



Непараметрическая регрессия

Евгений Борисов

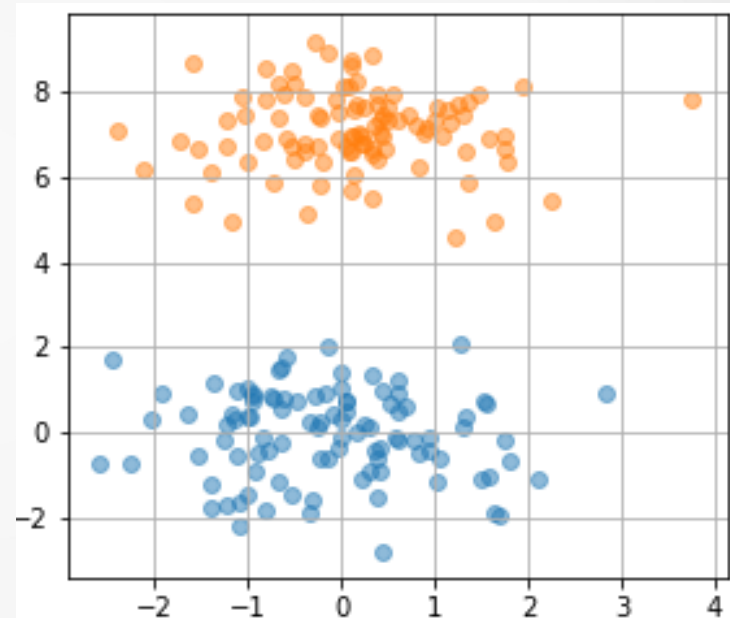
метрические методы : регрессия

классификация - задача разделения объектов на классы

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \in \{0, 1\}$ - метки классов

$a: X \rightarrow Y$



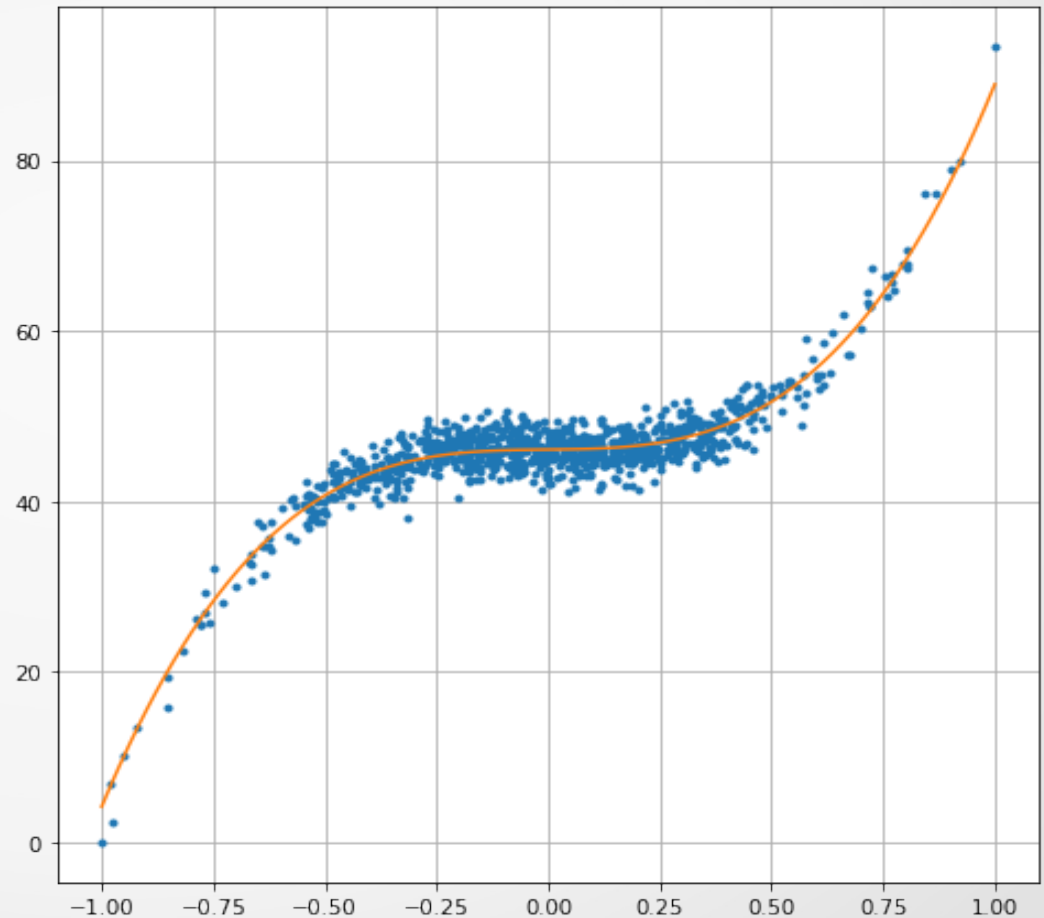
метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

$$a: X \rightarrow Y$$



метрические методы : регрессия

Оценка недвижимости по статистике продаж

цена = **оценка**(
 район,
 площадь,
 этаж,
 лифт,
 ремонт,
)

метрические методы : регрессия

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \rightarrow Y$$

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

параметрический подход: определяем (допускаем) вид зависимости

$$a = f(x, \theta)$$

... и подбираем параметры решая задачу оптимизации (метод наименьших квадратов)

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m (f(x_i, \theta) - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

параметрический подход: определяем (допускаем) вид зависимости

$$a = f(x, \theta)$$

... и подбираем параметры решая задачу оптимизации (метод наименьших квадратов)

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m (f(x_i, \theta) - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$

недостаток: как определять вид зависимости?

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

Непараметрический подход: приближение θ в окрестности точки u

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m w_i(u) \cdot (\theta - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$

$w_i(u)$ - вес объекта x_i относительно u
убывает при увеличении расстояния

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

Непараметрический подход: приближение θ в окрестности точки u

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m w_i(u) \cdot (\theta - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$

$w_i(u) = K\left(\frac{\rho(u, x_i)}{h}\right)$ - вес объекта x_i относительно u
убывает при увеличении расстояния

$K(r)$ - функция ядра

h - параметр ширина окна сглаживания

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

оптимизируем Q . . .

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m w_i(u) \cdot (\theta - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \theta} = 0$$

метрические методы : регрессия

регрессия - задача восстановления зависимости

$a: X \rightarrow Y$ $X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты $Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

оптимизируем Q ...

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^m w_i(u) \cdot (\theta - y_i)^2 \rightarrow \min_{\theta}$$
$$\frac{\partial Q}{\partial \theta} = 0$$

... получаем

формулу Надарая-Ватсона

$$a(u, X) = \frac{\sum_{i=1}^m y_i \cdot w_i(u)}{\sum_{i=1}^m w_i(u)} = \frac{\sum_{i=1}^m y_i \cdot K\left(\frac{\rho(u, x_i)}{h}\right)}{\sum_{i=1}^m K\left(\frac{\rho(u, x_i)}{h}\right)}$$

$w_i(u)$ - вес объекта x_i относительно u

$K(r)$ - функция ядра

h - параметр ширина окна сглаживания

метрические методы : регрессия

метрика - функция расстояния

$$\rho: X \times X \rightarrow [0, \infty)$$

аксиома тождества : $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$

симметрия: $\rho(x, y) = \rho(y, x)$

неравенство треугольника: $\rho(x, z) \leq \rho(x, y) + \rho(y, z)$

метрические методы : регрессия

метрика - функция расстояния

Евклидова метрика: $\rho(x, y) = \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2}$

метрика Минковского: $\rho(x, y) = \sqrt[n]{\sum_i w_i |x_i - y_i|^n}$

метрика Чебышева: $\rho(x, y) = \max_i |x_i - y_i|$

косинусная метрика: $\rho(x, y) = \frac{\sum_i x_i y_i}{\sqrt{\sum_i x_i^2} \cdot \sqrt{\sum_i y_i^2}}$

метрические методы : регрессия

ядро - неотрицательная интегрируемая функция

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(r) dr = 1$$

$$K(r) = K(-r)$$

прямоугольное

$$\Pi(r) = [|r| \leq 1]$$

треугольное

$$T(r) = (1 - |r|)[|r| \leq 1]$$

квадратичное
(Епанечникова)

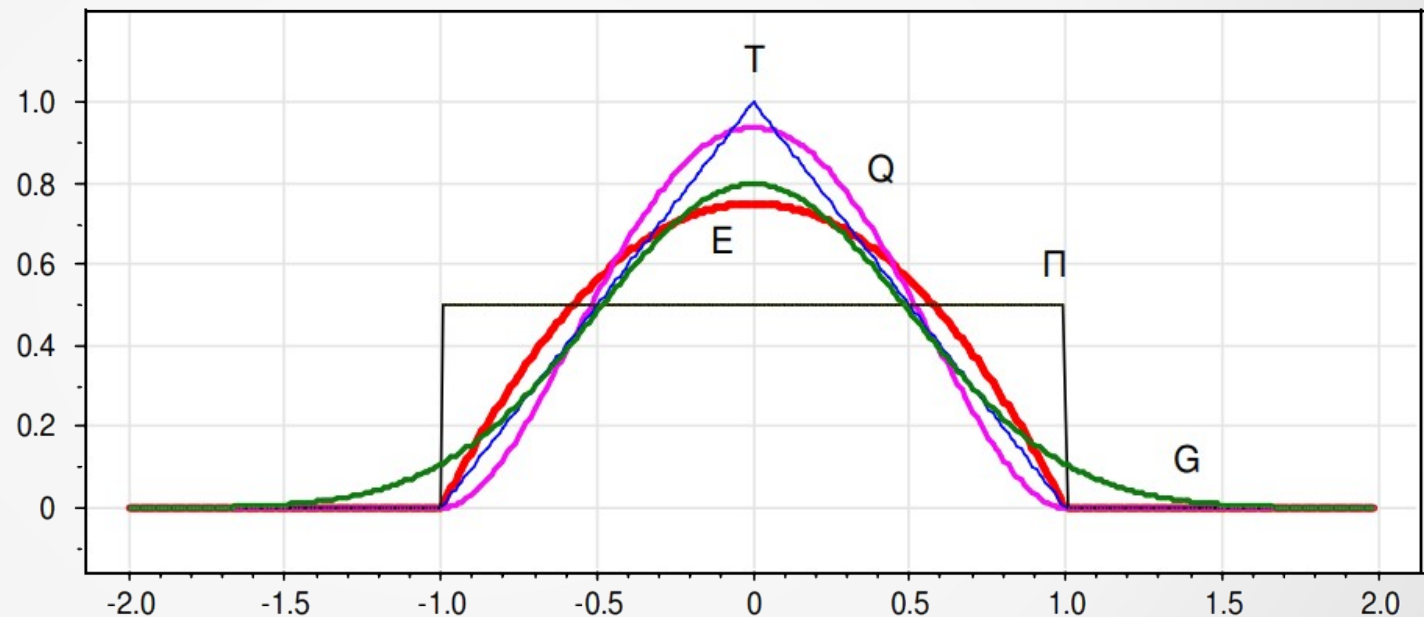
$$E(r) = (1 - r^2)[|r| \leq 1]$$

квартическое

$$Q(r) = (1 - r^2)^2[|r| \leq 1]$$

гауссово

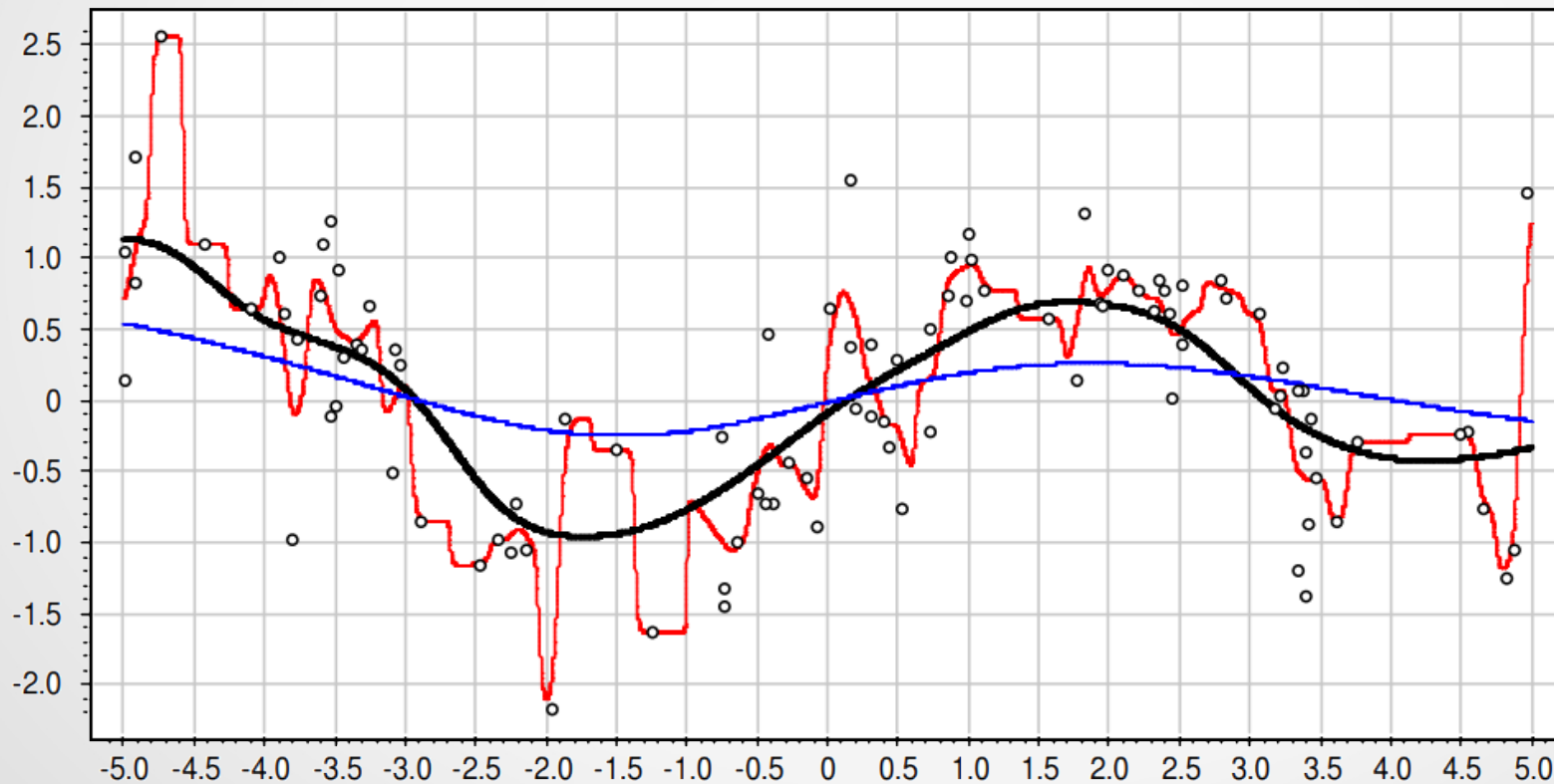
$$G(r) = \exp(-2r^2)$$



метрические методы : регрессия

выбор ядра и ширины окна сглаживания

$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$



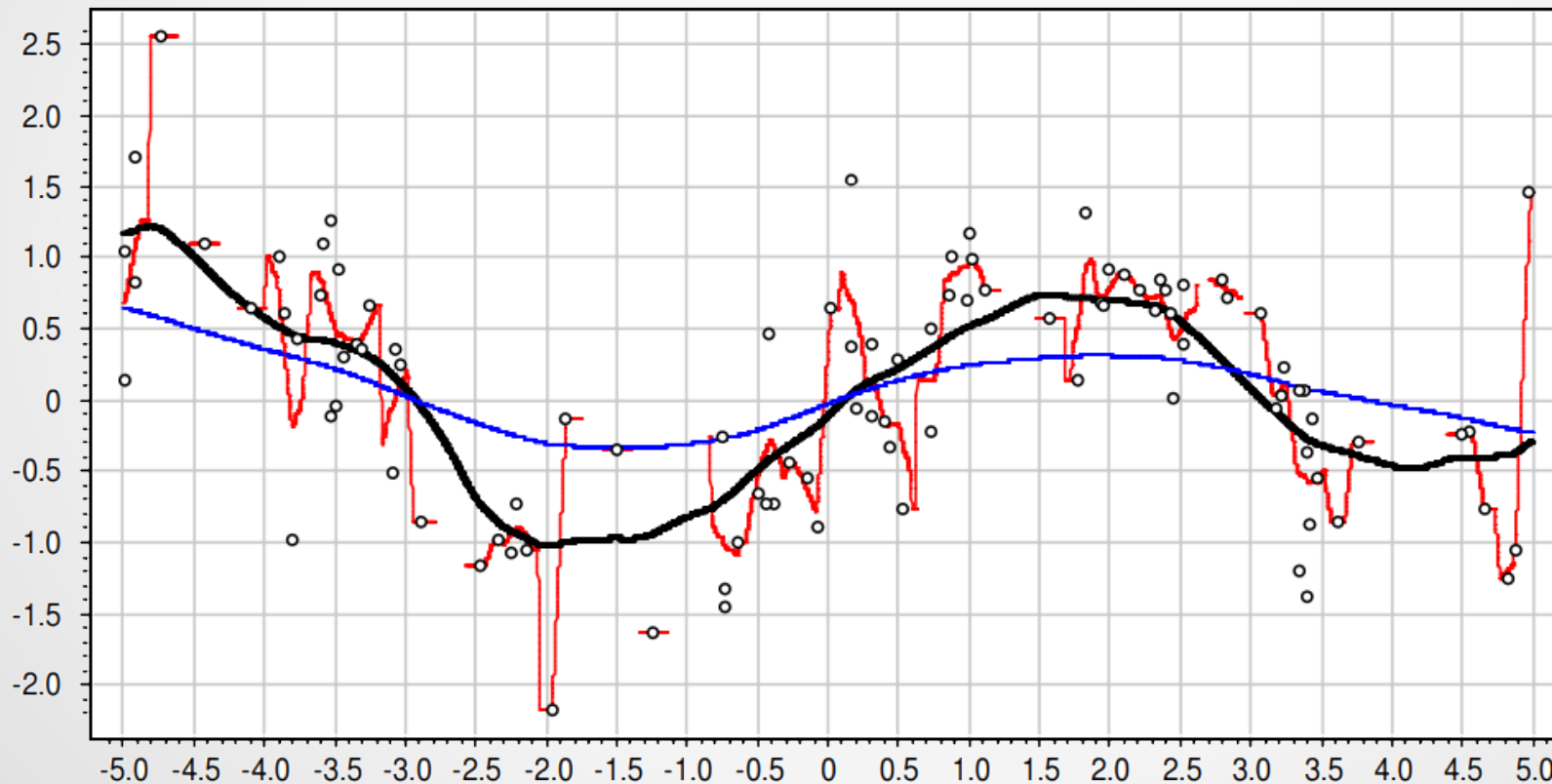
Гауссовское ядро \Rightarrow гладкая аппроксимация

Ширина окна существенно влияет на точность аппроксимации

метрические методы : регрессия

выбор ядра и ширины окна сглаживания

$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, треугольное ядро $K(r) = (1 - |r|) [|r| \leq 1]$



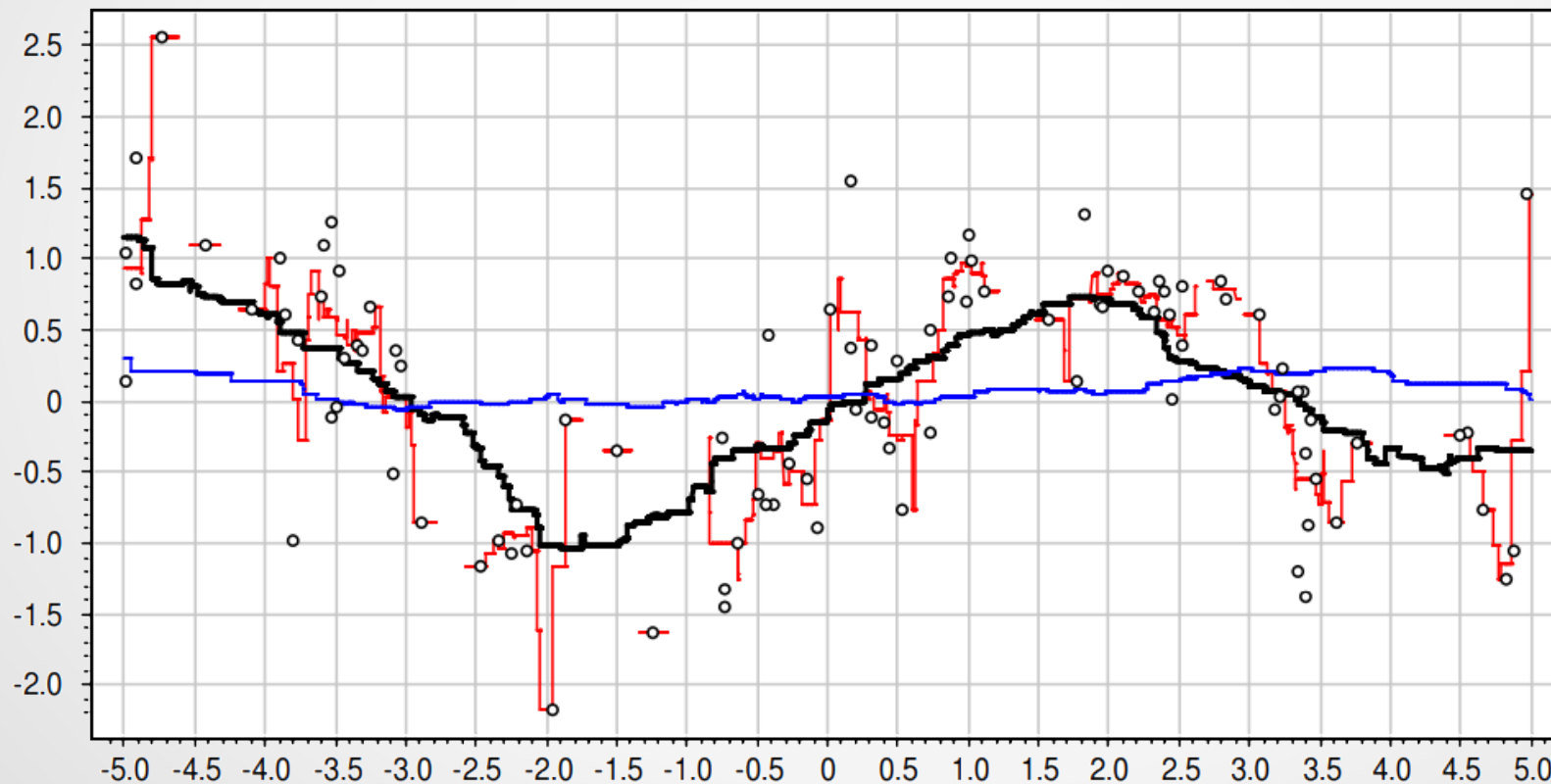
Треугольное ядро \Rightarrow кусочно-линейная аппроксимация

Аппроксимация не определена, если в окне нет точек выборки

метрические методы : регрессия

выбор ядра и ширины окна сглаживания

$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, прямоугольное ядро $K(r) = [|r| \leq 1]$



Прямоугольное ядро \Rightarrow кусочно-постоянная аппроксимация
Выбор ядра слабо влияет на точность аппроксимации

метрические методы : регрессия

ядро $K(r)$ влияет на гладкость функции $a(x)$

ширина окна h влияет на качество аппроксимации $a(x)$

метрические методы : регрессия

ядро $K(r)$ влияет на гладкость функции $a(x)$

ширина окна h влияет на качество аппроксимации $a(x)$

выбор h ширины окна сглаживания

метод скользящего контроля (Leave One Out, L00)

параметр h выбираем перебором

проверяем суммарную ошибку на учебном множестве

из учебного набора удаляется текущий (проверяемый) пример

$$LOO(h, X) = \sum_{i=1}^m \left(a(x_i, \{X \setminus x_i\}, h) - y_i \right)^2 \rightarrow \min_h$$

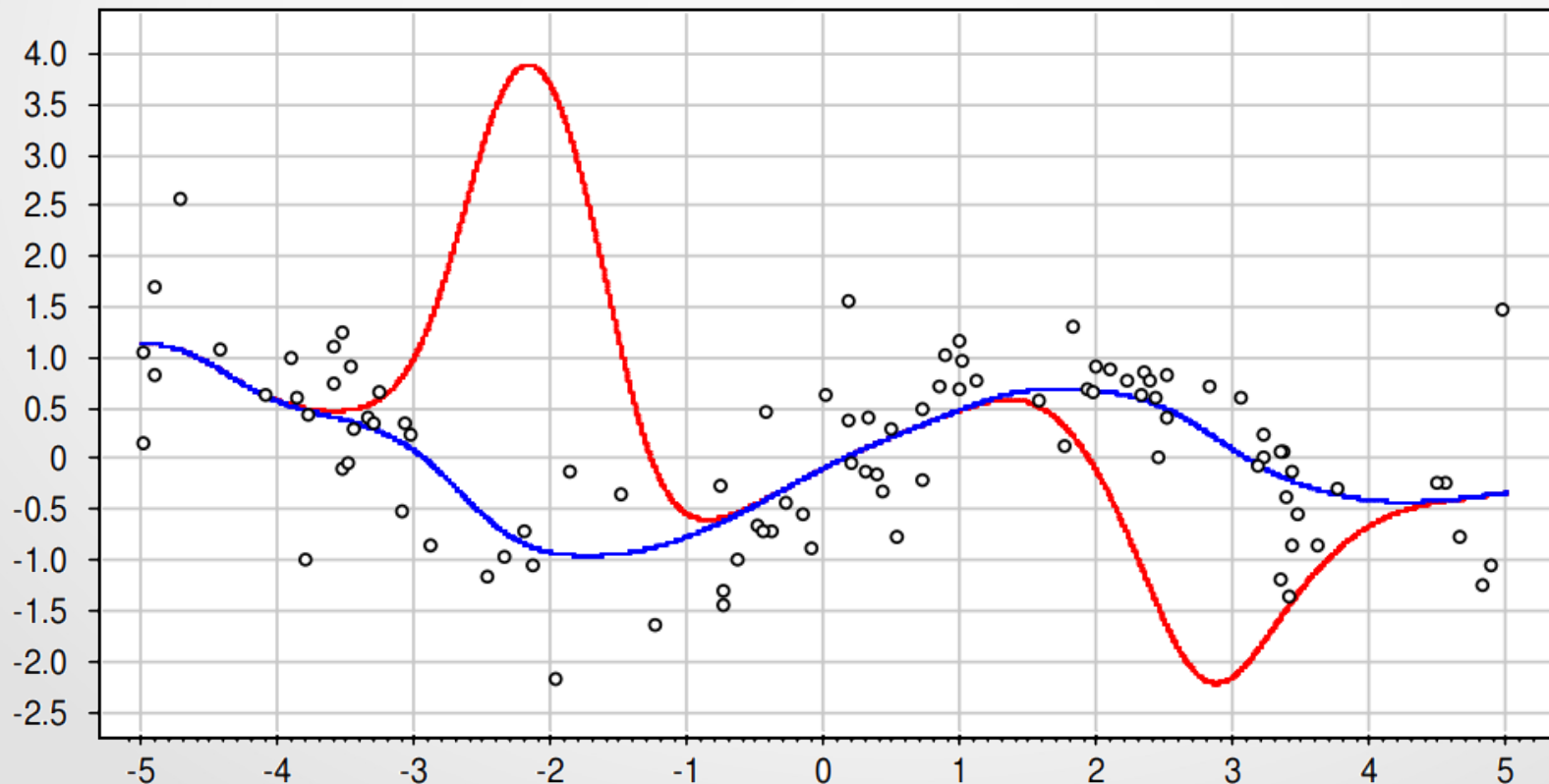
метрические методы : регрессия

влияние выбросов

$\ell = 100$, $h = 1.0$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$

Две из 100 точек — выбросы с ординатами $y_i = 40$ и -40

Синяя кривая — выбросов нет



метрические методы : регрессия

коррекция влияния выбросов

локально взвешенное сглаживание

$\varepsilon_i = |a(x_i, \{X \setminus x_i\}, h) - y_i|$ - ошибка на учебном примере i

$\gamma_i = \tilde{K}(\varepsilon_i)$ - корректирующий коэффициент,
чем больше ошибка тем меньше вес,
(выбираем другое ядро, отличное от K)

метрические методы : регрессия

алгоритм LOWESS (locally weighted scatter plot smoothing):

определяем корректирующие коэффициенты

1. инициализация $y_i := 1; i = 1, \dots, m$

2. вычисляем оценку скользящего контроля

$$a_i = a(x_i, \{X \setminus x_i\}, h) = \frac{\sum_{j=1, i \neq j}^m y_j y_j \cdot K\left(\frac{\rho(x_i, x_j)}{h}\right)}{\sum_{j=1, i \neq j}^m K\left(\frac{y_j \rho(x_i, x_j)}{h}\right)}; i = 1, \dots, m$$

3. пересчитываем корректирующие коэффициенты

$$y_i := \tilde{K}(|a_i - y_i|); i = 1, \dots, m$$

4. если корректирующие коэффициенты существенно изменились
то переход на п.2
иначе конец работы

метрические методы : регрессия



Вопросы ?

метрические методы : регрессия

git clone https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git

К.В. Воронцов Метрические методы классификации. - курс
"Машинное обучение" ШАД Яндекс 2014

К.В. Воронцов Методы восстановления регрессии - курс
"Машинное обучение" ШАД Яндекс 2014

Борисов Е.С. Модели математической регрессии
<http://mechanoid.su/ml-regression.html>

Формула Надарая-Ватсона
<http://www.machinelearning.ru/wiki>

метрические методы : регрессия

источники данных для экспериментов



sklearn.datasets
UCI Repository
kaggle



задание

выбрать данные в репозитории UCI
(<https://archive.ics.uci.edu/ml>)

реализовать для них регрессию

реализовать LOO для выбора размера окна сглаживания

реализовать LOWESS для коррекции выбросов