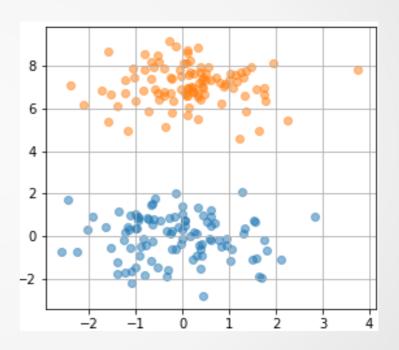
Непараметрическая регрессия

Евгений Борисов

классификация - задача разделения объектов на классы

$$X \subset \mathbb{R}^n$$
 - объекты $Y \in \{0,1\}$ - метки классов $a: X o Y$

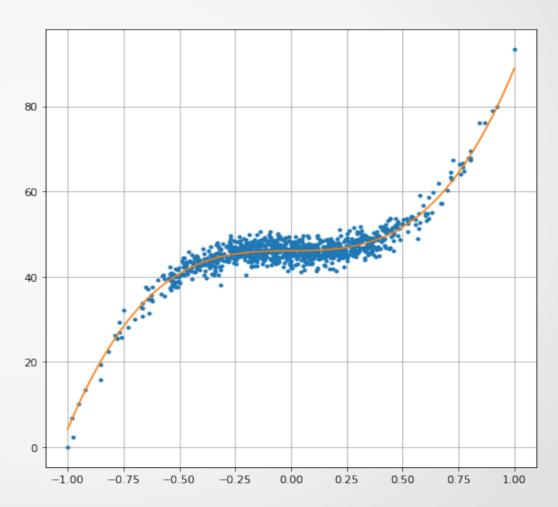


регрессия-задача восстановления зависимости

$$X \subset \mathbb{R}^n$$
 - объекты

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - ответы

$$a: X \to Y$$



Оценка недвижимости по статистике продаж

```
цена = оценка(
район,
площадь,
этаж,
лифт,
ремонт,
```

$$X \subset \mathbb{R}^n$$
 - объекты

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - ответы

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \rightarrow Y$$

регрессия - задача восстановления зависимости

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

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - ответы

параметрический подход: определяем (допускаем) вид зависимости

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

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

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

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \to Y$$
 $X \subset \mathbb{R}^n$ - 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)

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

недостаток: как определять вид зависимости?

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \to Y$$

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

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - ответы

НЕпараметрический подход:приближение θ в окрестности точки и

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

 $w_{i}(u)$ - вес объекта x_{i} относительно и убывает при увеличении расстояния

регрессия - задача восстановления зависимости

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

НЕпараметрический подход:приближение θ в окрестности точки и

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

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

K(r) - функция ядра

h - параметр ширина окна сглаживания

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \to Y$$

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

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - ответы

оптимизируем Q ...

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

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

регрессия - задача восстановления зависимости

$$a: X \to Y$$

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

$$Y \subset \mathbb{R}$$
 - 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 и

K(r) - функция ядра

- параметр ширина окна сглаживания

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

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:
$$\rho(x,y) = \frac{\sum_{i} x_{i} y_{i}}{\sqrt{\sum_{i} x_{i}^{2}} \cdot \sqrt{\sum_{i} y_{i}^{2}}}$$

неотрицательная интегрируемая функция ядро

-2.0

 $\int_{0}^{\infty} K(r) dr = 1$

K(r)=K(-r)

прямоугольное

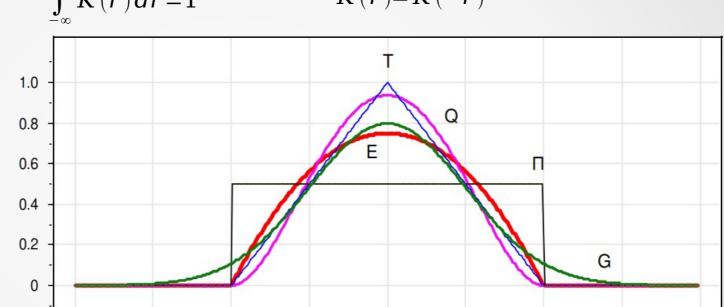
$$\Pi(r)=[|r|\leq 1]$$

треугольное

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

квадратичное (Епанечникова)

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



0

квартическое

-1.0

-0.5

-1.5

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

гауссово

1.0

0.5

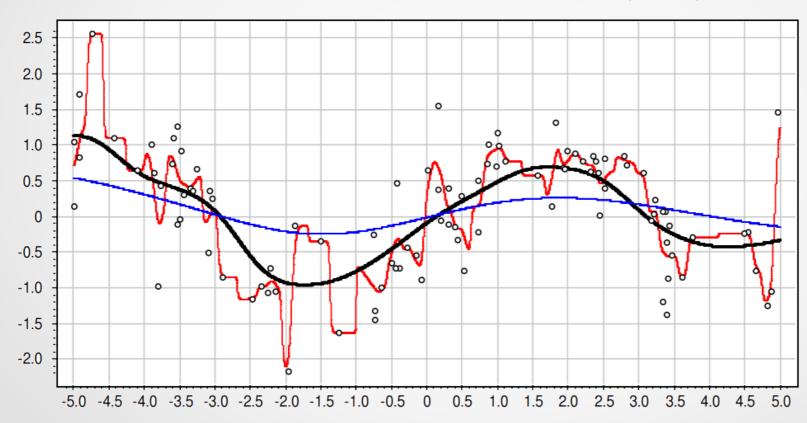
$$G(r)=\exp(-2r^2)$$

1.5

2.0

выбор ядра и ширины окна сглаживания

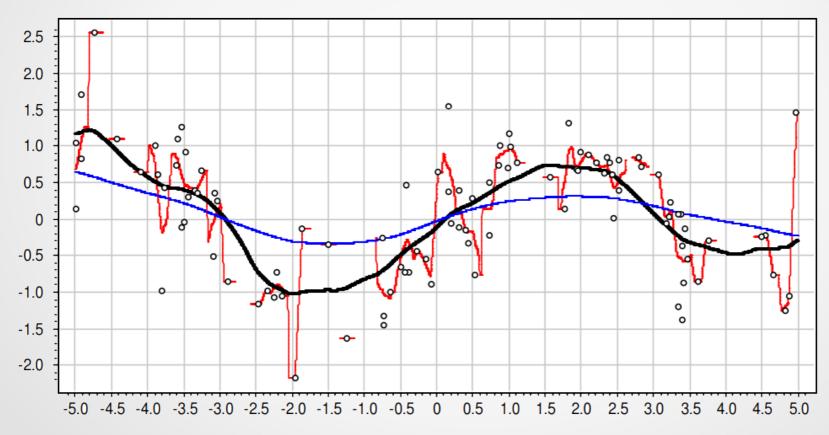
 $h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$



Гауссовское ядро ⇒ гладкая аппроксимация Ширина окна существенно влияет на точность аппроксимации

выбор ядра и ширины окна сглаживания

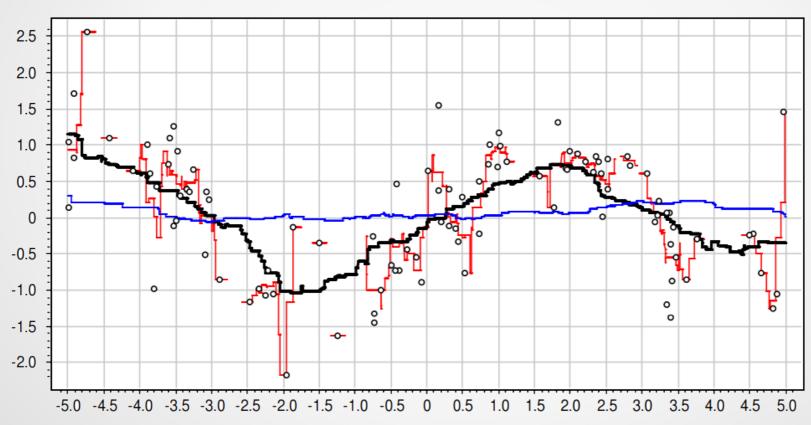
 $h \in \{ extstyle{0.1}, 1.0, extstyle{3.0}\}$, треугольное ядро $K(r) = ig(1 - |r|ig)ig[|r| \leqslant 1ig]$



Треугольное ядро ⇒ кусочно-линейная аппроксимация Аппроксимация не определена, если в окне нет точек выборки

выбор ядра и ширины окна сглаживания

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



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

ядро K(r) влияет на на гладкость функции a(x) ширина окна h влияет на качество аппроксимации a(x)

ядро K(r) влияет на на гладкость функции a(x) ширина окна h влияет на качество аппроксимации a(x)

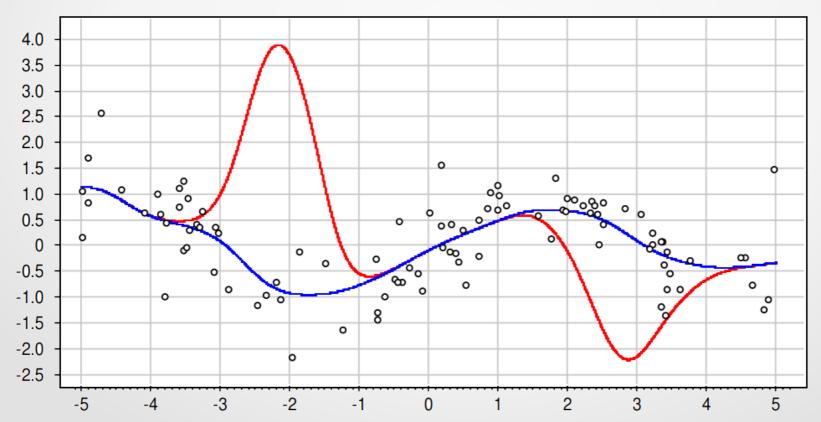
выбор h ширины окна сглаживания

метод скользящего контроля (Leave One Out, LOO)
параметр h выбираем перебором
проверяем суммарную ошибку на учебном множестве
из учебного набора удаляется текущий (проверяемый) пример

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

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



коррекция влияния выбросов

локально взвешенное сглаживание

$$arepsilon_i = \left| a(x_i, \{X \setminus x_i\}, h) - y_i \right|$$
 – ошибка на учебном примере і

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

<u>алгоритм LOWESS (locally weighted scatter plot smoothing):</u> определяем корректирующие коэффициенты

- 1. инициализация $\gamma_i := 1, i = 1, ...m$
- 2. вычисляем оценку скользящего контроля

$$a_{i} = a(x_{i}, \{X \setminus x_{i}\}, h) = \frac{\sum_{j=1, i \neq j}^{m} \gamma_{j} y_{j} \cdot K\left(\frac{\rho(x_{i}, x_{j})}{h}\right)}{\sum_{j=1, i \neq j}^{m} K\left(\frac{\gamma_{j} \rho(x_{i}, x_{j})}{h}\right)}; i = 1, \dots m$$

3. пересчитываем корректирующие коэффициенты

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

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



Вопросы?

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 E.C. Модели математической регрессии http://mechanoid.su/ml-regression.html

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

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