Линейная регрессия

Метод наименьших квадратов как решение матричного уравнения. Часть 1

Skillbox

образовательная платформа

$$X = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & \cdots & x_{0k} \\ x_{10} & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n0} & x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{pmatrix}$$

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \cdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\hat{y} = Xw$$

$$Loss = (Xw - y)^2 \rightarrow \min$$

$$Xw = \hat{y}$$

$X^T Xw = X^T \hat{y}$,

где X^T — матрица, транспонированная к матрице X

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

где $(X^T X)^{-1}$ — матрица, обратная к $X^T X$

Пример

Пусть у нас имеется выборка из 5 объектов, описанных всего одним признаком. То есть $n = 5$, $k = 1$

X_1
1
3
4
5
7

Y
6
16
21
26
36

Перед нами задача одномерной регрессии:

$$\hat{y} = w_0 + w_1 \times x_1$$

Наша задача — определить значения вектора весов: w_0 и w_1

Очевидно, что искомая функция:

$$\hat{y} = 1 + 5 \times x_1$$

X_1
1
3
4
5
7

X_0	X_1
1	1
1	3
1	4
1	5
1	7

Это и есть матрица X

X_0	X_1
1	1
1	3
1	4
1	5
1	7

Тогда транспонированная матрица X^T

1	1	1	1	1
1	3	4	5	7

Тогда матрица $X^T X$

5	20
20	100

Матрица, обратная к $X^T X$

1	–0,2
–0,2	0,05

Значение $X^T \hat{y}$

105
520

И тогда $w = (X^T X)^{-1} X^T \hat{y}$

1
5

Таким образом, уравнение регрессии действительно имеет вид:
$\hat{y} = 1 \times 1 + 5 \times x = 1 + 5x$