最小二乘法 [1]

leolinuxer

July 1, 2020

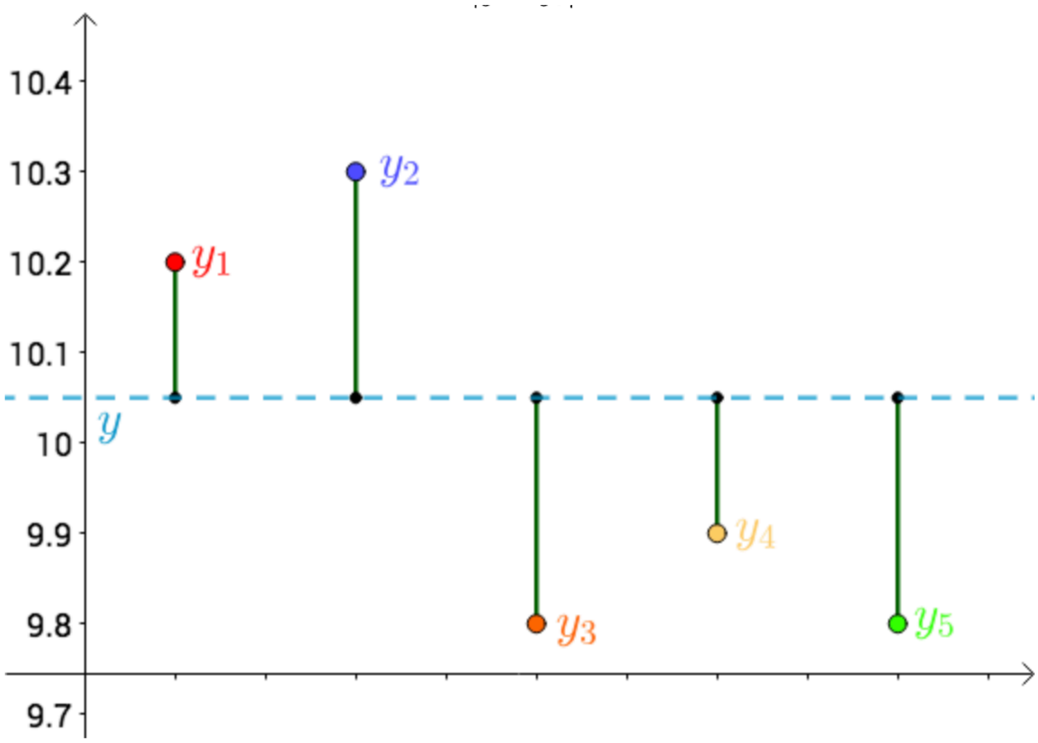
1 举例

有五把尺子测量同一个长度，得到的数据会有细微的差别，一般来说，我们都是使用**算数平均值**作为最终结果的；

可是，深入思考一下这个问题，为什么要用算数平均值呢？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；然后，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，如下图所示：



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：$|y-y_i| \to (y-y_i)^2$

总的误差的平方就是：

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

因为 y 是猜测的，所以可以虚线可以不断上下移动，得到不同的 ϵ。

法国数学家，阿德里安-馬里·勒讓德（1752 - 1833）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，即求使得：

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

最小时的真值 y。

这是一个二次函数，对其求导，导数为 0 的时候取得最小值：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy}\epsilon = \frac{d}{dy}\sum (y-y_i)^2 &= 2\sum (y-y_i) && (1) \\ &= 2((y-y_1)+(y-y_2)+(y-y_3)+(y-y_4)+(y-y_5)) = 0 && (2) \end{aligned}$$

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。

所以算术平均数可以让平方误差 $\epsilon = \sum (y-y_i)^2$ 最小。

3 推广

算术平均数只是最小二乘法的特例，可以进一步推广。假设有线性关系为：$f(x) = ax+b$ 通过最小二乘法的思想，定义总误差的平方为：

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

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。

其实，还可以假设：$f(x) = ax^2+bx+c$，同样可以通过最小二乘法可以得到不一样的拟合曲线。

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，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：

$$\begin{aligned} L(x) &= p(\epsilon_1)p(\epsilon_2)\cdots p(\epsilon_5) && (3) \\ & && (4) \\ &= p(x-x_i)p(x-x_2)\cdots p(x-x_5) && (5) \end{aligned}$$

因为 $L(x)$ 是关于 x 的函数，并且也是一个概率密度函数，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），那么有：

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

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。

对于最大似然法，最合理的参数估计量应该使得从模型中抽取该 n 组样本观测值的概率最大，也就是概率分布函数或者说是似然函数最大。显然，这是从不同原理出发的两种参数估计方法。因此最大似然法需要已知这个概率分布函数，一般假设其满足正态分布函数的特性，在这种情况下，最大似然估计和最小二乘估计是等价的，也就是说估计结果是相同的，但是原理和出发点完全不同。

References

[1] “如何理解最小二乘法？.” [Online]. Available: https://www.matongxue.com/madocs/818/