

# 拟合优度与模型选择

司继春

2026年3月



# 拟合优度

- 拟合优度 (goodness of fit) 即使用 $x$ 对 $y$ 进行拟合的效果, 即被解释变量 $y$ 有多少可以被解释变量 $x$ 所解释。
- 在回归分析中, 最常用的拟合优度的度量为可决系数 (coefficient of determination), 或称 $R^2$  (R-squared)。



## 拟合优度的度量

- 在拟合或者预测的应用中，我们经常会关注 $x$ 对 $y$ 的解释能力问题。特别的，我们关注 $y$ 的方差中有多少是可以被 $x$ 解释的。
- 从总体的层面，回忆公式

$$\mathbb{V}(y) = \mathbb{V}[\mathbb{E}(y|x)] + \mathbb{E}[\mathbb{V}(y|x)]$$

其中：

- $\mathbb{E}(y|x)$ 为 $y$ 的方差中可以被 $x$ 所预测的部分
- 而 $\mathbb{V}(y|x) = \mathbb{V}(u|x)$ 为 $y$ 中不可被 $x$ 预测的部分的条件方差
- 因而 $y$ 的总方差就被分解为可预测部分的方差与不可预测部分的方差，那么

$$\frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(y|x)]}{\mathbb{V}(y)} = 1 - \frac{\mathbb{E}[\mathbb{V}(y|x)]}{\mathbb{V}(y)}$$

就可以被解释为 $y$ 的方差中有多少比例是可以被 $x$ 所预测的。

# 总平方和的分解

- 从样本角度也可以类似分解
- 记 $y$ 的方差的分子为总平方和 (total sum of squares) :

$$\text{TSS} = \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 = Y' M_0 Y$$

其中 $M_0 = I - \frac{1}{N} \mathbf{1}\mathbf{1}'$ 。

- 分解 (过程见讲义) :

$$\text{TSS} = \text{ESS} + \text{RSS}$$

其中:

$$\text{ESS} = \hat{Y}' M_0 \hat{Y} = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2 = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

$$\text{RSS} = \hat{e}' \hat{e} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$$

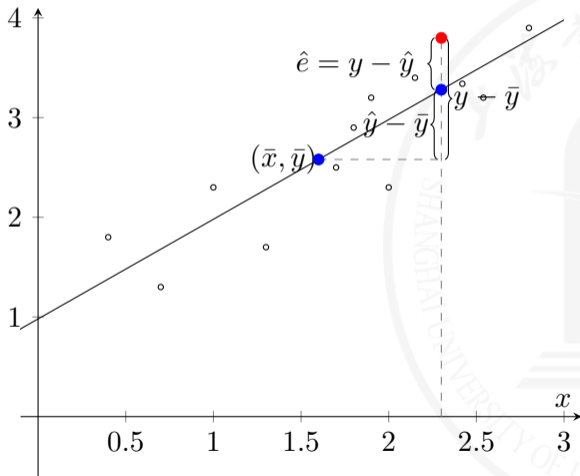
# 总平方和的分解

$$ESS = \hat{Y}' M_0 \hat{Y} = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2 = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

$$RSS = \hat{e}' \hat{e} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- 回归平方和 (explained sum of squares) :  $x$ 可以解释的部分
- 残差平方和 (residual sum of squares) :  $x$ 不能解释的部分

# 总平方和的分解



# $R^2$ 的定义

定义:

$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS}$$

$R^2$ 度量了使用 $x$ 对 $y$ 进行预测时,  $x$ 可以解释多少部分的 $y$ 的方差。 $R^2$ 一定是在 $[0, 1]$ 之间的。

- 当 $R^2 = 0$ 时, 对应于 $RSS = TSS$ , 此时 $\hat{y}_i = \bar{y}$ , 也就是说不管有没有 $x$ , 对 $y$ 的最优预测都是 $\bar{y}$ , 意味着 $x$ 对 $y$ 完全没有任何解释能力。
- 而如果 $R^2 = 1$ , 此时 $ESS = TSS$ , 即 $\hat{y}_i = y_i$ , 达到了完美拟合。

## $R^2$ 的取值范围

- TSS完全可以看作是只包含常数项的RSS
- 如果回归中包含常数项，那么预测结果不可能比只有常数项更差，从而必然会有 $RSS < TSS$ 。
- 但是，如果回归中不包含常数项，得到的预测可能效果会非常差（比只用常数项预测的结果还差），从而可能会出现 $TSS < RSS$ 的情况，从而得到 $R^2 < 0$ 。
- 所以， $R^2 \in [0, 1]$ 的前提条件是回归中包含常数项！

## 变量增加时的 $R^2$

- 如果我们在回归中添加新的解释变量，由于出现了更多的信息，因而 $R^2$ 值不会降低。
- 们假设 $x_1$ 是一个 $N \times 1$ 维列向量，而 $X_2$ 为 $N \times K$ 维其他解释变量，线性回归：

$$Y = \beta_1 x_1 + X_2 \beta_2 + e$$

的最小二乘估计分别为 $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$ 。

- 令残差： $\hat{e} = Y - \hat{\beta}_1 x_1 - X_2 \hat{\beta}_2$ ，那么拟合优度

$$R^2 = 1 - \frac{\hat{e}'\hat{e}}{\text{TSS}}$$

## 变量增加时的 $R^2$

- 如果只对 $X_2$ 做回归, 即:

$$Y = X_2\gamma + \epsilon$$

记其最小二乘估计为 $\hat{\gamma}$ , 残差为 $\hat{\epsilon} = Y - X_2\hat{\gamma}$ , 那么其 $R^2$ 为:

$$R_2^2 = 1 - \frac{\hat{\epsilon}'\hat{\epsilon}}{\text{TSS}}$$

# 变量增加时的 $R^2$

## 定理

在上述回归模型中,  $R_2^2 \leq R^2$ 。

目标函数为:

$$\min_{\beta_1, \beta_2} (Y - \beta_1 x_1 + X_2 \beta_2)' (Y - \beta_1 x_1 + X_2 \beta_2)$$

而如果只对 $X_2$ 做回归, 目标函数为:

$$\min_{\gamma} (Y - X_2 \gamma)' (Y - X_2 \gamma)$$

相当于限制 $\beta_2 = \gamma, \beta_1 = 0$ , 从而必然有:  $\hat{e}'\hat{e} \leq \hat{e}'\hat{e}$

## 变量增加时的 $R^2$

### 定理

$R^2$ 和 $R_2^2$ 满足：

$$R^2 = R_2^2 + [\text{Corr}(\hat{\epsilon}, \hat{v})]^2 (1 - R_2^2)$$

其中 $\hat{\epsilon}$ 为回归 $x_1 = X_2\delta + v$ 的残差，即 $\hat{v} = x_1 - X_2\hat{\delta}$ 。

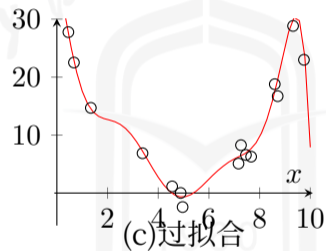
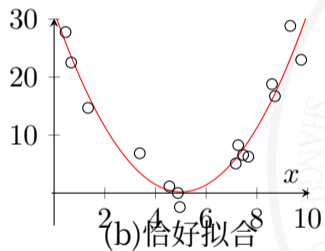
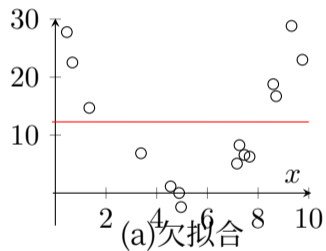
证明见讲义。其中 $\text{Corr}(\hat{\epsilon}, \hat{v})$ 度量了 $Y$ 和 $x_1$ 同时不能被 $X_2$ 解释的部分相关系数，即排除 $X_2$ 影响之后的相关系数，因而也被称为 $Y$ 和 $x_1$ 的偏相关系数（partial correlation）。

# 模型选择

从预测的角度，我们不仅仅需要对样本内进行预测并达到比较好的预测效果更希望当有新的样本进来时，也达到非常好的预测效果，机器学习模型对于新样本的预测能力一般称之为泛化（generalization）能力。通常有三种拟合情况：

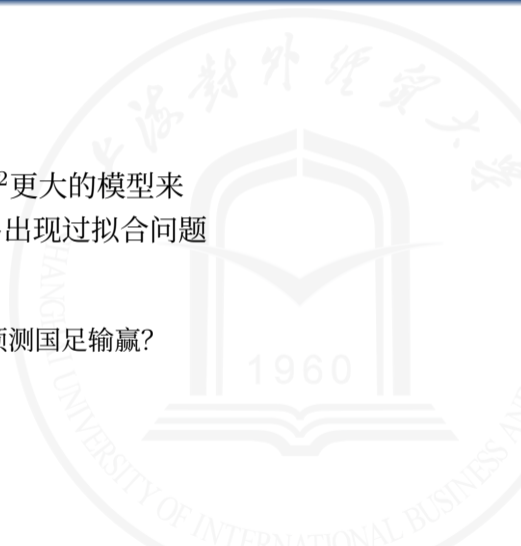
- 欠拟合（under-fitting）：没有发现数据中本来有的pattern
  - 通常起源于太“小”的模型
  - 比如本该是二次方关系，错误设定为线性关系
  - 即使在现有样本内都表现不好，更不要说样本外预测
- 过拟合（over-fitting）：发现了本来没根本有的pattern
  - 通常起源于太“大”的模型
  - 比如本来应该是二次方关系，但是使用了10阶多项式拟合
  - 样本内预测非常好，但是样本外预测非常差
- 恰好拟合：具有非常好的样本内以及样本外预测效果

# 欠拟合、过拟合与恰好拟合



# 过拟合问题

- 通常我们以 $R^2$ 等指标为基础，更容易挑出 $R^2$ 更大的模型来
- 但是 $R^2$ 大并不代表样本外预测效果好，容易出现过拟合问题
- 过拟合会导致样本外预测效果很差
  - 我发现每次看国足都会都输球
  - 是否可以「我有没有看球」这个指标预测国足输赢？



# 模型选择

模型选择方法：

- 逐步回归法，准则包括：
  - $\bar{R}^2$
  - AIC
  - BIC
- 交叉验证 (cross-validation)
- LASSO

问题：

- ① 是否可以剔除不显著的变量？
- ② 逐步回归方法是否正确？



# 调整后的 $R^2$

- 拟合优度,  $R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} = 1 - \frac{\hat{e}'\hat{e}}{Y'M_0Y}$ :
  - 度量了 $y$ 中可预测部分 ( $\hat{y}$ 的方差) 占总的方差 ( $y$ 的方差) 的百分比
  - $R^2$ 越大, 误差部分的方差越小, 拟合效果越好
  - $R^2$ 大不代表得到了因果关系
- 调整后的 $R^2$ :  $\bar{R}^2 = 1 - \frac{RSS/(N-K)}{TSS/(N-1)}$ 
  - $\bar{R}^2$ 与 $R^2$ 相比, 分别使用了残差 $\hat{e}$ 和 $y$ 的方差的无偏估计
  - $R^2$ 随着解释变量的增加而单调变大, 而 $\bar{R}^2$ 不会

# 信息准则

- 信息准则

- 赤池信息准则 (Akaike information creterion, AIC) : Akaike (1974) 通过 Kullback-Leibler距离, 定义了如下信息准则:

$$AIC = -2\text{Log\_Likelihood} + 2K$$

- 贝叶斯信息准则 (Bayesian information creterion, BIC) : Schwarz (1978) 通过贝叶斯法则提出了如下信息准则:

$$BIC = -2\text{Log\_Likelihood} + \ln(N) K$$

# 线性回归中的信息准则

- 对于线性回归模型，如果使用极大似然估计，得到：

$$\text{AIC} = N \ln \left( \frac{\sum_{i=1}^N \hat{e}_i^2}{N} \right) + N + 2K$$

$$\text{BIC} = N \ln \left( \frac{\sum_{i=1}^N \hat{e}_i^2}{N} \right) + N + \ln(N) K$$

- 此外，小样本条件下可以使用调整的AIC，AIC<sub>c</sub> (Hurvich和Tsai, 1989)：

$$\text{AIC}_c = \text{AIC} + \frac{2K(K+1)}{N-K-1}$$

# 训练集、验证集和测试集

- 不管是欠拟合还是过拟合，都会导致样本外预测的误差变大，因而我们可以只使用一部分样本进行估计，而在另外一部分样本中检验模型的预测能力。
- 一种简单的做法是区分训练集 (training data set) 和验证集 (validation data set)
  - 使用训练集的数据估计模型，并在验证集上计算预测误差的度量。
  - 最好的模型即在验证集上预测性能达到最好的模型。
- 此外，由于模型的选择使用了训练集和测试集，因而需要独立的另外一些样本用于最终模型性能的评估，这个独立于训练集和验证集的数据集即测试集 (test data set)，如果强调预测结果，可以在测试集上进行测试并展示。

# 交叉验证

- 不以上区分训练集和验证集的模型选择方法仍然可能受到数据集划分的随机性影响。为此，可以考虑使用交叉验证：
  - ① **K-折交叉验证 (K-fold cross validation)**：将 $N$ 个样本随机的分为大小相同的 $K$ 组，然后利用 $K - 1$ 组的数据对数据进行拟合，并使用该模型对剩下的一组计算目标函数值（在这里即预测误差的度量，如误差平方）。将这一过程对 $K$ 种组合重复进行，最终得到了 $N$ 个目标函数值的加总（如均方误差）。对于不同的模型，选择使得验证集目标函数最优的那个，或者预测误差最小的那个模型。
  - ② **留一验证 (leave-one-out cross validation)**：即 $K = N$ 的 $K$ 折交叉验证的特殊情形，每一次都用 $N - 1$ 个样本训练模型，对剩下的一个样本进行预测。

# 模型选择

## 多项式阶数选择

在以下程序中，我们首先产生了一个伪数据集：

$$y = \exp(x) + e$$

其中  $x \sim \mathcal{U}(0, 3)$ ,  $e \sim \mathcal{N}(0, 4)$ 。接着，我们从  $x$  的一次方开始，逐渐向回归中添加  $x^2, x^3, \dots, x^{10}$  对模型进行拟合，并计算  $R^2$ 、 $\bar{R}^2$ 、AIC、BIC 以及留一验证的结果。（model\_selection.do cross\_validation\_reg.do）

## 模型选择

多项式阶数	(1) $R^2$	(2) $\bar{R}^2$	(3) AIC	(4) BIC	(5) AICC	(6) MSE(CV)
1	0.8230	0.8194	242.83	245.83	242.26	7.471
2	0.9244	0.9212	201.49	<u>207.23</u>	202.01	3.268
3	0.9296	<u>0.9240</u>	<u>200.60</u>	208.25	<u>201.49</u>	<u>3.187</u>
4	0.9300	<u>0.9238</u>	201.60	211.16	202.97	3.295
5	0.9302	0.9223	203.47	214.95	205.43	3.445
6	0.9303	0.9205	205.46	218.84	208.12	3.656
7	0.9317	0.9202	206.43	221.73	209.94	3.628
8	0.9319	0.9205	208.27	225.48	212.77	3.586
9	0.9319	0.9186	210.24	229.36	215.88	3.819
10	0.9319	0.9186	212.24	233.28	219.19	3.854