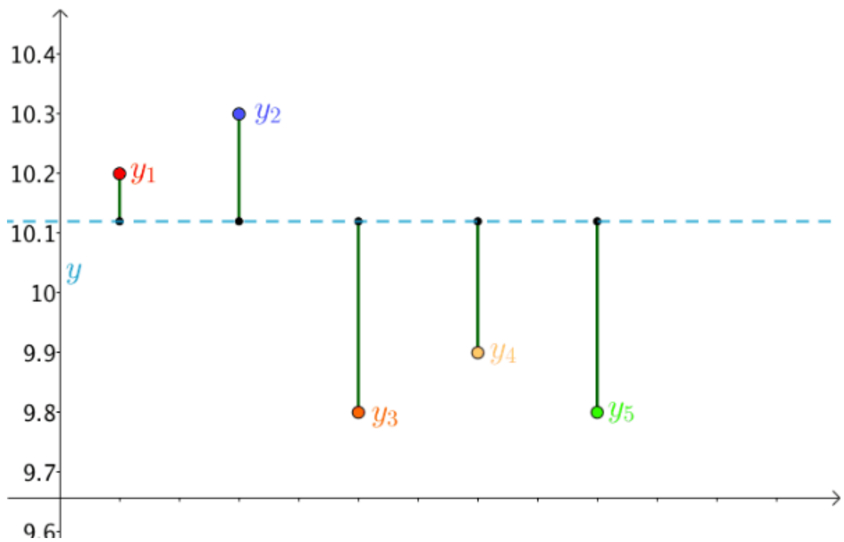
因为误差是长度，还要取绝对值，计算起来麻烦，就干脆用平方来代表误差：

$$|y-y_i| \rightarrow (y-y_i)^2$$

总的误差的平方就是：

$$\epsilon=\sum(y-y_i)^2$$

因为y是猜测的，所以可以不断变换：



自然，总的误差ϵ也是在不断变化的。

法国数学家，阿德里安-馬里·勒讓德（1752－1833，这个头像有点抽象）提出让总的误差的平方最小的y就是真值，这是基于，如果误差是随机的，应该围绕真值上下波动。

这就是**最小二乘法**，即：

$$\epsilon=\sum(y-y_i)^2\text{最小}\implies\text{真值}y$$

这个猜想也蛮符合直觉的，来算一下。

这是一个二次函数，对其求导，导数为0的时候取得最小值：

$$\frac{d}{dy}\epsilon=\frac{d}{dy}\sum(y-y_i)^2=2\sum(y-y_i)$$

$$=2((y-y_1)+(y-y_2)+(y-y_3)+(y-y_4)+(y-y_5))=0$$

进而：

$$5y=y_1+y_2+y_3+y_4+y_5\implies y=\frac{y_1+y_2+y_3+y_4+y_5}{5}$$

正好是算术平均数。

原来算术平均数可以让误差最小啊，这下看来选用它显得讲道理了。

以下这种方法：

$$\epsilon=\sum(y-y_i)^2\text{最小}\implies\text{真值}y$$

就是最小二乘法，所谓“二乘”就是平方的意思，台湾直接翻译为最小平方法。

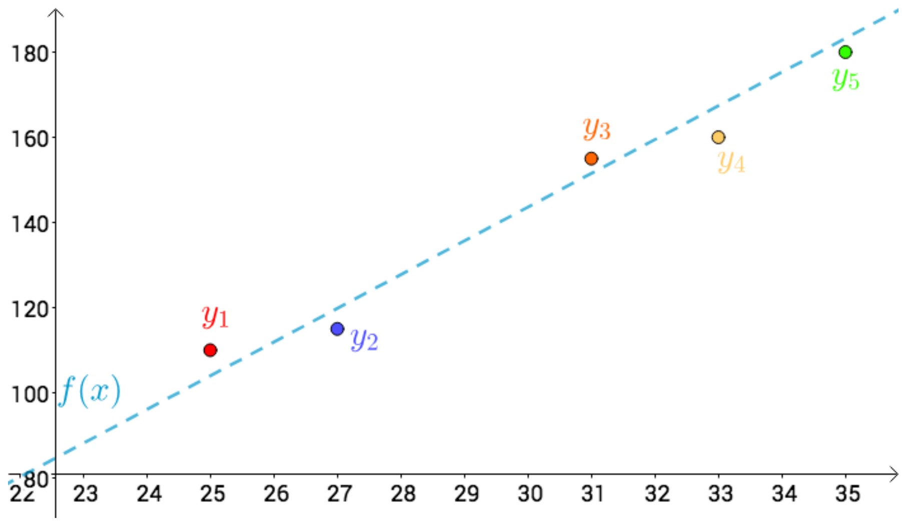
3 推广

算术平均数只是最小二乘法的特例，适用范围比较狭窄。而最小二乘法用途就广泛。

比如温度与冰淇淋的销量：

	销量
25°	110
27°	115
31°	155
33°	160
35°	180

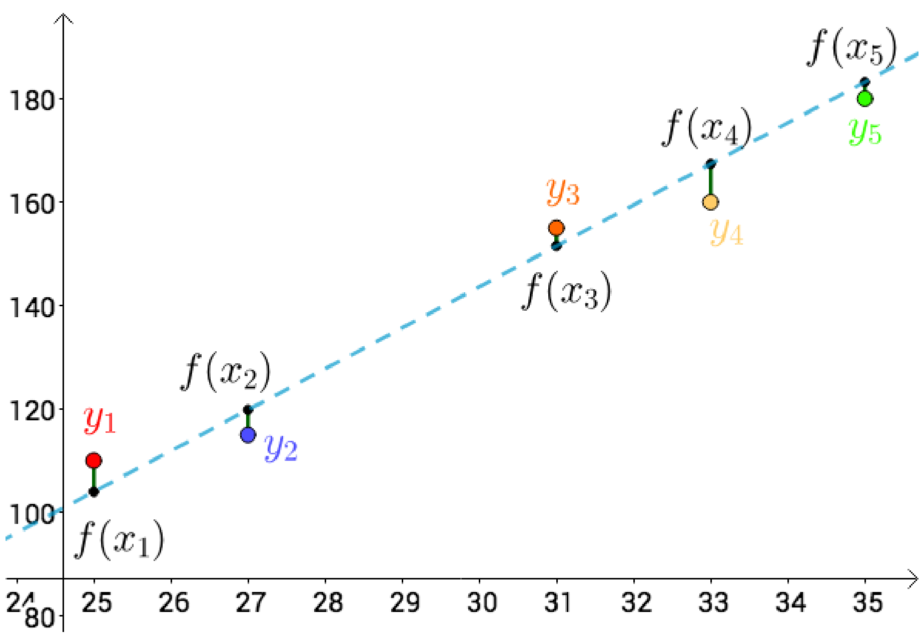
看上去像是某种线性关系：



可以假设这种线性关系为：

$$f(x) = ax + b$$

通过最小二乘法的思想：



上图的i, x, y分别为：

i	x	y
1	25	110
2	27	115
3	31	155
4	33	160
5	35	180

总误差的平方为：

$$\epsilon = \sum(f(x_i) - y_i)^2 = \sum(ax_i + b - y_i)^2$$

不同的a, b会导致不同的ϵ，根据多元微积分的知识，当：

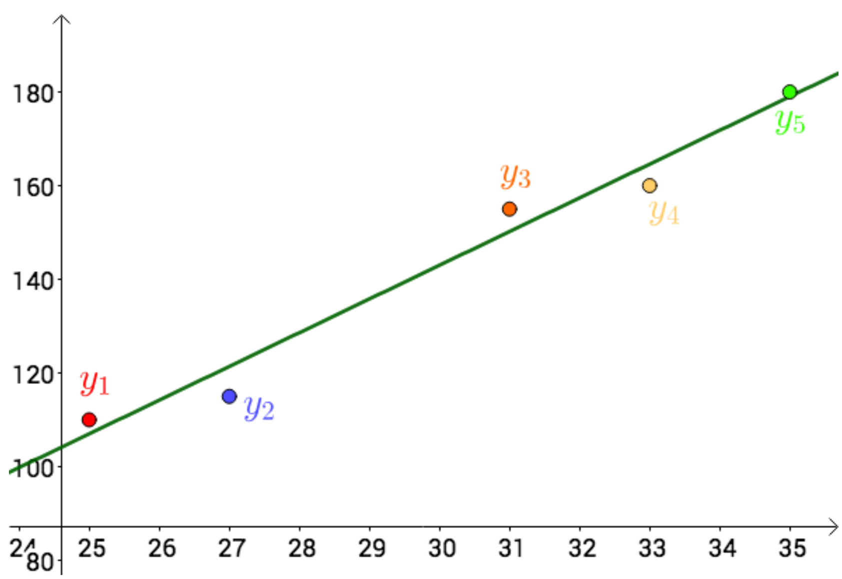
$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial a}\epsilon = 2\sum(ax_i + b - y_i)x_i = 0 \\ \frac{\partial}{\partial b}\epsilon = 2\sum(ax_i + b - y_i) = 0 \end{cases}$$

这个时候ϵ取最小值。

对于a, b而言，上述方程组为线性方程组，用之前的数据解出来：

$$\begin{cases} a \approx 7.2 \\ b \approx -73 \end{cases}$$

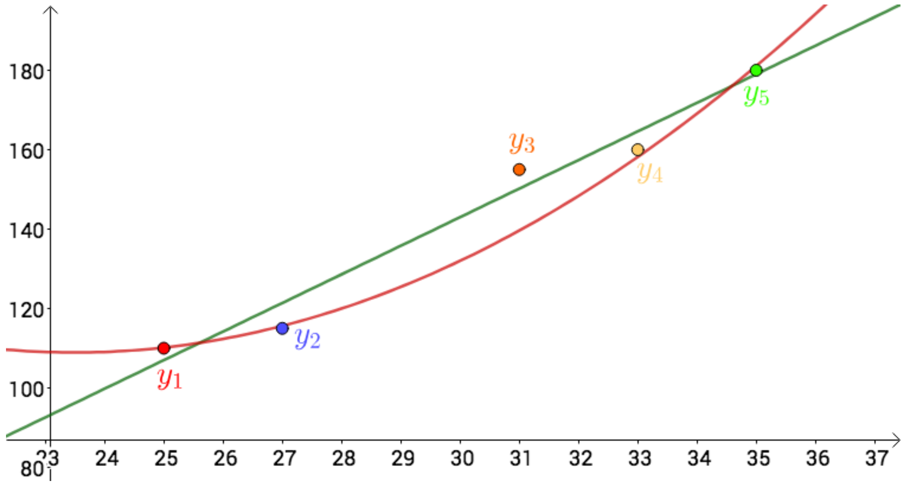
也就是这根直线：



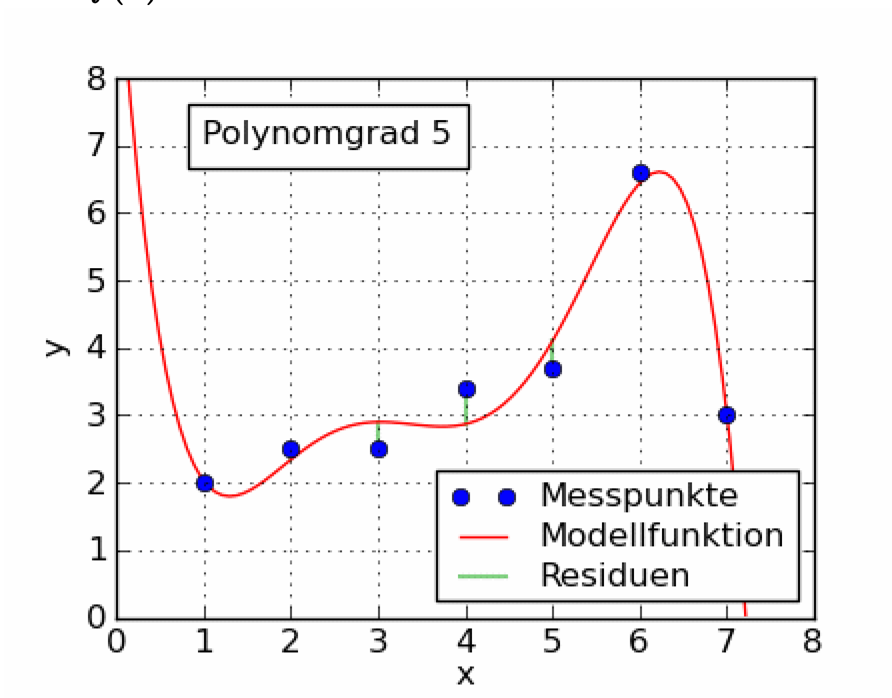
其实，还可以假设：

$f(x) = ax^2 + bx + c$

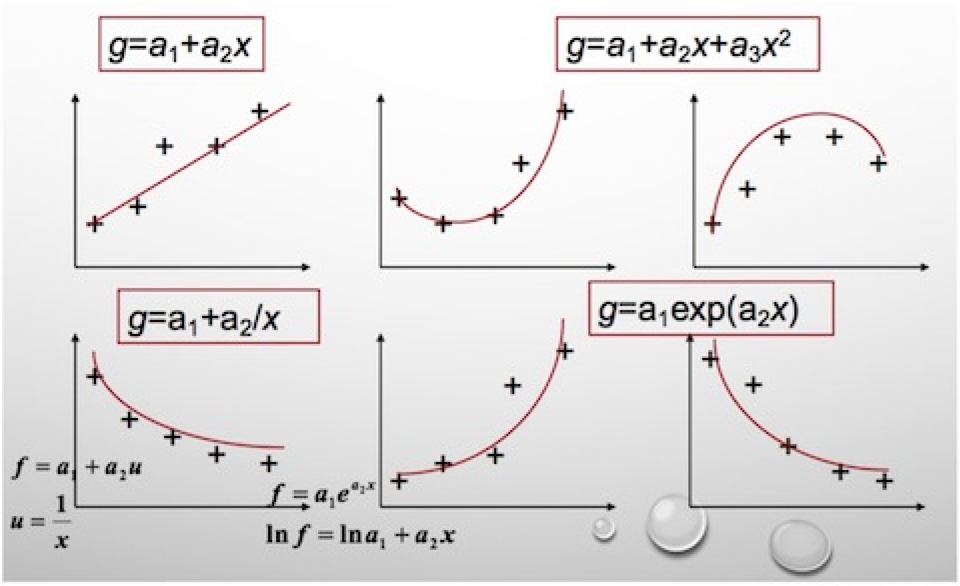
在这个假设下，可以根据最小二乘法，算出a, b, c，得到下面这根红色的二次曲线：



同一组数据，选择不同的$f(x)$，通过最小二乘法可以得到不一样的拟合曲线：



不同的数据，更可以选择不同的$f(x)$，通过最小二乘法可以得到不一样的拟合曲线：



$f(x)$也不能选择任意的函数，还是有一些讲究的，这里就不介绍了。

4 最小二乘法与正态分布

我们对勒让德的猜测，即最小二乘法，仍然抱有怀疑，万一这个猜测是错误的怎么办？

数学王子高斯（1777－1855）也像我们一样心存怀疑。

高斯换了一个思考框架，通过概率统计那一套来思考。

让我们回到最初测量线段长度的问题。高斯想，通过测量得到了这些值：

	长度
红	10.2
蓝	10.3
橙	9.8
黄	9.9
绿	9.8

每次的测量值x_i都和线段长度的真值x之间存在一个误差：

$$\epsilon_i = x - x_i$$

这些误差最终会形成一个概率分布，只是现在不知道误差的概率分布是什么。假设概率密度函数为：$p(\epsilon)$

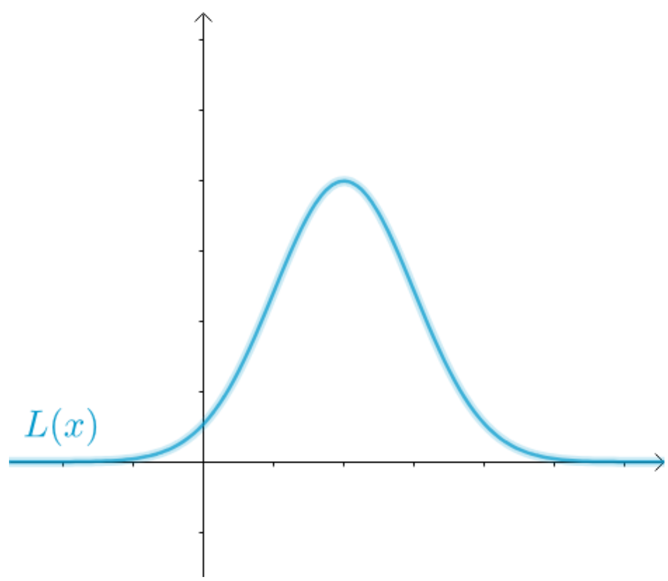
再假设一个联合概率密度函数，这样方便把所有的测量数据利用起来：

$$L(x) = p(\epsilon_1)p(\epsilon_2)\cdots p(\epsilon_5)$$

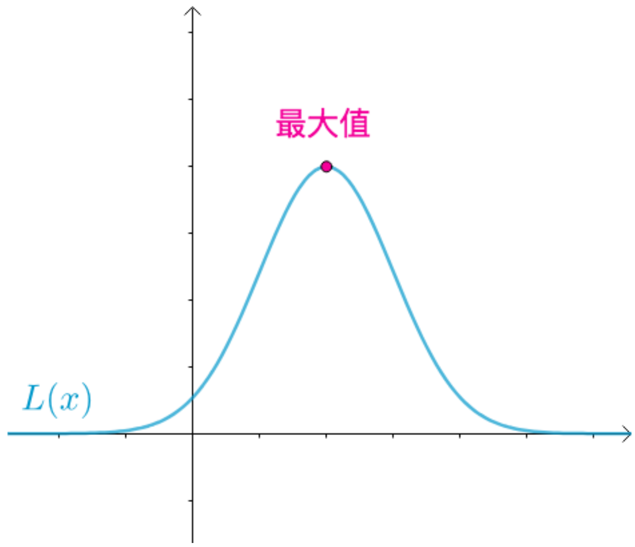
$$= p(x - x_i)p(x - x_2)\cdots p(x - x_5)$$

讲到这里，有些同学可能已经看出来了上面似然函数了

因为$L(x)$是关于x的函数，并且也是一个概率密度函数（下面分布图形是随便画的）：



根据极大似然估计的思想，概率最大的最应该出现（既然都出现了，而我又不是“天选之才”，那么自然不会是发生了小概率事件），也就是应该取到下面这点：



当下面这个式子成立时，取得最大值：

$$\frac{d}{dx}L(x)=0$$

然后高斯想，最小二乘法给出的答案是：

$$x=\overline{x}=\frac{x_1+x_2+x_3+x_4+x_5}{5}$$

如果最小二乘法是对的，那么$x=\overline{x}$时应该取得最大值，即：

$$\frac{d}{dx}L(x)|_{x=\overline{x}}=0$$

好，现在可以来解这个微分方程了。最终得到：

$$p(\epsilon)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2}}$$

这是什么？这就是正态分布啊。

并且这还是一个充要条件：

$$x=\overline{x}\iff p(\epsilon)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2}}$$

也就是说，如果误差的分布是正态分布，那么最小二乘法得到的就是最有可能的值。

那么误差的分布是正态分布吗？

我们相信，误差是由于随机的、无数的、独立的、多个因素造成的，比如之前提到的：

- 不同厂家的尺子的生产精度不同
- 尺子材质不同，热胀冷缩不一样
- 测量的时候心情起伏不定
- ……

那么根据中心极限定理，误差的分布就应该是正态分布。

因为高斯的努力，才真正奠定了最小二乘法的重要地位。