Цель этой заметки — объяснить, что находится в обратной матрице кросс-произведений $(X^T X)^{-1}$.

Поехали!

Обозначим нашу матрицу $(X^T X)^{-1}$ как V. Она симметрична, $V^T = V$. По определению, $X^T X \cdot V = I$. Разобьём произведение на две части по-другому, $X^T \cdot XV = I$.

Заметим, что $X_* = XV$ — это матрица такого же размера, как X, $n \times k$. Что же собой представляют эти звезданутые иксы, X_*?

Во-первых, $X_* = XV$, поэтому новые X_* — это линейные комбинации исходных X с весами из матрицы $V = (X^T X)^{-1}$. Например, $x_{1*} = v_{11}x_1 + v_{21}x_2 + \cdots + v_{k1}x_k$.

Во-вторых, $X_*^T X_* = (XV)^T XV = V^T X^T XV = V = (X^T X)^{-1}$. Матрица кросс-произведений новых переменных является обратной к матрице кросс-произведений исходных переменных.

В частности, $v_{11} = x_{1*}^T x_{1*}$, а $v_{12} = v_{21} = x_{1*}^T x_{2*}$.

Во-третьих, $XX_* = I$, то есть новая переменная x_{i*} перпендикулярна всем старым переменным кроме x_i. Ортогональность позволяет нам взглянуть на первую звезданутую переменную как на остаток в регресии. Первая ничем не выделяется, просто индексов меньше будет.

$$x_{1*} = v_{11}x_1 + v_{21}x_2 + \cdots + v_{k1}x_k$$

Изолируем x_1 слева, а всё остальное — перенесём вправо:

$$x_1 = -\frac{v_{21}}{v_{11}}x_2 - \frac{v_{31}}{v_{11}}x_3 - \cdots - \frac{v_{k1}}{v_{11}}x_k + \frac{1}{v_{11}}x_{1*}$$

Мы только что заметили, что переменная x_{1*} перпендикулярна x_2, x_3, ..., x_k, поэтому перед нами регрессия x_1 на все остальные переменные X_{-1}:

$$x_1 = \hat\beta_{12}x_2 + \hat\beta_{13}x_3 + \cdots + \hat\beta_{1k}x_k + e_1$$

Здесь $e_1 = x_{1*}/v_{11}$ — это остаток от регрессии x_1 на x_2, ..., x_k. И $\hat\beta_{12} = -v_{21}/v_{11} = -v_{12}/v_{11}$ — это оценка коэффиента в регрессии x_1 перед переменной x_2.

Отсюда мы сразу видим, что $V = (X^T X)^{-1}$ — это **матрица-мать всех регрессий!** Хочешь узнать коэффициент в регрессии x_1 на все остальные переменные перед x_7? В уме, $\hat\beta_{17} = -v_{17}/v_{11}$.

Найдём, чему равен RSS_1 в этой регрессии.

$$RSS_1 = e_1^T e_1 = x_{1*}^T x_{1*}/v_{11}^2 = v_{11}/v_{11}^2 = 1/v_{11}.$$

Бинго! Ура, $v_{11} = 1/RSS_1$. Заметим, что $x_{1*} = e_1 v_{11} = e_1/RSS_1$. Типичный недиагональный элемент равен $v_{12} = -\hat\beta_{12}v_{11} = -\hat\beta_{12}/RSS_1$. И, наконец, матрицу-мать всех регрессий для $k = 3$ в студию:

$$V = (X^T X)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/RSS_1 & -\hat\beta_{12}/RSS_1 & -\hat\beta_{13}/RSS_1 \\ -\hat\beta_{21}/RSS_2 & 1/RSS_2 & -\hat\beta_{23}/RSS_2 \\ -\hat\beta_{31}/RSS_3 & -\hat\beta_{32}/RSS_3 & 1/RSS_3 \end{pmatrix}$$

Например, первая строка этой матрицы несёт всю информацию о регрессии x_1 на x_2 и x_3.

В случае пары регрессоров вспомним, что R^2 одинаков в регрессии x_1 на x_2 и в обратной и равен $R^2 = \hat\beta_{12}\hat\beta_{21}$. Поэтому, $v_{12}^2 = v_{21}^2 = \hat\beta_{12}\hat\beta_{21}/(RSS_1 RSS_2) = R^2/(RSS_1 RSS_2)$ и $V = (X^T X)^{-1}$ равна

$$\begin{pmatrix} 1/RSS_1 & -\hat\beta_{12}/RSS_1 \\ -\hat\beta_{21}/RSS_2 & 1/RSS_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{RSS_1} & -\frac{|R|}{\sqrt{RSS_1 RSS_2}} \\ -\frac{|R|}{\sqrt{RSS_1 RSS_2}} & \frac{1}{RSS_2} \end{pmatrix} = \frac{1}{1-R^2}\begin{pmatrix} \frac{1}{TSS_1} & -\frac{|R|}{\sqrt{TSS_1 TSS_2}} \\ -\frac{|R|}{TSS_1 TSS_2} & \frac{1}{TSS_2} \end{pmatrix}.$$