Конспект по теме "Линейная регрессия изнутри"

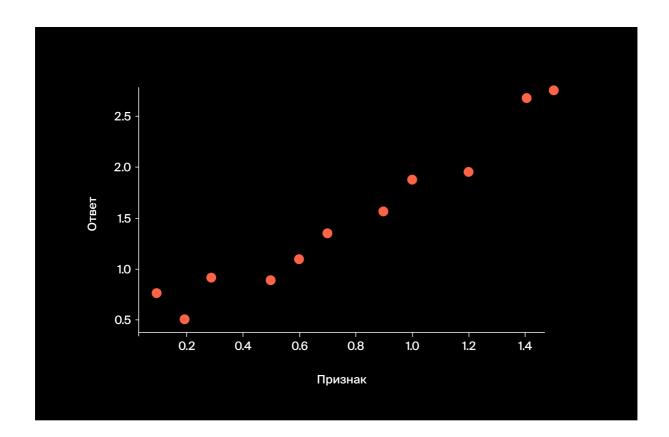
Модель линейной регрессии

У линейной регрессии признаки — это вектор чисел в n-мерном пространстве (допустим, x). Предсказание модели (a) вычисляется так: скалярно умножается вектор признаков на вектор весов (w), затем к этому произведению прибавляется величина **сдвига** предсказания (bias):

$$\mathbf{a} = (\mathbf{x}, \mathbf{w}) + \mathbf{w}_0$$

Вектор w и скаляр w0 — это параметры модели. В векторе w параметров n, а в w0 — один. То есть количество параметров больше длины вектора признаков на единицу.

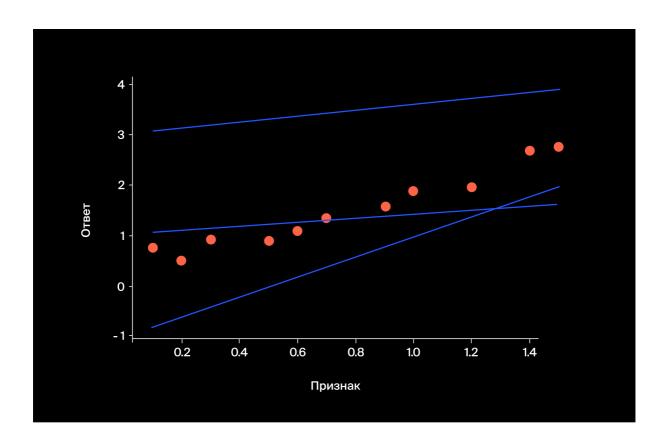
Если длина вектора признаков равна единице, то в выборке всего один признак. Изобразим этот признак с ответами на графике:



Графики предсказаний для линейной регрессии задаются уравнением:

$$y = wx + w_0$$

Если менять параметры w и w0, получается любая прямая, или линия (отсюда и название модели):



Задача обучения

Разберём алгоритм обучения. Нашей метрикой качества будет *MSE*: её наименьшее значение модель должна получить на тестовых данных. Задачу обучения сформулируем такую: найти параметры модели, при которых значение функции потерь (loss function) на обучающей выборке минимально. Как метрики качества, она принимает на вход правильные ответы и предсказания. А возвращает число, которое называют «потерями» (их-то и нужно минимизировать). В нашей задаче эта функция приравнивается к *MSE*. Но обычно функция потерь применяется для обучения, а метрика качества — для тестирования.

Задачу обучения запишем в векторном виде. Обучающую выборку представим как матрицу X, в которой строки соответствуют объектам, а столбцы — признакам. Параметры линейной регрессии обозначим w и w0. Чтобы получить вектор предсказаний a, умножим матрицу X на вектор w и прибавим величину сдвига w0.

Формула выглядит так:

$$a = Xw + w_0$$

Для сокращения записи изменим обозначения. В матрицу *X* добавим столбец, состоящий только из единиц (он идёт нулевым); а параметр *w0* — к вектору w:

$$\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & ... & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & ... & X_{2n} \\ ... & ... & ... \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & ... & X_{1n} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & ... & X_{2n} \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (W_1, W_2, ..., W_n) & \longrightarrow (W_0, W_1, W_2, ..., W_n) \end{pmatrix}$$

Затем умножим матрицу X на вектор w. Сдвиг умножится на вектор из единиц (нулевой столбец). Получим такой вектор предсказаний a:

Введём новое обозначение y — вектор значений целевого признака для обучающей выборки.

Запишем формулой задачу обучения линейной регрессии для функции потерь *MSE*:

$w = \underset{w}{arg min MSE(Xw, y)}$

Функция *argmin()* находит минимум и возвращает, при каком аргументе он был достигнут.

Обратная матрица

Единичная матрица (E) — это квадратная матрица, на главной диагонали которой стоят единицы, а остальные элементы — нули. Если любую матрицу A умножить на единичную (или наоборот), получится эта же матрица A:

$$AE = EA = A$$

Обратная для квадратной матрицы A — матрица A с верхним индексом -1, произведение которой на A равно единичной матрице. Умножение может быть в любом порядке:

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E$$

Матрицы, для которых можно найти обратные, называются **обратимыми**. Но не у каждой матрицы есть обратная. Такие матрицы называются **необратимыми**. Необратимые матрицы встречаются редко. Если сгенерировать случайную матрицу функцией *numpy.random.normal()*, вероятность получить необратимую матрицу близка к нулю.

Чтобы найти обратную матрицу, вызовите функцию *numpy.linalg.inv()*. Также она поможет проверить матрицу на обратимость: если матрица необратима, будет обнаружена ошибка.

Обучение линейной регрессии

Задача обучения линейной регрессии такая:

$$w = arg \min_{w} MSE(Xw, y)$$

Минимальное значение *MSE* получается, когда веса равны этой величине:

$$\mathbf{W} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{y}$$

Как получили эту формулу:

- Транспонированная матрица признаков умножается на себя;
- Вычисляется обратная к результату матрица;
- Обратная умножается на транспонированную матрицу признаков;
- Результат умножается на вектор значений целевого признака.