多元线性回归

模型说明

在线性回归中，如果存在多个自变量时，我们称该线性回归为**多元线性回归。**

上节课中，我们学习了简单线性回归，并且使用房屋面积（X）来拟合房屋价格（y）。然而，现实中的数据通常是比较复杂的，自变量也很可能不只一个。例如，影响房屋价格不只房屋面积一个因素，可能还有距地铁距离，距市中心距离，房间数量，房屋所在层数，房屋建筑年代等诸多因素。不过，这些因素，对房屋价格影响的力度（权重）是不同的，例如，房屋所在层数对房屋价格的影响就远不及房屋面积，因此，我们可以为每个特征指定一个不同的权重。

$$\hat{y} = w_0 + w_1 * x_1 + w_2 * x_2 + w_3 * x_3 + \cdots + w_n * x_n$$

- x_i：第i个输入特征。
- w_i：第i个特征的权重（影响力度）。
- n：特征的个数。
- $\hat{y}$：预测值（房屋价格）。

向量表示

我们也可以使用向量的表示方式，设$\vec{x}$与$\vec{w}$为两个向量：

$$\vec{w} = (w_1, w_2, w_3, \ldots, w_n)^T \\ \vec{x} = (x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n)^T$$

则回归方程可表示为：

$$\hat{y} = \sum_{j=1}^{n}(w_j * x_j) + w_0 \\ = \vec{w}^T \cdot \vec{x} + w_0$$

我们可以进一步简化，为向量$\vec{w}$与$\vec{x}$各加入一个分量w_0与x_0，并且令：

$$x_0 \equiv 1$$

于是，向量$\vec{w}$与$\vec{x}$就会变成：

$$\vec{w} = (w_0, w_1, w_2, w_3, \ldots, w_n)^T \\ \vec{x} = (x_0, x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n)^T$$

这样，就可以表示为：

$$\hat{y} = w_0 * x_0 + w_1 * x_1 + w_2 * x_2 + w_3 * x_3 + \cdots + w_n * x_n \\ = \sum_{j=0}^{n}(w_j * x_j) \\ = \vec{w}^T \cdot \vec{x}$$

课堂练习

设$\vec{w}=(w_1,w_2,w_3,\ldots,w_n)^T$，则$\sum_{i=1}^{n}w_i^2$如果用向量表示，等价于（ ）。
A $\vec{w}\cdot\vec{w}$
B $\vec{w}^T\cdot\vec{w}$
C $\vec{w}^T\cdot\vec{w}^T$
D $\vec{w}\cdot\vec{w}^T$

参数估计

误差与分布

接下来，我们来看一下线性回归模型中的误差。正如我们之前所提及的，线性回归中的自变量与因变量，是存在线性关系的。然而，这种关系并不是严格的函数映射关系，但是，我们构建的模型（方程）却是严格的函数映射关系，因此，对于每个样本来说，我们拟合的结果会与真实值之间存在一定的误差，我们可以将误差表示为：

$$\hat{y}^{(i)}=\vec{w}^T\cdot\vec{x}^{(i)}$$
$$y^{(i)}=\hat{y}^{(i)}+\varepsilon^{(i)}$$

- $\varepsilon^{(i)}$：第i个样本真实值与预测值之间的误差（残差）。

对于线性回归而言，具有一个前提假设：误差ε服从均值为0，方差为σ^2的正态分布。因此，根据正态分布的概率密度函数：

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$$

则误差ε的分布为：

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

因此，对于每一个样本的误差$\varepsilon^{(i)}$，其概率值为：

$$p(\varepsilon^{(i)};w)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}exp(-\frac{(\varepsilon^{(i)})^2}{2\sigma^2})$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}exp(-\frac{(y^{(i)}-\vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2}{2\sigma^2})$$

小结

极大似然估计

极大似然估计（最大似然估计），是根据试验结果来估计未知参数的一种方式。其原则为：已经出现的，就是最有可能出现的，也就是令试验结果的概率值最大，来求解此时的未知参数值。

根据该原则，我们让所有误差出现的联合概率最大，则此时参数w的值，就是我们要求解的值，我们构建似然函数：

$$L(w) = \prod_{i=1}^{m} p(\varepsilon^{(i)}; w)$$
$$= \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp(-\frac{(y^{(i)} - \vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2}{2\sigma^2})$$

- m：样本的数量。

对数似然函数

不过，累计乘积的方式不利于求解，我们这里使用对数似然函数，即在似然函数上取对数操作，这样就可以将累计乘积转换为累计求和的形式。

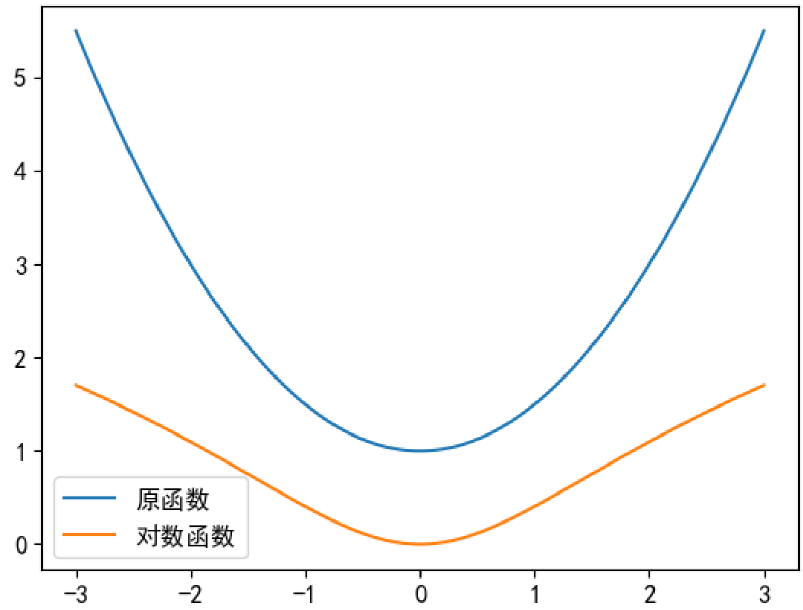
$$ln(L(w)) = ln\prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp(-\frac{(y^{(i)} - \vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2}{2\sigma^2})$$
$$= \sum_{i=1}^{m} ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp(-\frac{(y^{(i)} - \vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2}{2\sigma^2})$$
$$= m * ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{1}{\sigma^2} * \frac{1}{2} * \sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2$$

- 我们原本的目的，是要求得令似然函数$L(w)$最大时，参数w的值。
- 然而，我们对似然函数$L(w)$取对数，得到对数似然函数$ln(L(w))$，这样，就会将原似然函数$L(w)$改变。
- 那这样一来，在对数似然函数$ln(L(w))$取得极大值时，计算得出的w会与原似然函数$L(w)$取得极大值，计算的w相同吗？

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rcParams["font.family"] = "SimHei"
plt.rcParams["axes.unicode_minus"] = False
plt.rcParams["font.size"] = 12

x = np.linspace(-3, 3, 200)
# 原函数。
y = 0.5 * x ** 2 + 1
# 对数函数。
lny = np.log(y)
plt.plot(x, y, label="原函数")
plt.plot(x, lny, label="对数函数")
plt.legend()
```

```
<matplotlib.legend.Legend at 0x28b63dfd7e0>
```



损失函数

上式中，前半部分都是常数，我们的目的是为了让对数似然函数值最大，故我们只需要让后半部分的值最小即可，因此，后半部分，就可以作为线性回归的损失函数。该函数是二次函数，具有唯一极小值。

$$J(w) = \frac{1}{2} * \sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \vec{w}^T\vec{x}^{(i)})^2 \qquad (1)$$

损失函数向量化表示

在上面的损失函数中，我们是使用标量的方式来表示的。这不方便在实际应用中计算，我们可以采用矩阵与向量的方式来表示。

$$\vec{y} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \dots \\ y^{(m)} \end{bmatrix}$$

$$\vec{\hat{y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}^{(1)} \\ \hat{y}^{(2)} \\ \dots \\ \hat{y}^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{w}^T\vec{x}^{(1)} \\ \vec{w}^T\vec{x}^{(2)} \\ \dots \\ \vec{w}^T\vec{x}^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_0x_0^{(1)} + w_1x_1^{(1)} + w_2x_2^{(1)} + \dots + w_nx_n^{(1)} \\ w_0x_0^{(2)} + w_1x_1^{(2)} + w_2x_2^{(2)} + \dots + w_nx_n^{(2)} \\ \dots \\ w_0x_0^{(m)} + w_1x_1^{(m)} + w_2x_2^{(m)} + \dots + w_nx_n^{(m)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_0^{(1)}, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)} \\ x_0^{(2)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots, x_n^{(2)} \\ \dots \\ x_0^{(m)}, x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_n^{(m)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \dots \\ w_n \end{bmatrix} = X \cdot \vec{w} \qquad \Rightarrow$$

$$\vec{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon^{(1)} \\ \varepsilon^{(2)} \\ \dots \\ \varepsilon^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y^{(1)} - \hat{y}^{(1)} \\ y^{(2)} - \hat{y}^{(2)} \\ \dots \\ y^{(m)} - \hat{y}^{(m)} \end{bmatrix} = \vec{y} - \vec{\hat{y}} = \vec{y} - X \cdot \vec{w} \qquad \Rightarrow$$
$$\sum_{i=1}^{m} (\varepsilon^{(i)})^2 = \vec{\varepsilon}^T \cdot \vec{\varepsilon} = (\vec{y} - X\vec{w})^T (\vec{y} - X\vec{w}) \qquad （2）$$

将（2）带入（1）：

$$J(w) = \frac{1}{2} * \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \vec{w}^T \vec{x}^{(i)})^2$$
$$= \frac{1}{2} * (\vec{y} - X\vec{w})^T (\vec{y} - X\vec{w})$$

损失函数求导

我们要求该损失函数的最小值，只需要对向量$\vec{w}$进行求导，令导数为0，此时$\vec{w}$的值，就是最佳解。

$$\frac{\partial J(w)}{\partial \vec{w}} = \frac{\partial}{\partial \vec{w}} (\frac{1}{2} (\vec{y} - X\vec{w})^T (\vec{y} - X\vec{w}))$$
$$= \frac{\partial}{\partial \vec{w}} (\frac{1}{2} (\vec{y}^T - \vec{w}^T X^T)(\vec{y} - X\vec{w}))$$
$$= \frac{\partial}{\partial \vec{w}} (\frac{1}{2} (\vec{y}^T \vec{y} - \vec{y}^T X\vec{w} - \vec{w}^T X^T \vec{y} + \vec{w}^T X^T X\vec{w}))$$

损失函数化简

根据矩阵与向量的求导公式，有:

$$\frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}} = A^T \qquad \frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}^T} = A \qquad \frac{\partial (\vec{x}^T A)}{\partial \vec{x}} = A$$
$$\frac{\partial (\vec{x}^T A\vec{x})}{\partial \vec{x}} = (A^T + A)\vec{x}$$

特别的，如果$A = A^T$（A为对称矩阵），则:

$$\frac{\partial (\vec{x}^T A\vec{x})}{\partial \vec{x}} = 2A\vec{x}$$

因此:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{w}} (\frac{1}{2} (\vec{y}^T \vec{y} - \vec{y}^T X\vec{w} - \vec{w}^T X^T \vec{y} + \vec{w}^T X^T X\vec{w}))$$
$$= \frac{1}{2} (-(\vec{y}^T X)^T - X^T \vec{y} + 2X^T X\vec{w})$$
$$= X^T X\vec{w} - X^T \vec{y}$$

令导函数的值为0，则:

$$\vec{w} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}$$

- 矩阵$X^T X$必须是可逆的。

```python
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.model_selection import train_test_split

data = pd.read_csv("Advertising.csv", usecols=["TV","Radio","Newspaper","Sales"], header=0)
data.head()
```

```css
.dataframe tbody tr th {
    vertical-align: top;
}

.dataframe thead th {
    text-align: right;
}
```

	TV	Radio	Newspaper	Sales
0	230.1	37.8	69.2	22.1
1	44.5	39.3	45.1	10.4
2	17.2	45.9	69.3	9.3
3	151.5	41.3	58.5	18.5
4	180.8	10.8	58.4	12.9

```python
X, y = data[["TV", "Radio", "Newspaper"]], data["Sales"]
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3, random_state=0)
lr = LinearRegression()
lr.fit(X_train, y_train)
print(lr.coef_)
print(lr.intercept_)
y_hat = lr.predict(X_test)
print(y_hat[:5])
print(y_test[:5])
```

```
[0.04391531 0.20027962 0.00184368]
2.880255286331325
[10.05866652  7.43318827  6.95305695 24.16874598 11.98172029]
18      11.3
170      8.4
107      8.7
98      25.4
177     11.7
Name: Sales, dtype: float64
```

```python
# 自力更生。
X = X_train.values
y = y_train.values
one = np.ones(shape=(len(X), 1))
X = np.concatenate([one, X], axis=1)
# np.linalg.inv求矩阵的逆。
w = np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(y)
print(w)
```

```
[2.88025529e+00 4.39153137e-02 2.00279617e-01 1.84368178e-03]
```

三维可视化

多元线性回归在空间中，可以表示为一个超平面，去拟合空间中的数据点。这里，为了可视化方便，我们仅选取NOX与RM两个特征（自变量）进行拟合。

```python
# 提取前两个特征。
X_partial = X[["TV", "Radio"]].values
lr2 = LinearRegression()
lr2.fit(X_partial, y)
```

```python
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
# 图形显示方式，默认为嵌入显示。
# %matplotlib inline
# 弹出框显示。
%matplotlib qt

# 分别提取两个特征的最小值与最大值。
max1, max2 = np.max(X_partial, axis=0)
min1, min2 = np.min(X_partial, axis=0)
# 在区间取值区间内，均匀选取若干个点。
x1 = np.linspace(min1, max1, 30)
x2 = np.linspace(min2, max2, 30)
# 生成网状结果，用来绘制三维立体图。
# 参数x1与x2是一维数组（向量），将x1沿着行进行扩展，扩展的行数与x2元素的个数相同。
# 将x2沿着列进行扩展，扩展的列数与x1元素的个数相同。返回x1与x2扩展之后的数据X1与X2（扩展之后
# 的数组是二维的）。
# 这样扩展的目的是，依次对位获取X1与X2（扩展之后的数组）中的每个元素，
# 就能够构成x1与x2（扩展之前的数组）的任意组合。
X1, X2 = np.meshgrid(x1, x2)
# 返回figure对象。figure对象是我们绘图的底层对象，相当于画布。
fig = plt.figure()
# Axes3D在figure对象上进行绘制。
ax = Axes3D(fig)
fig.add_axes(ax)
# 绘制真实的样本散点图。
ax.scatter(X_partial[:, 0], X_partial[:, 1], y, color="b")
ax.set_xlabel("TV投放额度")
ax.set_ylabel("Radio投放额度")
ax.set_zlabel("销售额")
# 绘制预测的平面。
# rstride：行上的增量。增量越大，网格越宽。
# cstride：列上的增量。
# cmap：颜色图。
# alpha：透明度。1 完全不透明，0完全透明。
surf = ax.plot_surface(X1, X2, lr2.predict(np.array([X1.ravel(), X2.ravel()]).T).reshape(X1.shape),
        rstride=5, cstride=5, cmap="rainbow", alpha=0.5)
# 显示颜色条。
fig.colorbar(surf)
plt.show()
```

回归模型评估

当我们建立好模型后，模型的效果如何呢？对于回归模型，我们可以采用如下的指标来进行衡量。

- MSE
- RMSE
- MAE
- R^2

MSE

MSE（Mean Squared Error），平均平方误差，为所有样本数据误差（真实值与预测值之差）的平方和，然后取均值。

$$MSE = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$

RMSE

RMSE（Root Mean Squared Error），平均平方误差的平方根，即在MSE的基础上，取平方根。

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2}$$

MAE

MAE（Mean Absolute Error），平均绝对值误差，为所有样本数据误差的绝对值和。

$$MAE = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left|y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right|$$

R^2

R^2为决定系数，用来表示模型拟合性的分值，值越高表示模型拟合性越好，在训练集中，R^2的取值范围为$[0,1]$。在测试集（未知数据）中，R^2的取值范围为$(-\infty,1]$。
R^2的计算公式为1减去RSS与TSS的商。其中，TSS（Total Sum of Squares）为所有样本数据与均值的差异，是方差的m倍。而RSS（Residual sum of squares）为所有样本数据误差的平方和，是MSE的m倍。

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2}{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \bar{y})^2}$$

$$\bar{y} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}y^{(i)}$$

从公式定义可知，最理想情况，所有的样本数据的预测值与真实值相同，即RSS为0，此时R^2为1。

```python
# MSE，MAE，R^2函数。
from sklearn.metrics import mean_squared_error, mean_absolute_error, r2_score

print("均方误差(MSE)：", mean_squared_error(y_test, y_hat))
print("根均方误差(RMSE)：", np.sqrt(mean_squared_error(y_test, y_hat)))
print("平均绝对值误差(MAE)：", mean_absolute_error(y_test, y_hat))
print("训练集R^2：", r2_score(y_train, lr.predict(X_train)))
print("测试集R^2：", r2_score(y_test, y_hat))
# socre其实求解的就是r^2的值。但是注意，r2_score方法与score方法传递参数的内容是不同的。
print("训练集R^2：", lr.score(X_train, y_train))
print("测试集R^2：", lr.score(X_test, y_test))
```

模型持久化

当我们训练好模型后，就可以使用模型进行预测。然而，这毕竟不像打印一个Hello World那样简单，当我们需要的时候，重新运行一次就可以了。在实际生产环境中，数据集可能非常庞大，如果在我们每次需要使用该模型时，都去重新运行程序去训练模型，势必会耗费大量的时间。

为了方便以后能够复用，我们可以将模型保存，在需要的时候，直接加载之前保存的模型，就可以直接进行预测。其实，保存模型，就是保存模型的参数（结构），在载入模型的时候，将参数（结构）恢复成模型保存时的参数（结构）而已。

保存模型

注意：保存模型时，保存位置的目录必须事先存在，否则会出现错误。

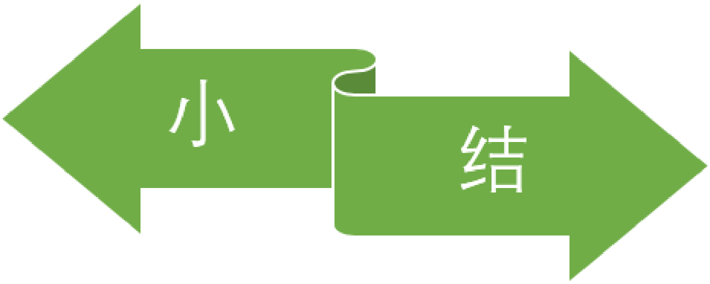
```python
# 糖尿病数据集。
from sklearn.datasets import load_diabetes
import joblib

# return_X_y：返回X与y，而不是返回数据对象。
X, y = load_diabetes(return_X_y=True)
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.25, random_state=0)
lr = LinearRegression()
lr.fit(X_train, y_train)
print(lr.coef_, lr.intercept_)
# 对模型进行保存。(模型保存的目录必须事先存在，否则会产生错误。)
joblib.dump(lr, "lr.model")
```

载入模型

我们可以载入之前保存的模型，进行预测。

```python
# 恢复保存的模型。
model = joblib.load("lr.model")
print(type(model))
print(model.coef_, model.intercept_)
y_hat = model.predict(X_test)
print(y_hat[:10])
```



练习

- 参考sklearn中的LinearRegression，自己编写一个简单的线性回归类，能够实现多元线性回归。要求如下：
    - 具有fit方法，训练模型。
    - 具有predict方法，预测未知数据。
    - 具有coef_属性，返回所有权重（不包括偏置w_0）。
    - 具有intercept_属性，返回偏置b（w_0）。
    - 不允许借助于sklearn中的LinearRegression类。