Непараметрическая регрессия

Евгений Борисов

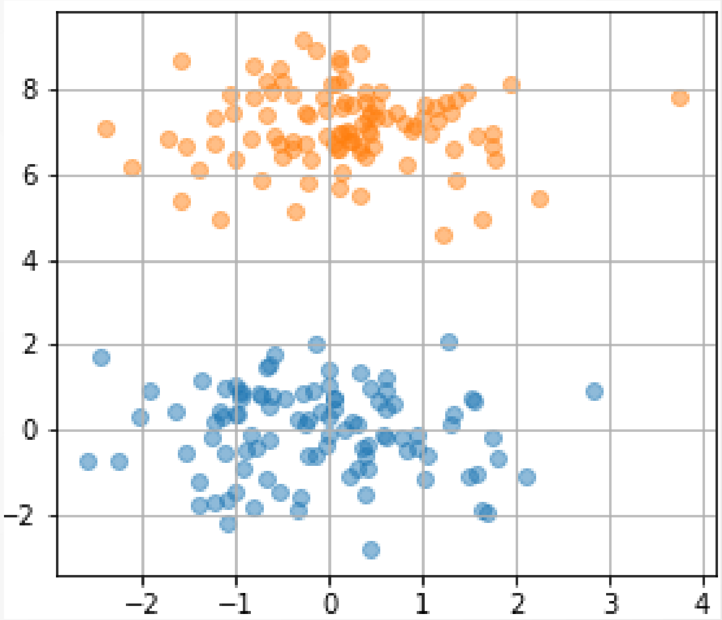
метрические методы : регрессия

классификация - задача разделения объектов на классы

$X \subset \mathbb{R}^n$ - объекты

$Y \in \{0, 1\}$ - метки классов

$a : X \to Y$



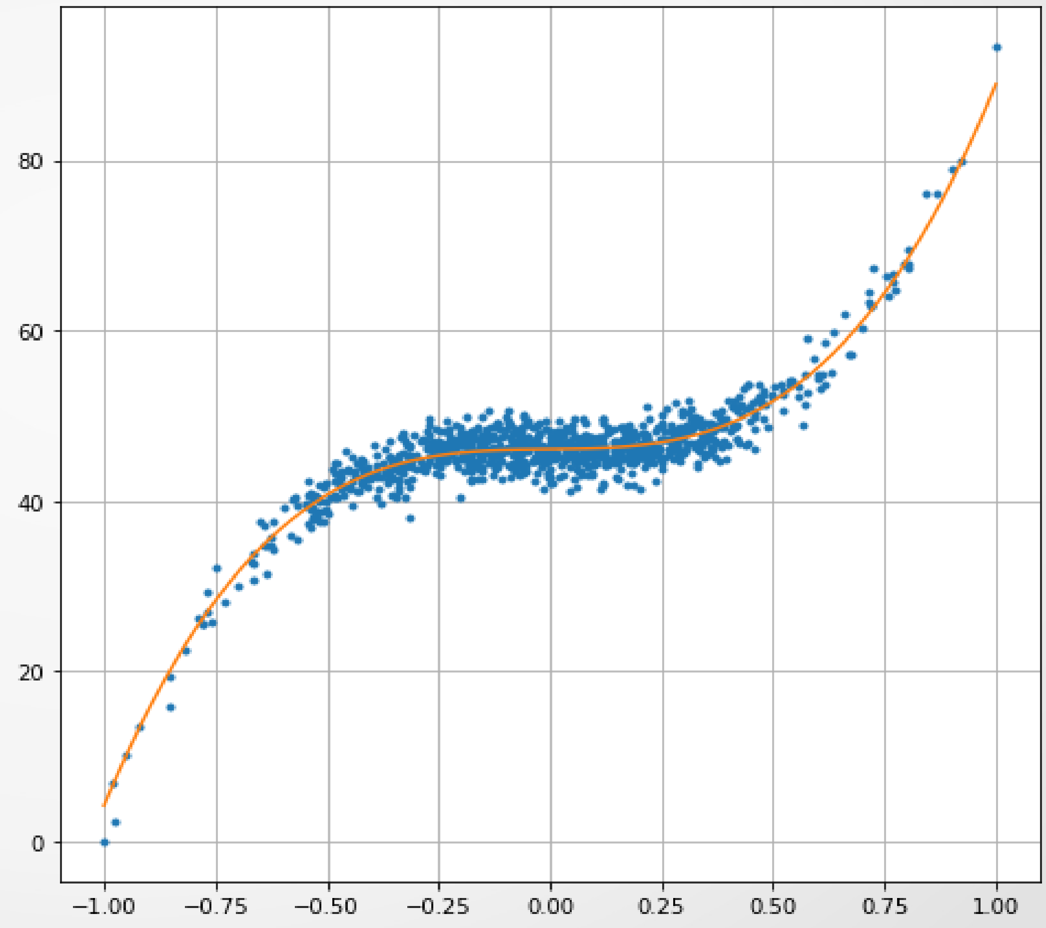
метрические методы : регрессия

<u>регрессия</u>-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

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

Примеры:

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

метрические методы : регрессия

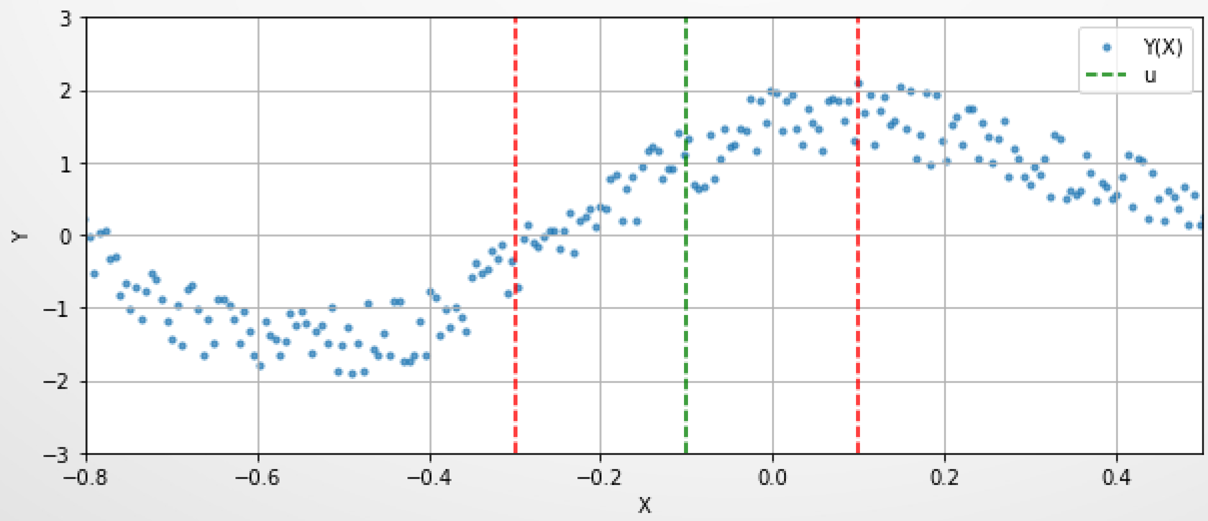
регрессия - задача восстановления зависимости

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

НЕпараметрический подход: приближение θ в окрестности точки u

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

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



метрические методы : регрессия

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 u

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

$$w_i(u, x_i) = K\left(\frac{\rho(u, x_i)}{h}\right)$$ - 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 ...

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

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

метрические методы : регрессия

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

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

оптимизируем Q ...

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

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

... получаем
<u>формулу Надарая-Ватсона</u>

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

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

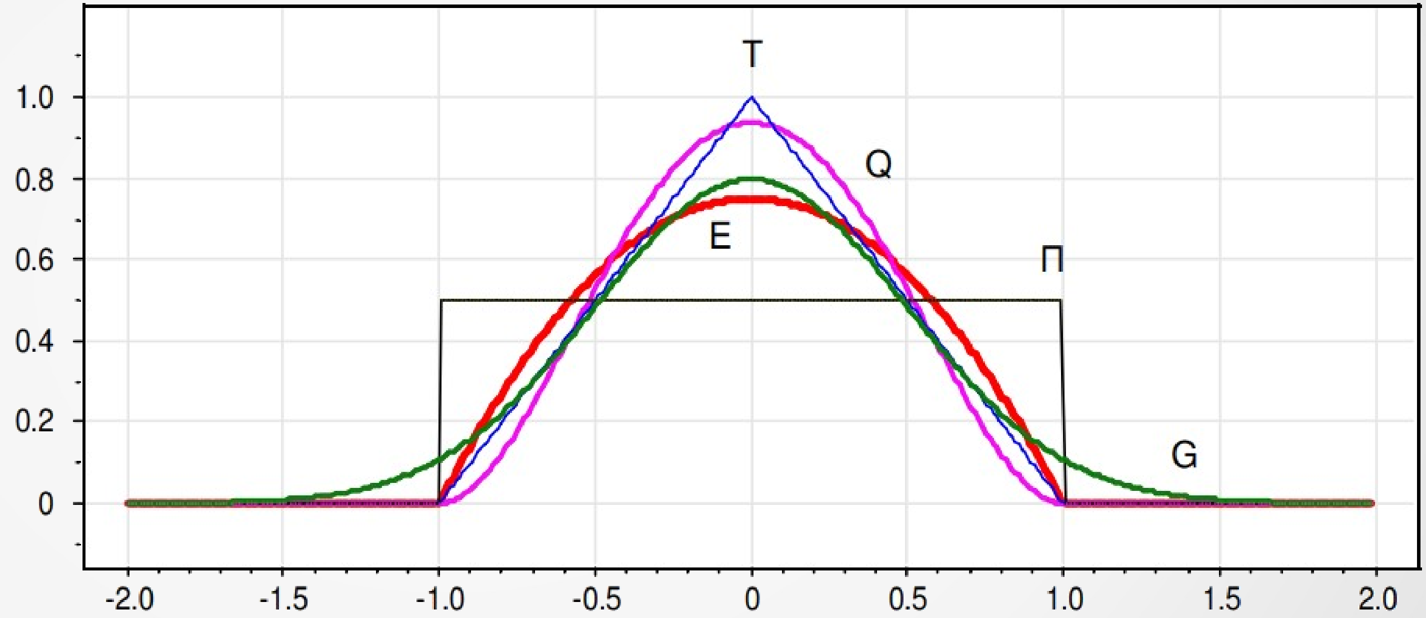
K(r) - функция ядра

h - параметр ширина окна сглаживания

метрические методы : регрессия

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

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

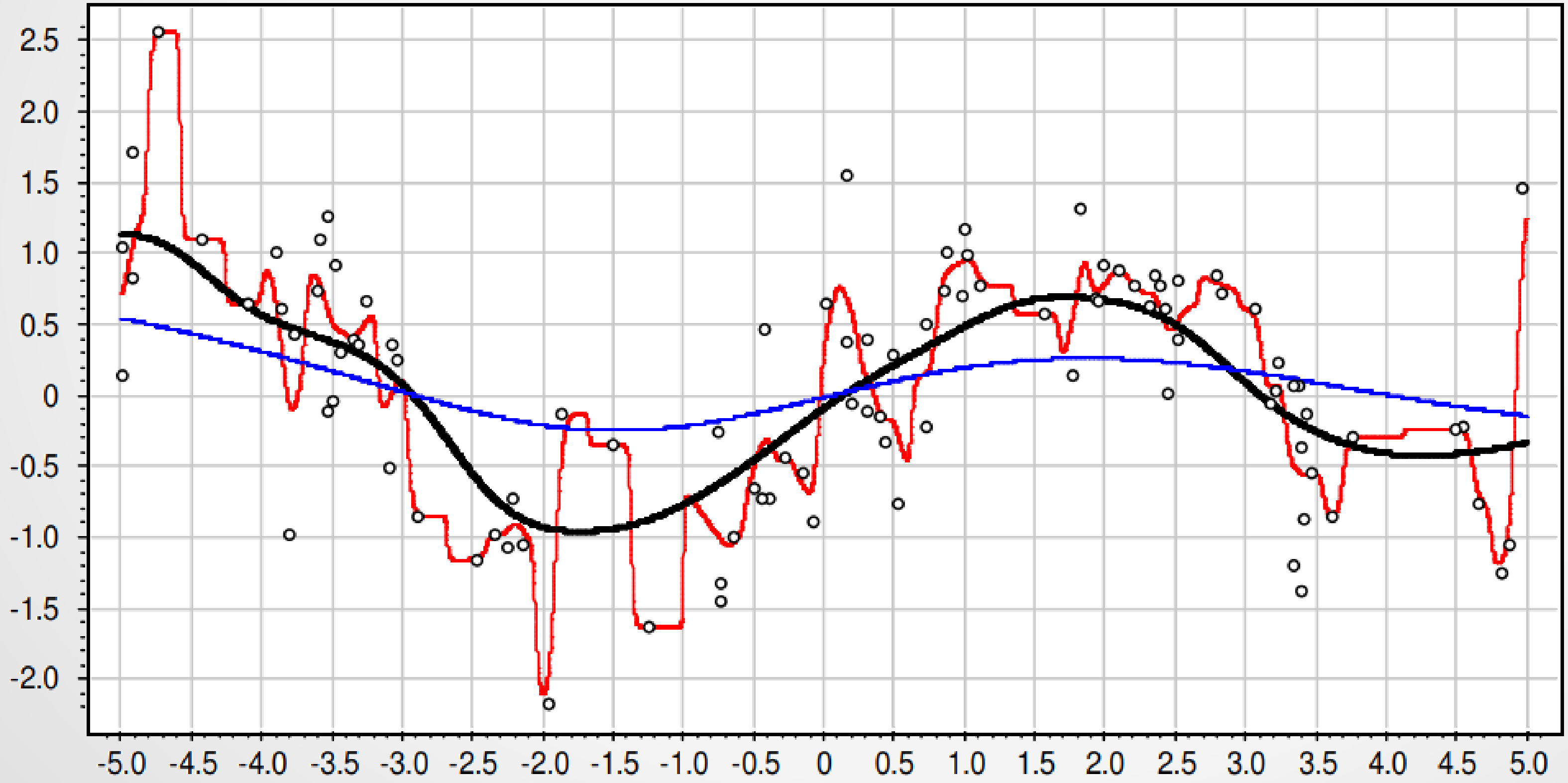
гауссово

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

метрические методы : регрессия

выбор ядра и ширины окна сглаживания

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



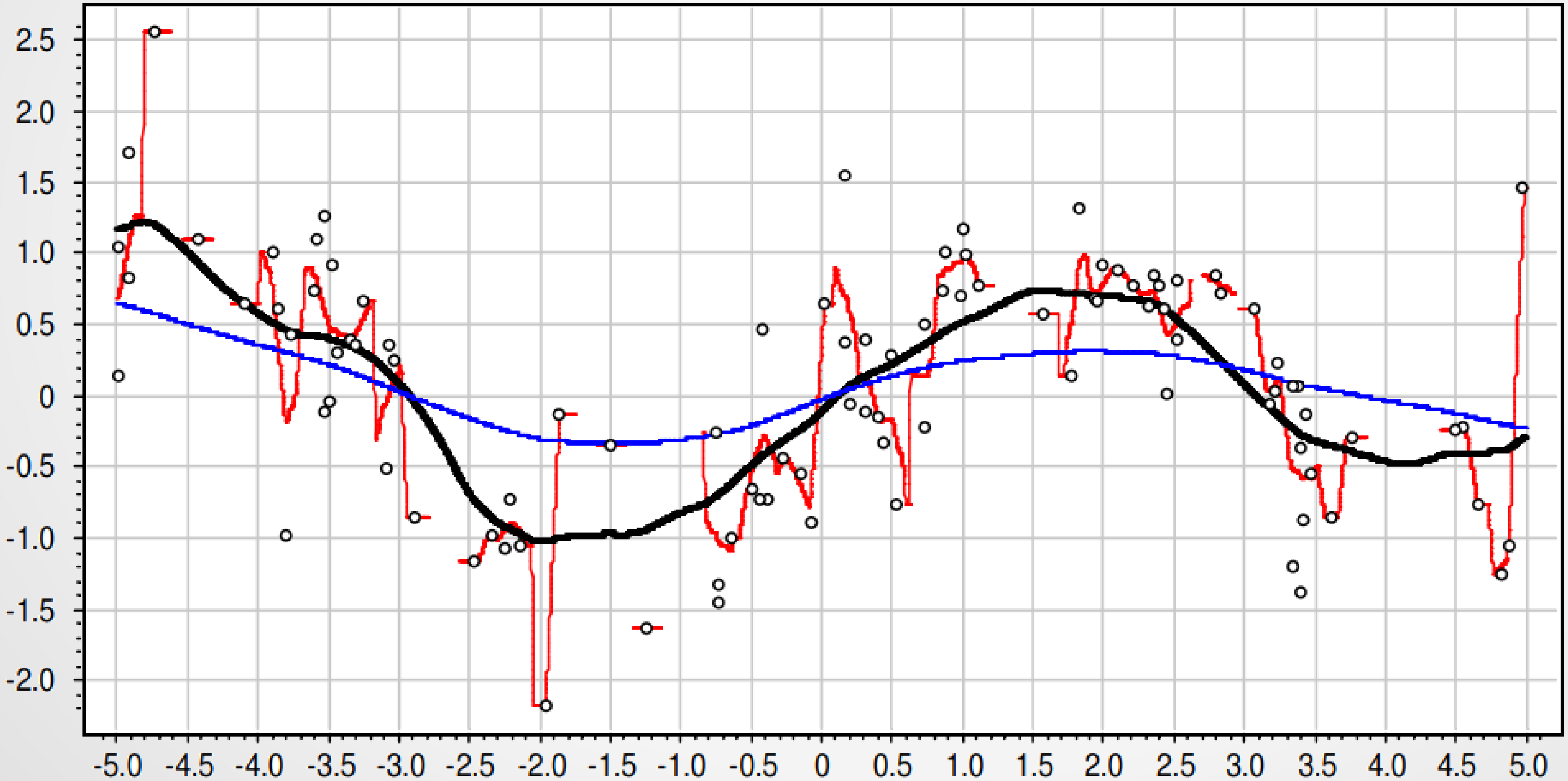
Гауссовское ядро $\Rightarrow$ гладкая аппроксимация

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



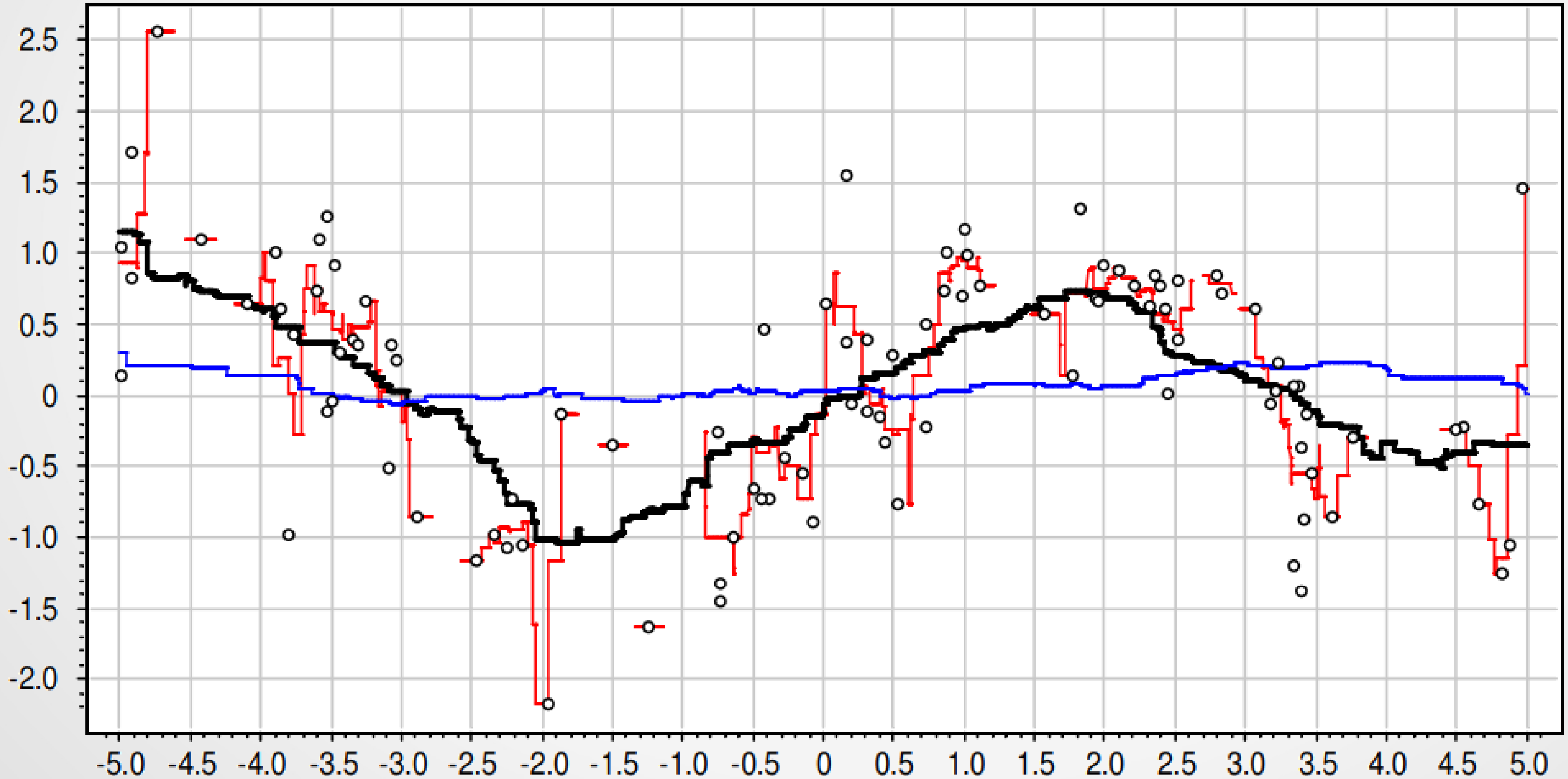
Треугольное ядро $\Rightarrow$ кусочно-линейная аппроксимация

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



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

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

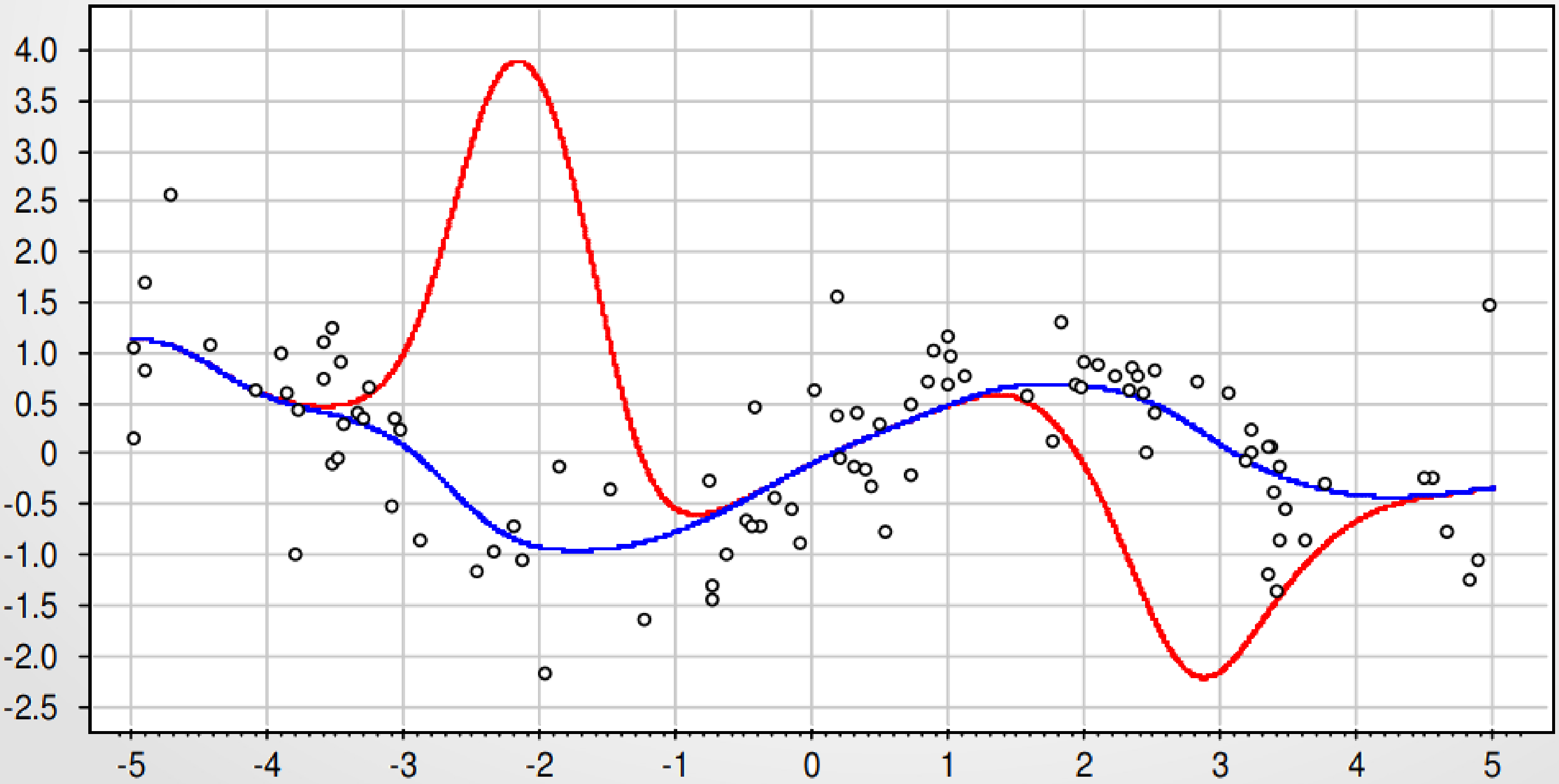
метрические методы : регрессия

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

$\gamma_i = \tilde{K}(\varepsilon_i)$ - 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 $\gamma_i := 1; i=1,\ldots m$

2. вычисляем оценку скользящего контроля

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

3. пересчитываем корректирующие коэффициенты

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

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

Литература

Борисов Е.С. Методы машинного обучения. 2024
https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium_2024_I

Машинное обучение для людей
https://vas3k.ru/blog/machine_learning/

Константин Воронцов - Машинное обучение. ШАД Яндекс
https://www.youtube.com/playlist?list=PLJOzdkh8T5kp99tGTEFjH_b9zqEQiiBtC

Константин Воронцов Машинное_обучение. курс_лекций.
http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Машинное_обучение_(курс_лекций,_К.В.Воронцов)

Радослав Нейчев - Машинное обучение, ФПМИ, 2020
https://www.youtube.com/playlist?list=PL4_hYwCyhAvZyW6qS58x4uElZgAkMVUvj