

Python数据分析与机器学习

多元线性回归算法

讲师:邹义良



1. 理解多元线性回归算法

一元线性回归



某汽车经销商集团

广告投入	10	20	30	40	50
汽车销量	150	220	225	300	330

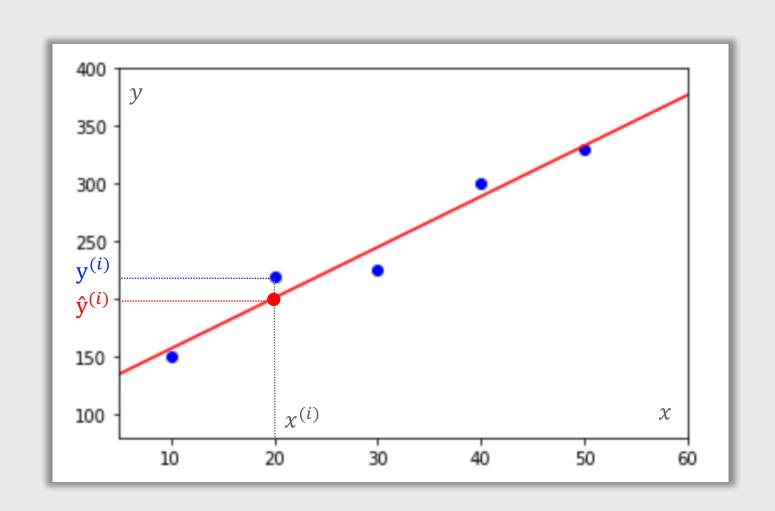


某汽车经销商集团

广告投入	汽车品牌	4S店位置	人均消费水平	汽车销量
10	1	1	2.4	150
20	1	2	1.9	220
10	2	1	1.3	190
30	2	3	2.1	250
20	3	1	1.1	280
10	2	1	1.3	190
30	2	3	2.1	250

一元线性回归

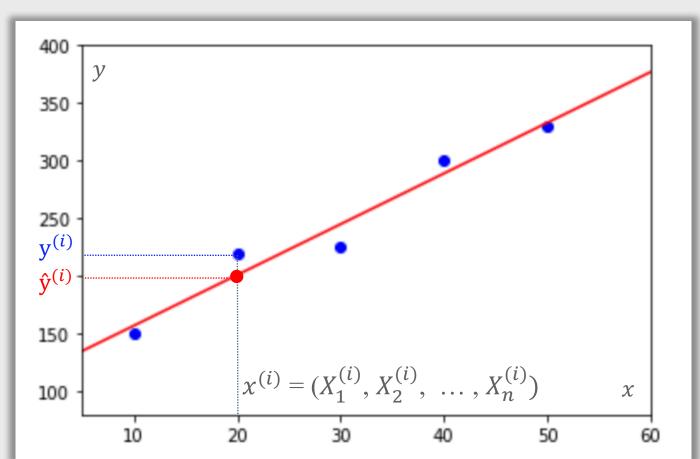




$$y = ax + b$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = a\mathbf{x}^{(i)} + b$$





$$y = ax + b$$

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + ... + \theta_n x_n$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(i)} + \theta_2 x_2^{(i)} + \dots + \theta_n x_n^{(i)}$$



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

$$--\hat{y}^{(i)} = ax^{(i)} + b$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = \theta_0 + \theta_1 X_1^{(i)} + \theta_2 X_2^{(i)} + \dots + \theta_n X_n^{(i)}$$



$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = \theta_0 + \theta_1 X_1^{(i)} + \theta_2 X_2^{(i)} + \dots + \theta_n X_n^{(i)}$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = \theta_0 X_0^{(i)} + \theta_1 X_1^{(i)} + \theta_2 X_2^{(i)} + \dots + \theta_n X_n^{(i)} , \ X_0^{(i)} \equiv 1$$

$$X^{(i)} = (X_0^{(i)}, X_1^{(i)}, X_2^{(i)}, \dots, X_n^{(i)})$$

$$\theta = (\theta_0, \ \theta_1, \ \theta_2, \ \dots, \theta_n)^T$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = X^{(i)} \cdot \boldsymbol{\theta}$$



$$X = \begin{bmatrix} 1 & X_1^{(1)} & X_2^{(1)} & \cdots & X_n^{(1)} \\ 1 & X_1^{(2)} & X_2^{(2)} & \cdots & X_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_1^{(m)} & X_2^{(m)} & \cdots & X_n^{(m)} \end{bmatrix}$$

$$\theta = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_n \end{bmatrix}$$

$$\hat{y} = X \cdot \theta$$



使
$$\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$
 尽可能小

$$(y-\hat{y})^T (y-\hat{y})$$

$$\hat{y} = X \cdot \theta$$

$$(y - X \cdot \theta)^T (y - X \cdot \theta)$$



$$Q = (y - X \cdot \theta)^T (y - X \cdot \theta)$$

估计 θ , 使 Q 尽可能小

正规方程解:

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



$$\mathbf{E} \qquad \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} = \begin{pmatrix}
1 & 1 & \cdots & 1 \\
x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
x_{1p} & x_{2p} & \cdots & x_{np}
\end{pmatrix} \begin{pmatrix}
1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\
1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np}
\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}
n & \sum_{i=1}^{*} x_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{*} x_{ip} \\
\sum_{i=1}^{*} x_{i1} & \sum_{i=1}^{*} x_{i1}^{2} & \cdots & \sum_{i=1}^{*} x_{i1} x_{ip} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
\sum_{i=1}^{*} x_{ip} & \sum_{i=1}^{*} x_{ip} x_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{*} x_{ip}^{2}
\end{pmatrix},$$

$$\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{1p} & x_{2p} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ y_2 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_{ii} y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_{ip} y_i \end{bmatrix}.$$

于是(4.5)式即可写成

$$\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X}\mathbf{B} = \mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y},\tag{4.5}$$

这就是正规方程组的矩阵形式,在(4.5)'式两边左乘 X^TX 的逆矩阵(X^TX) $^{-1}$ (设(X^TX) $^{-1}$ 存在)得到(4.5)'的解

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \begin{pmatrix} \hat{b}_0 \\ \hat{b}_1 \\ \vdots \\ \hat{b}_k \end{pmatrix} = (\boldsymbol{X}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{Y}, \tag{4.6}$$

这就是我们需要求的 $(b_0,b_1,\cdots,b_p)^{\mathsf{T}}$ 的最大似然估计. 我们取

$$\hat{b}_0 + \hat{b}_1 x_1 + \dots + \hat{b}_p x_p \frac{i \partial k}{\hat{y}}$$
作为 $\mu(x_1, x_2, \dots, x_p) = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_p x_p$ 的估计. 方程
$$\hat{y} = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 x_1 + \dots + \hat{b}_p x_p$$
(4.7)

称为 p 元经验线性回归方程, 简称回归方程.

例 下面给出了某种产品每件平均单价 Y(元) 与批量 x(件) 之间的关系的一组数据



