Статистический анализ данных. Спецкурс.

Лекция 6. Методы многомерной статистики

Ботанический сад-институт ДВО РАН

Кислов Д.Е.

11 декабря 2016 г.

Структура лекции

- Принцип наименьших квадратов;

Структура лекции

- Принцип наименьших квадратов;
- Метод главных компонент;

Структура лекции

- Принцип наименьших квадратов;
- Метод главных компонент;
- Линейный дискриминантный анализ;

Структура лекции

- Принцип наименьших квадратов;
- Метод главных компонент;
- Линейный дискриминантный анализ;
- Классификация по прецедентам;

Структура лекции

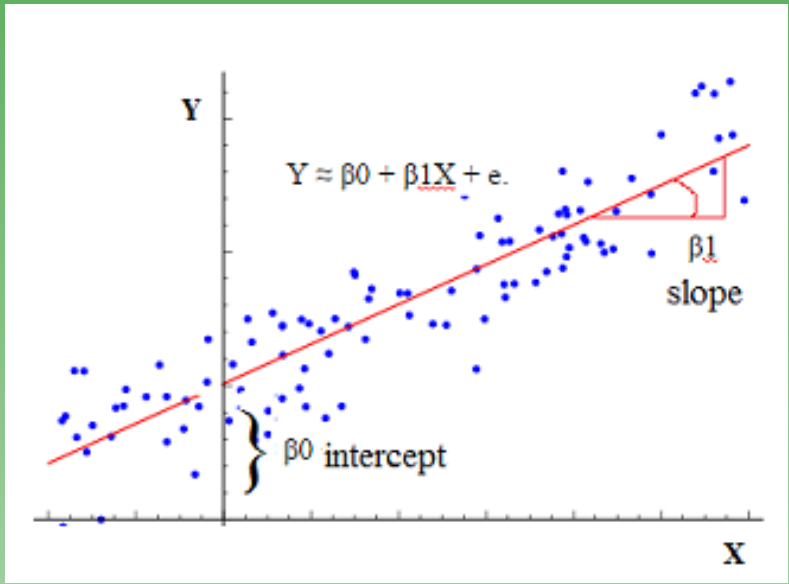
- Принцип наименьших квадратов;
- Метод главных компонент;
- Линейный дискриминантный анализ;
- Классификация по прецедентам;
- Оценка качества классификации, отбор признаков.

Принцип наименьших квадратов

Предложен К.Ф. Гауссом (1795) для решения уравнений:

$$a_1x + b_1y = c_1$$
$$a_2x + b_2y = c_2$$
$$a_3x + b_3y = c_3$$

Задача регрессии

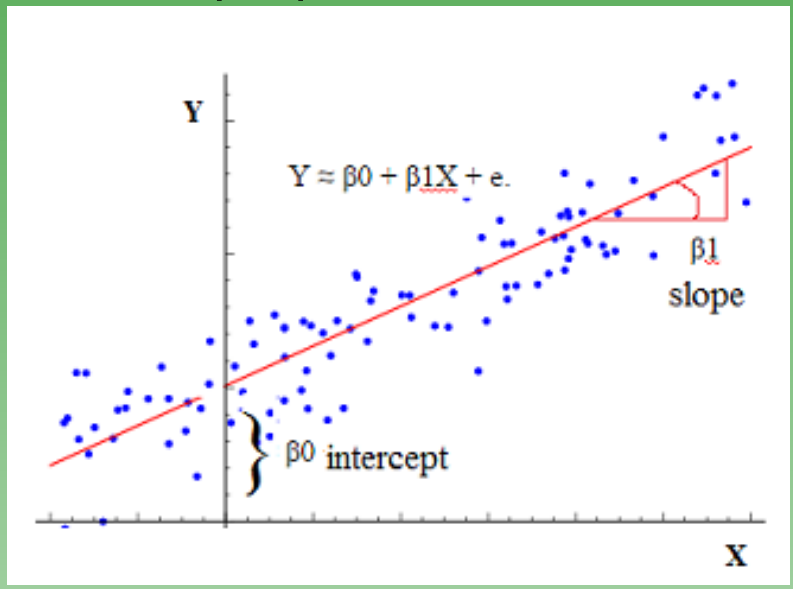


Принцип наименьших квадратов

Предложен К.Ф. Гауссом (1795) для решения уравнений:

$$
\begin{aligned}
a_1x + b_1y &= c_1 + \varepsilon_1 \\
a_2x + b_2y &= c_2 + \varepsilon_2 \\
a_3x + b_3y &= c_3 + \varepsilon_3 \\
\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 &\to \min
\end{aligned}
$$

Задача регрессии



Принцип наименьших квадратов

Применение

- Решение переопределенных/недоопределенных систем уравнений;

Принцип наименьших квадратов

Применение

- Решение переопределенных/недоопределенных систем уравнений;
- Статистическая оценка параметров;

Принцип наименьших квадратов

Применение

- Решение переопределенных/недоопределенных систем уравнений;
- Статистическая оценка параметров;
- Решение задач снижения размерности;

Принцип наименьших квадратов

Применение

- Решение переопределенных/недоопределенных систем уравнений;
- Статистическая оценка параметров;
- Решение задач снижения размерности;
- Построение регрессионных моделей;

Принцип наименьших квадратов

Применение

- Решение переопределенных/недоопределенных систем уравнений;
- Статистическая оценка параметров;
- Решение задач снижения размерности;
- Построение регрессионных моделей;
- . . . в общем случае — любые другие задачи, связанные с минимизацией ошибок/погрешностей.

Принцип наименьших квадратов

Задача регрессии

Имеется набор измерений y_j $(j = \overline{1, \ldots, N}$, предположительно зависящий от параметров x_{ij} $(i = \overline{1, \ldots, M})$. Необходимо построить какую-либо модель этой зависимости, исходя из набора эмпирических данных.

Принцип наименьших квадратов

Задача регрессии

Имеется набор измерений y_j $(j = \overline{1, \ldots, N}$, предположительно зависящий от параметров x_{ij} $(i = \overline{1, \ldots, M})$. Необходимо построить какую-либо модель этой зависимости, исходя из набора эмпирических данных.

Положим,что зависимость между y_i и x_{ij} линейная

Принцип наименьших квадратов

Задача регрессии

Имеется набор измерений y_j $(j = \overline{1, \ldots, N}$, предположительно зависящий от параметров x_{ij} $(i = \overline{1, \ldots, M})$. Необходимо построить какую-либо модель этой зависимости, исходя из набора эмпирических данных.

Положим,что зависимость между y_i и x_{ij} линейная

$$
\begin{aligned}
y_1 &= a_0 + a_1 \cdot x_{11} + a_2 \cdot x_{21} + \ldots + a_M \cdot x_{M1} \\
y_2 &= a_0 + a_1 \cdot x_{12} + a_2 \cdot x_{22} + \ldots + a_M \cdot x_{M2} \\
&\vdots \\
y_N &= a_0 + a_1 \cdot x_{1N} + a_2 \cdot x_{2N} + \ldots + a_M \cdot x_{MN}
\end{aligned}
$$

Принцип наименьших квадратов

Задача регрессии

Имеется набор измерений y_j $(j = \overline{1, \ldots, N}$, предположительно зависящий от параметров x_{ij} $(i = \overline{1, \ldots, M})$. Необходимо построить какую-либо модель этой зависимости, исходя из набора эмпирических данных.

Положим,что зависимость между y_i и x_{ij} линейная

$$
\begin{aligned}
y_1 &= a_0 + a_1 \cdot x_{11} + a_2 \cdot x_{21} + \ldots + a_M \cdot x_{M1} + \varepsilon_1 \\
y_2 &= a_0 + a_1 \cdot x_{12} + a_2 \cdot x_{22} + \ldots + a_M \cdot x_{M2} + \varepsilon_2 \\
&\vdots \\
y_N &= a_0 + a_1 \cdot x_{1N} + a_2 \cdot x_{2N} + \ldots + a_M \cdot x_{MN} + \varepsilon_N
\end{aligned}
$$

$$
\sum_i \varepsilon_i^2 \to \min
$$

Принцип наименьших квадратов

Решение

$$Y = X \cdot a + \varepsilon, a = (a_0, a_1, \ldots, a_M),$$
$$a = (X^T X)^{-1} XY, \text{или } a = X^+ Y$$

Нелинейный МНК

$$y_j = F(a_i, x_{ij}) + \varepsilon_j$$

Принцип наименьших квадратов

Решение

$$Y = X \cdot a + \varepsilon, a = (a_0, a_1, \ldots, a_M),$$
$$a = (X^T X)^{-1} XY, \text{или } a = X^+ Y$$

Нелинейный МНК

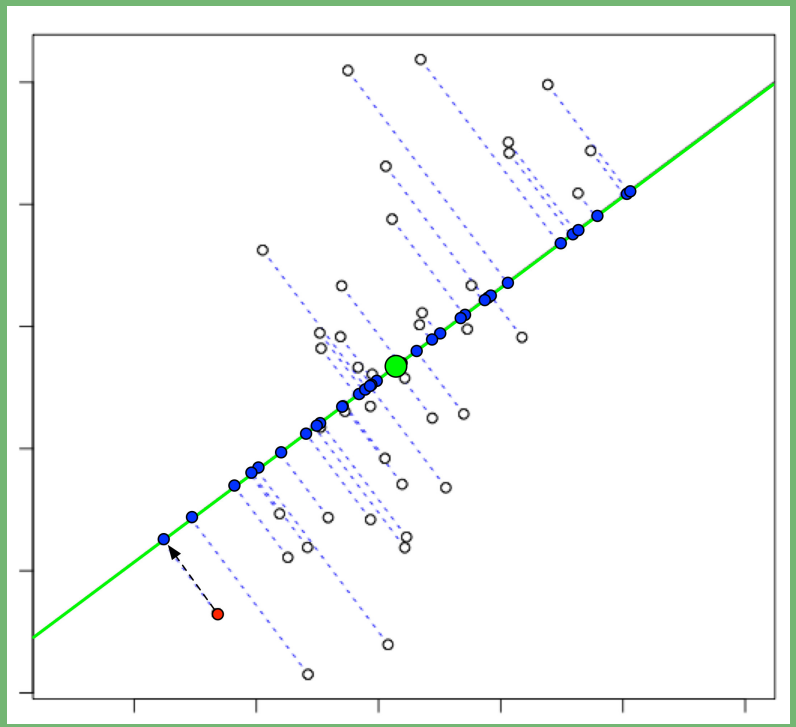
$$y_j = F(a_i, x_{ij}) + \varepsilon_j$$

Решение

Как правило – численные методы: нелинейные методы оптимизации, проблемно-ориентированные подходы.
А также . . . Существуют частные случаи – легко приводимые к линейной задаче.

Метод главных компонент

Формулировка задачи



Отыскать такую ось – линейную комбинацию исходных координат, сумма квадратов расстояний от данных до которой минимальна;
(метод предложен К. Пирсоном);

Метод главных компонент

Интерпретации

- Теория вероятностей – диагонализация ковариационной матрицы (преобразование Хотеллинга);

Метод главных компонент

Интерпретации

- Теория вероятностей – диагонализация ковариационной матрицы (преобразование Хотеллинга);
- Статистика – максимизация вариации (дисперсии) проекций данных на прямую;

Метод главных компонент

Интерпретации

- Теория вероятностей – диагонализация ковариационной матрицы (преобразование Хотеллинга);
- Статистика – максимизация вариации (дисперсии) проекций данных на прямую;
- Механика – отыскание главных осей инерции;

Метод главных компонент

Вычислительные аспекты

Пусть X — исходная матрица данных (имеющих нулевое среднее); $S = \frac{1}{N-1} X^T X$ – выборочная ковариационная матрица. Тогда решение задачи отыскания главных компонент определяется ее спектральным разложением

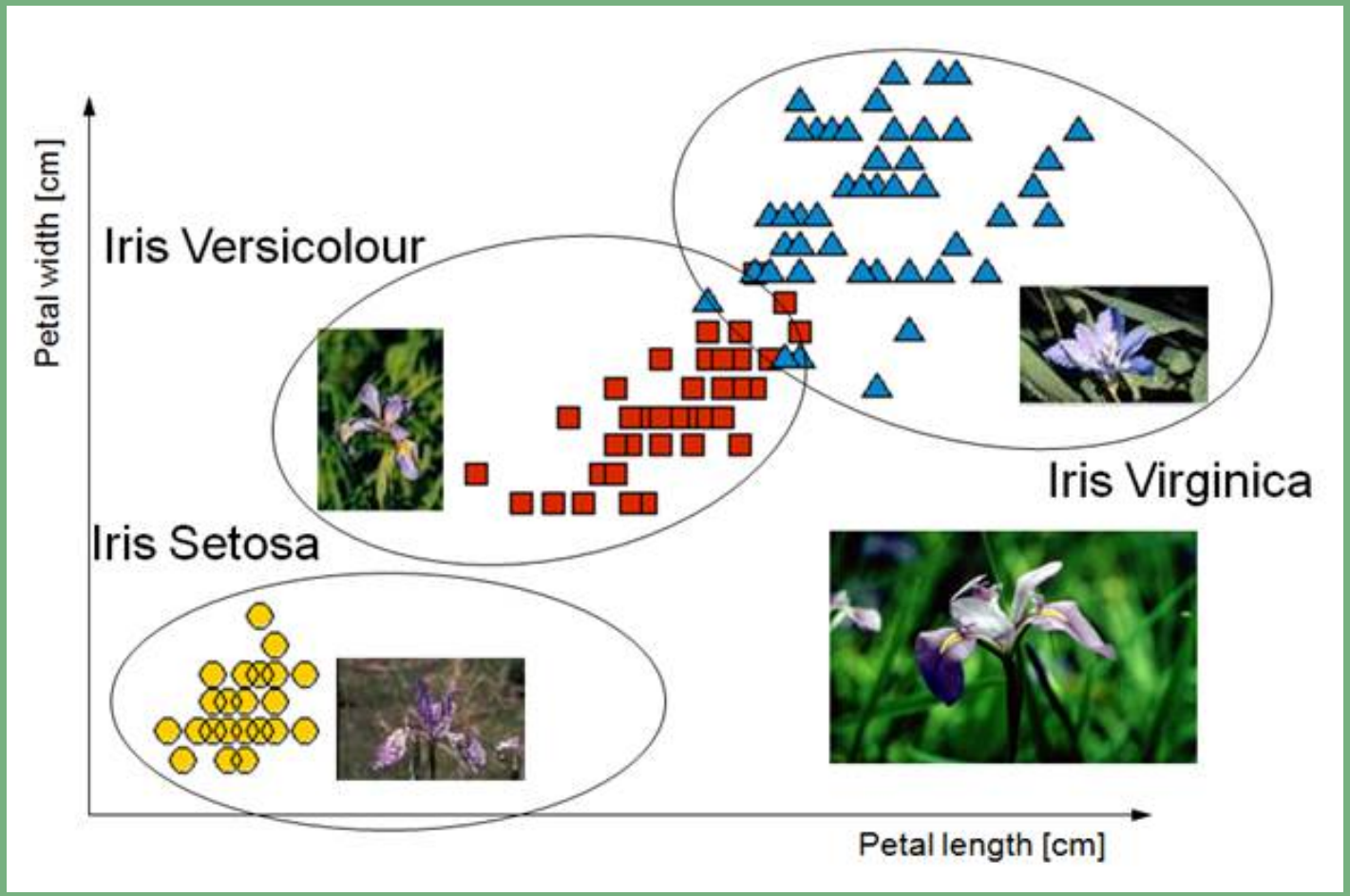
$$S = U^T \cdot \Sigma U,$$

где U – ортогональная матрица; $\Sigma = (\lambda_1, \ldots, \lambda_2)$.

$$tr(\Sigma) = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \ldots + \sigma_m^2$$
$$\mu_k = \frac{\lambda_1 + \ldots + \lambda_k}{\sum\limits_i \lambda_i}$$

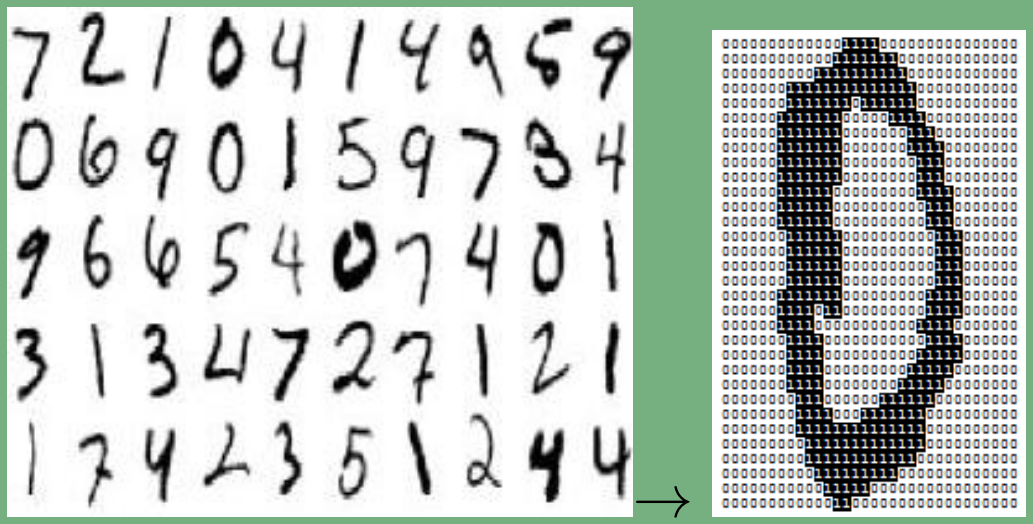
Классификация по прецедентам

Формулировка задачи на примере классификации ирисов



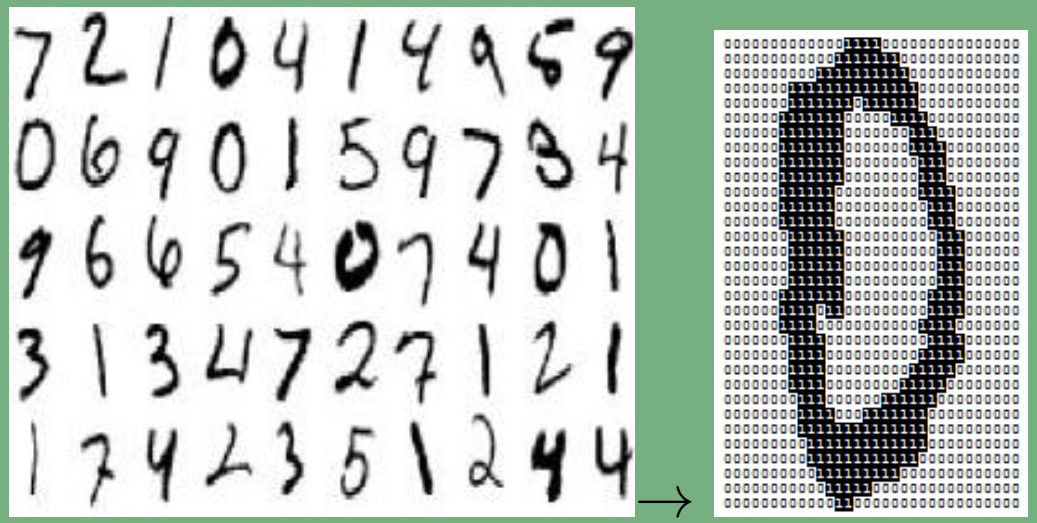
Классификация по прецедентам

Формулировка задачи на примере классификации рукописных цифр



Классификация по прецедентам

Формулировка задачи на примере классификации рукописных цифр



!

Реальные задачи распознавания образов могут иметь очень большие размерности.

Основные этапы решения задач классификации по прецедентам

- Подготовка данных: приведение к единому масштабу (при необходимости), центрирование, удаление выбросов и т.п.

Основные этапы решения задач классификации по прецедентам

- Подготовка данных: приведение к единому масштабу (при необходимости), центрирование, удаление выбросов и т.п.
- Отбор и формирование переменных (features engeneering, features extraction, features selection);

Основные этапы решения задач классификации по прецедентам

- Подготовка данных: приведение к единому масштабу (при необходимости), центрирование, удаление выбросов и т.п.
- Отбор и формирование переменных (features engeneering, features extraction, features selection);
- Выбор классификатора и подстройка его параметров;

Основные этапы решения задач классификации по прецедентам

- Подготовка данных: приведение к единому масштабу (при необходимости), центрирование, удаление выбросов и т.п.
- Отбор и формирование переменных (features engeneering, features extraction, features selection);
- Выбор классификатора и подстройка его параметров;
- Тестирование классификатора (при необходимости – повторение операций с п. 2).

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;
- Линейная и квадратичная дискриминация;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;
- Линейная и квадратичная дискриминация;
- Деревья решений;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;
- Линейная и квадратичная дискриминация;
- Деревья решений;
- Машины опорных векторов;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;
- Линейная и квадратичная дискриминация;
- Деревья решений;
- Машины опорных векторов;
- Нейросетевые классификаторы;

Методы решения задач классификации

- Наивный Байесовский классификатор;
- Метод k-ближайших соседей;
- Линейная и квадратичная дискриминация;
- Деревья решений;
- Машины опорных векторов;
- Нейросетевые классификаторы;
- Комбинирование классификаторов;