Непараметрическая регрессия

Евгений Борисов

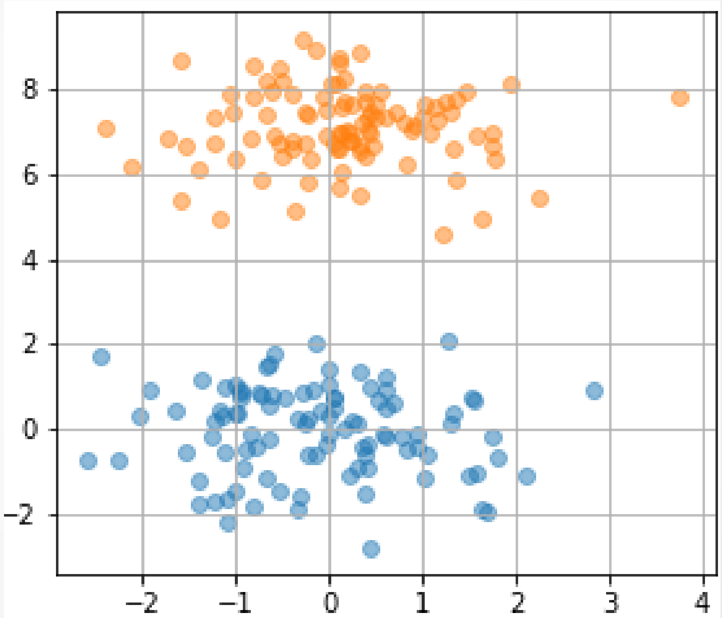
метрические методы : регрессия

классификация - задача разделения объектов на классы

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \in \{0, 1\}$ - метки классов

$$a : X \rightarrow Y$$



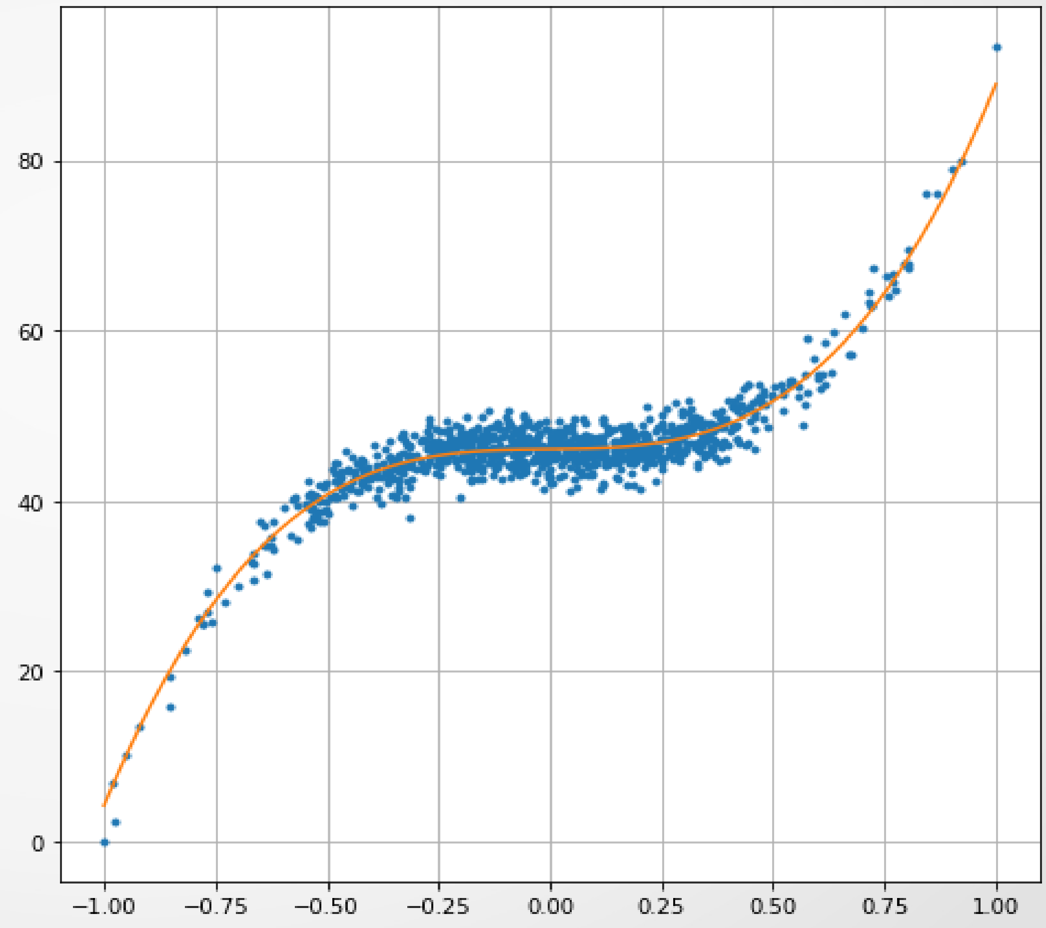
метрические методы : регрессия

регрессия-задача восстановления зависимости

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \subset \mathbb{R}$ - ответы

$$a : X \to Y$$



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

<u>регрессия</u> - 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)

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

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)

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

недостаток: как определять вид зависимости?

метрические методы : регрессия

<u>регрессия</u> - задача восстановления зависимости

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

<u>НЕпараметрический подход</u>:приближение θ в окрестности точки u

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

$w_i(u)$- 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

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

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

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

симметрия: $\rho(x, y) = \rho(y, x)$

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

метрические методы : регрессия

метрика - функция расстояния

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

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

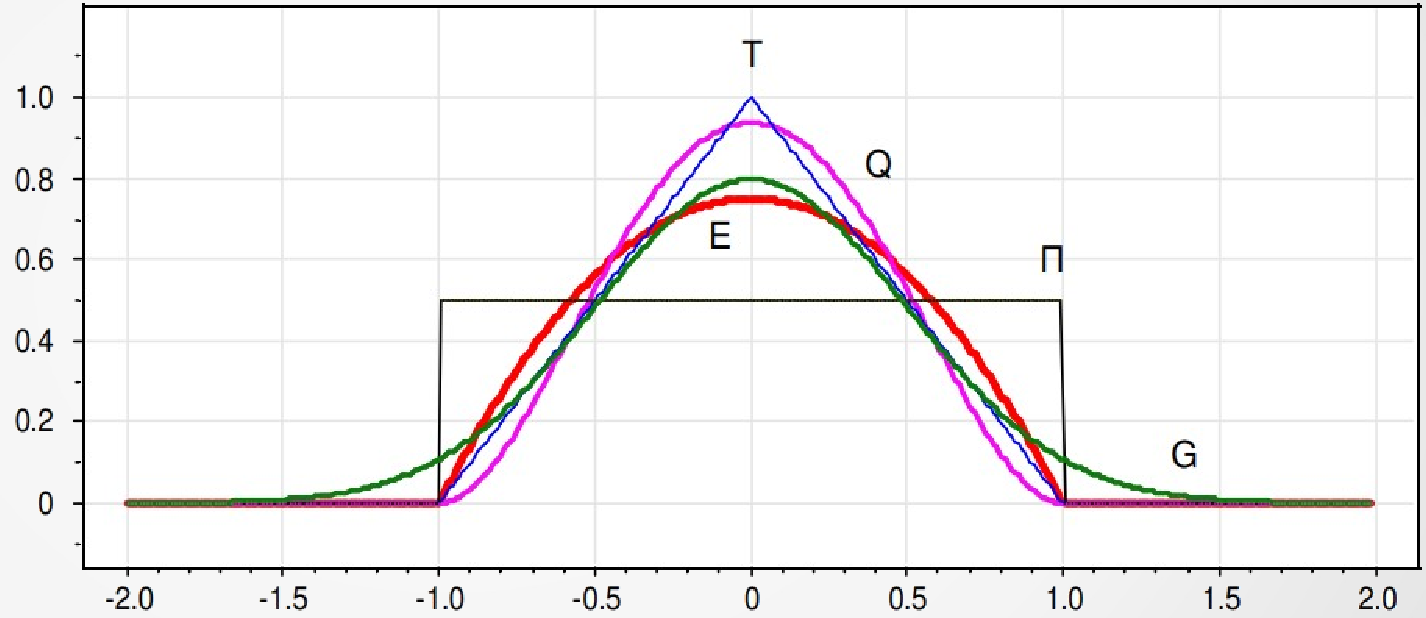
метрика Чебышева: $\rho(x, y) = \max_i |x_i - y_i|$

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

метрические методы : регрессия

ядро - неотрицательная интегрируемая функция

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



прямоугольное

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

треугольное

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

квадратичное (Епанечникова)

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

квартическое

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

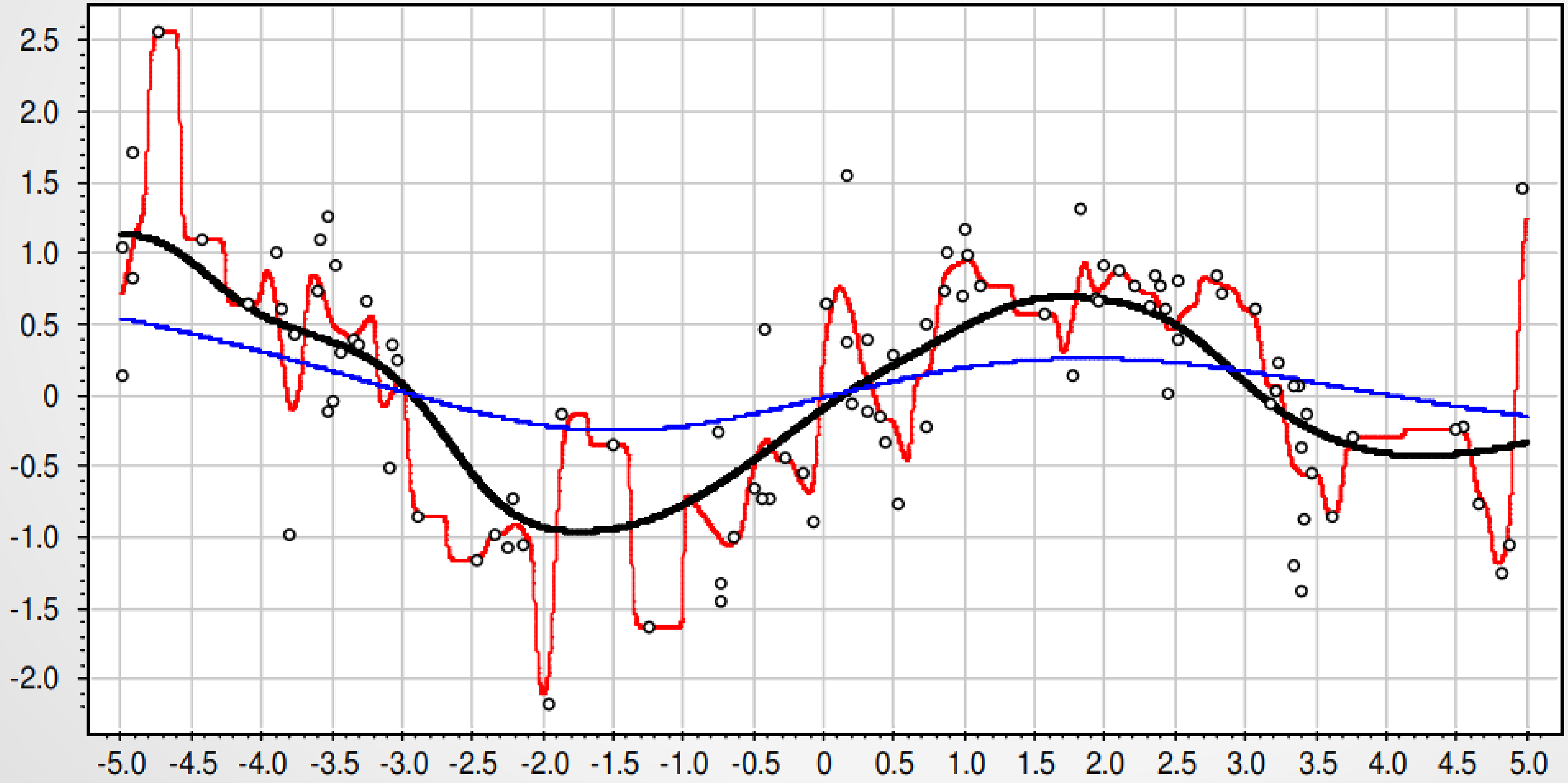
гауссово

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

метрические методы : регрессия

выбор ядра и ширины окна сглаживания

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



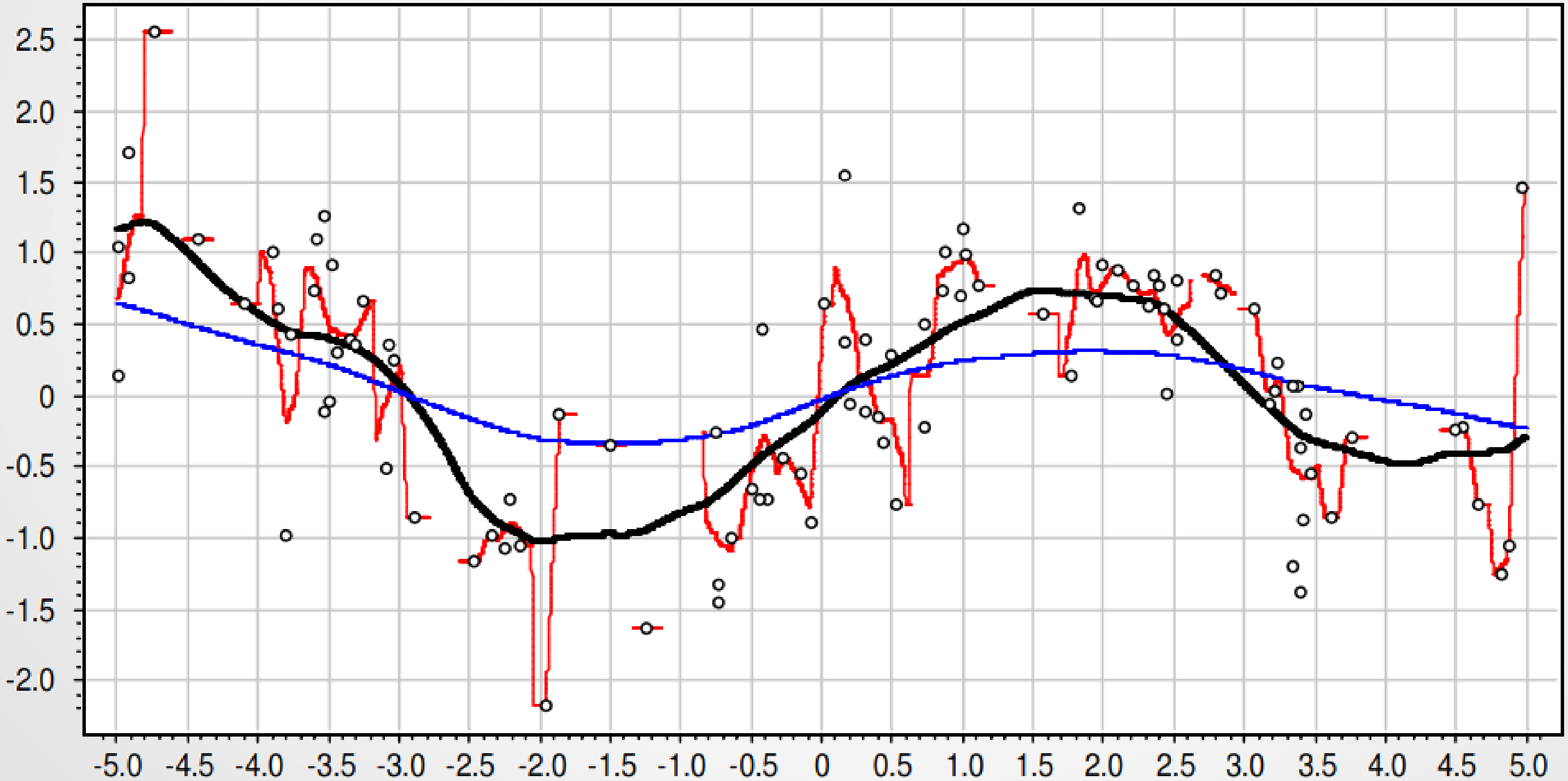
Гауссовское ядро $\Rightarrow$ гладкая аппроксимация

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 $K(r) = (1 - |r|)\,[|r| \leqslant 1]$



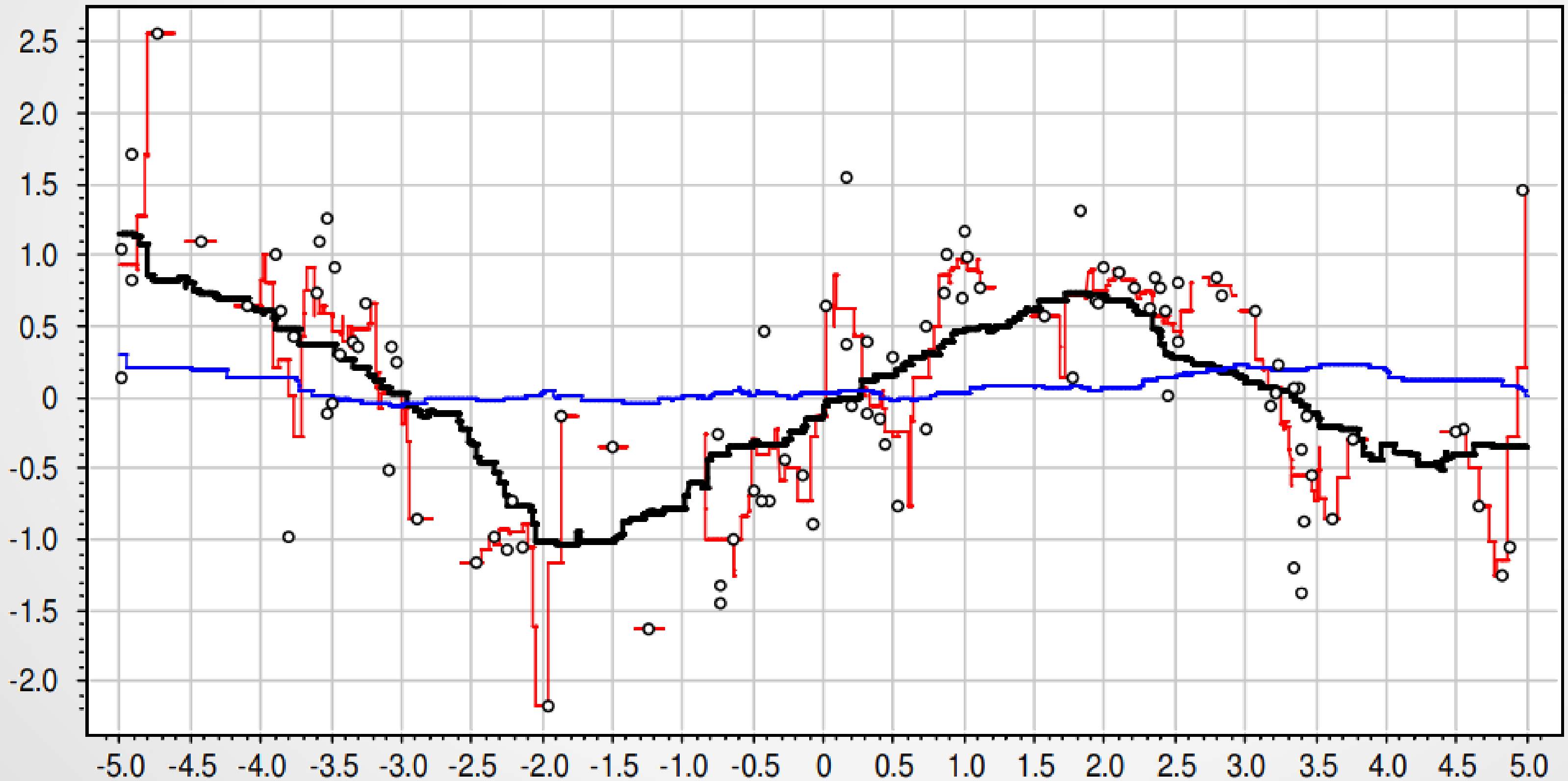
Треугольное ядро $\Rightarrow$ кусочно-линейная аппроксимация

Аппроксимация не определена, если в окне нет точек выборки

метрические методы : регрессия

<u>выбор ядра и ширины окна сглаживания</u>

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



Прямоугольное ядро $\Rightarrow$ кусочно-постоянная аппроксимация

Выбор ядра слабо влияет на точность аппроксимации

метрические методы : регрессия

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

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

метрические методы : регрессия

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

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

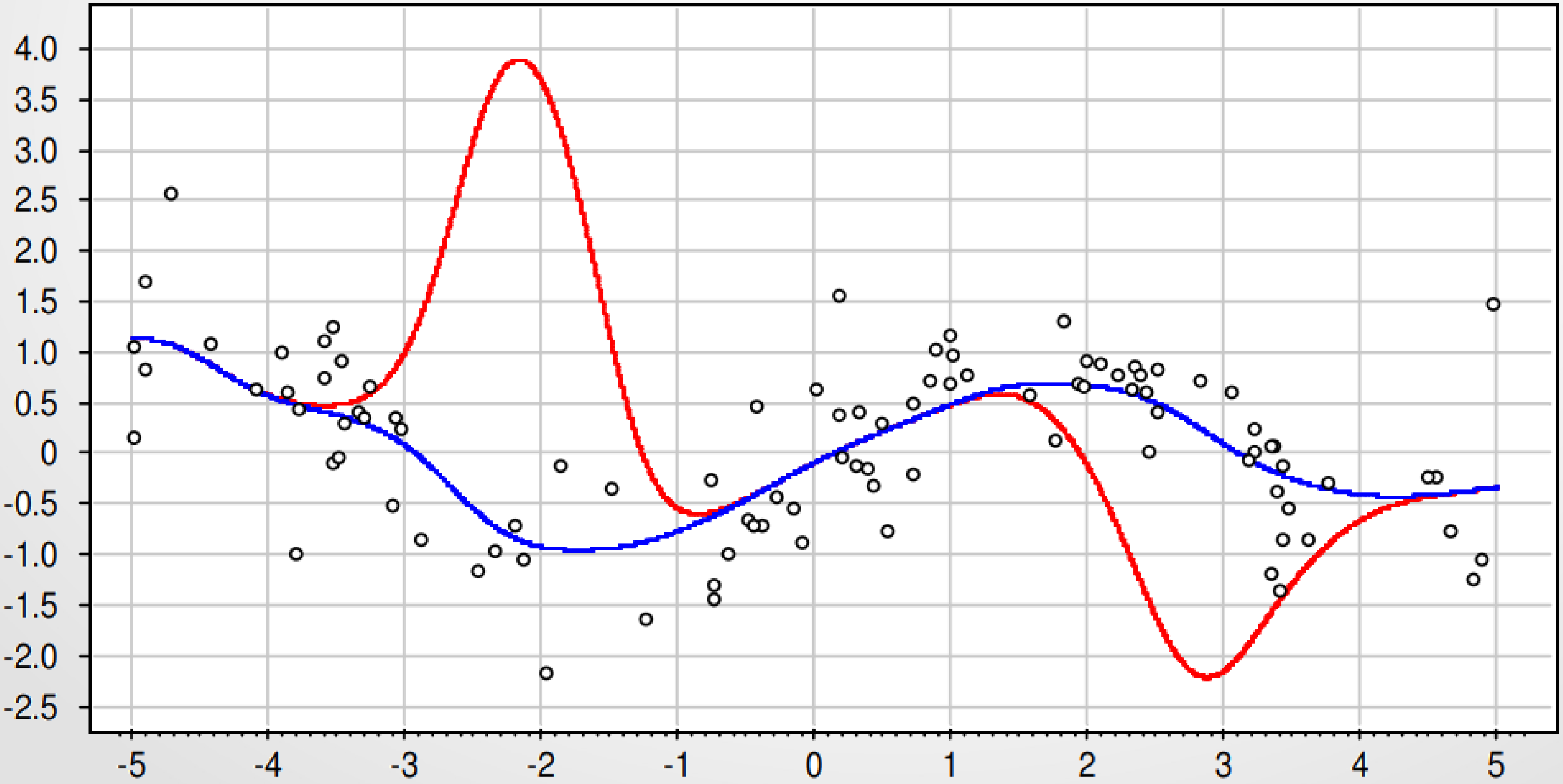
метрические методы : регрессия

влияние выбросов

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

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

Синяя кривая — выбросов нет



метрические методы : регрессия

<u>**коррекция влияния выбросов**</u>

локально взвешенное сглаживание

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

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

метрические методы : регрессия

алгоритм LOWESS (locally weighted scatter plot smoothing):

определяем корректирующие коэффициенты

1. инициализация $\gamma_i := 1 ; i = 1, \ldots m$

2. вычисляем оценку скользящего контроля

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

3. пересчитываем корректирующие коэффициенты

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

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