Задачи по машинному обучению

составитель: **Н. Ю. Золотых**

Нижний Новгород
2013, 2017

Содержание

1. Метод наименьших квадратов

Пример 1. По обучающей выборке

x	-1	0	0	1	2
y	1	-2	1	7	8

методом наименьших квадратов построить модель вида $f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$.

Решение: Составляем матрицу $\mathbf{X}$ и вектор $\mathbf{y}$:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 7 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

Имеем

$$\mathbf{X}^\top\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{X}^\top\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 15 \\ 22 \\ 40 \end{pmatrix}.$$

Решая систему нормальных уравнений $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\beta = \mathbf{X}^\top\mathbf{y}$, находим

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Таким образом, нашли модель $1 + 2x + x^2$ (синяя линия на графике).

Пример 2. Построить модель того же вида методом ридж-регрессии с параметром регуляризации $\lambda = 2$.

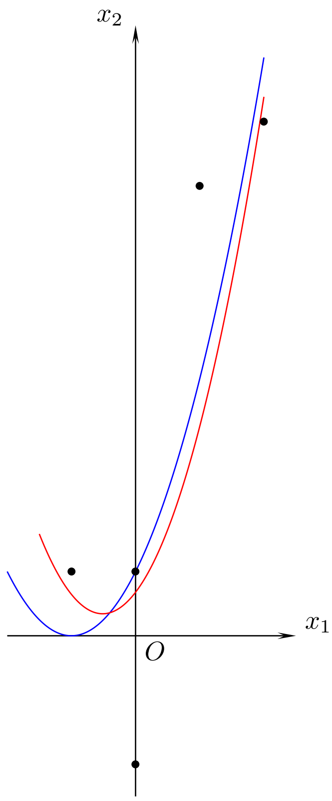
Решение: Для $\lambda = 2$ получаем

$$\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 7 & 2 & 6 \\ 2 & 8 & 8 \\ 6 & 8 & 20 \end{pmatrix}.$$

Решая регуляризованную систему нормальных уравнений $(\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I})\beta = \mathbf{X}^\top\mathbf{y}$, находим

$$\beta = \begin{pmatrix} 21/31 \\ 81/62 \\ 79/62 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, нашли модель $\dfrac{21}{31} + \dfrac{81}{62}x + \dfrac{79}{62}x^2 = 0.6774 + 1.3065x + 1.2742x^2$ (красная линия на графике).



Задачи

1. Дана обучающая выборка

x	1	1	0	0	-1
y	4	4	0	2	6

1) изобразить точки;
2) методом наименьших квадратов построить модель вида $f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$; построить график этой функции;
3) построить модель того же вида методом ридж-регрессии с параметром регуляризации $\lambda = 1$; построить график этой функции.
Замечание: при ручных вычислениях по методу наименьших квадратов рекомендуется составить систему $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\beta = \mathbf{X}^\top\mathbf{y}$ и решить ее. Регуляризованная система: $(\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I})\beta = \mathbf{X}^\top\mathbf{y}$, где $\mathbf{I}$ — единичная матрица.

2. Рассмотрим задачу восстановления регрессии с квадратичной функции потерь $L(y', y) = (y' - y)^2$. Доказать, что если $f^*(x) = \underset{c}{\operatorname{argmin}}\, \mathsf{E}\left((Y - c)^2 \,|\, X = x\right)$, то $f^*(x) = \mathsf{E}\,(Y \,|\, X = x)$ (*регрессионная функция*). Чему тогда равен средний риск $R(f^*)$?

3. Рассмотрим задачу восстановления регрессии с функцией потерь $L(y', y) = |y' - y|$. Доказать, что минимум среднему риску доставляет при этом условная медиана $f(x) = \operatorname{median}(Y \,|\, X = x)$.

4. Рассмотрим задачу восстановления регрессии, в которой $\mathbf{y}$ распределен согласно нормальному закону $N(\mathbf{X}, \sigma^2\mathbf{I})$, а β имеет априорное распределение $N(0, \tau\mathbf{I})$. Найти апостериорное распределение для β. Доказать, что β^{ridge} есть его математическое ожидание. Найти связь между параметром регуляризации λ и дисперсиями τ, σ^2.

5. Показать, что процедура гребневой регрессии эквивалентна обычному методу наименьших квадратов, примененному к расширенным данным: к центрированной матрице $\mathbf{X}$ дописывается матрица $\sqrt{\lambda}\mathbf{I}$, к вектору $\mathbf{y}$ приписывается p нулей.

6. Показать, как (и объяснить почему) задачу квадратичного программирования в методе лассо

$$\widehat{\beta}^{\text{lasso}} = \operatorname*{argmin}_{\beta} \left\{ \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{d} x_{ij}\beta_j \right)^2 \right\},$$

при условии

$$\sum_{j=1}^{d} |\beta_j| \le s$$

можно свести к задаче квадратичного программирования с $2d+1$ неизвестными и $2d+1$ линейными ограничениями.

7. *Метод использования линейной регрессии в задаче классификации* заключается в следующем. Сопоставим каждому классу k вектор $(y_1, y_2, \ldots, y_K)$, в котором $y_k = 1$, а $y_i = 0$ при $i \neq k$. Собрав вместе индикаторные векторы объектов обучающей выборки, получим матрицу $\mathbf{Y}$ размера $N \times K$. Пусть $\mathbf{X}$ — матрица размера $N \times (d+1)$, первый столбец которой состоит из единиц, а последующие представляют собой векторы из обучающей выборки. Применяя метод наименьших квадратов одновременно к каждому столбцу матрицы $\mathbf{Y}$, получаем значения

$$\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top \mathbf{Y}.$$

Для каждого столбца $\mathbf{y}_k$ матрицы $\mathbf{Y}$ получим свой столбец коэффициентов $\widehat{\beta}_k$. Соберем их в матрицу $\widehat{\mathbf{B}}$ размера $(d+1) \times K$. Имеем

$$\widehat{\mathbf{B}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top \mathbf{Y}.$$

Объект x будем классифицировать согласно следующему правилу: Вычислим вектор-строку длины K

$$g(x) = (1, x)\,\widehat{\mathbf{B}}.$$

Отнесем x к классу

$$f(x) = \operatorname*{argmax}_{k} g_k(x).$$

Доказать, что

$$\sum_{k=1}^{K} g_k(x) = 1.$$

Доказать, что в случае $K = 2$ данный метод эквивалентен решению одной задачи восстановления регрессии. Какой?

2. Дискриминантный анализ

Пример 3. Дана обучающая выборка:

x_1	0	2	1	1	1	2	4	4	4	6
x_2	4	4	3	5	4	1	0	2	1	1
y	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1

1) Изобразить объекты обучающей выборки в пространстве признаков x_1, x_2;
2) с помощью линейного дискриминантного анализа для каждого класса построить дискриминантные функции и записать уравнение разделяющей поверхности; изобразить поверхность;
3) с помощью квадратичного дискриминантного анализа для каждого класса построить дискриминантные функци.

Решение: Оцениваем вероятности классов:

$$\widehat{\mathsf{Pr}}\,\{Y = 0\} = \frac{1}{2}, \qquad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{Y = 1\} = \frac{1}{2}.$$

Оцениваем средние для классов:

$$\widehat{\mu}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{\mu}_1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Выборочные матрицы ковариации для каждого класса:

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_0 = \frac{1}{N_0 - 1} \sum_{y^{(i)}=0} (x^{(i)} - \widehat{\mu}_0)(x^{(i)} - \widehat{\mu}_0)^\top = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_1 = \frac{1}{N_1 - 1} \sum_{y^{(i)}=1} (x^{(i)} - \widehat{\mu}_1)(x^{(i)} - \widehat{\mu}_1)^\top = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Оцениваем матрицу ковариации:

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}} = \frac{1}{N - K} \sum_k \sum_{y^{(i)}=k} (x^{(i)} - \widehat{\mu}_k)(x^{(i)} - \widehat{\mu}_k)^\top = \frac{1}{8} \left(\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/4 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Находим

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_0^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{\mathbf{\Sigma}}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} = \begin{pmatrix} 4/5 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Линейные дискриминантные функции:

$$\delta_0(x) = x^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} \widehat{\mu}_0 - \frac{1}{2} \widehat{\mu}_0^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} \widehat{\mu}_0 + \ln \widehat{\mathsf{Pr}} \{Y = 0\} = \frac{4}{5} x_1 + 8 x_2 - \frac{82}{5} - \ln 2,$$

$$\delta_1(x) = x^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} \widehat{\mu}_1 - \frac{1}{2} \widehat{\mu}_1^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} \widehat{\mu}_1 + \ln \widehat{\mathsf{Pr}} \{Y = 1\} = \frac{16}{5} x_1 + 2 x_2 - \frac{37}{5} - \ln 2.$$

Разделяющая поверхность — прямая с уравнением $\delta_0(x) = \delta_1(x)$ (красная прямая на графике):

$$4x_1 - 10x_2 + 15 = 0.$$

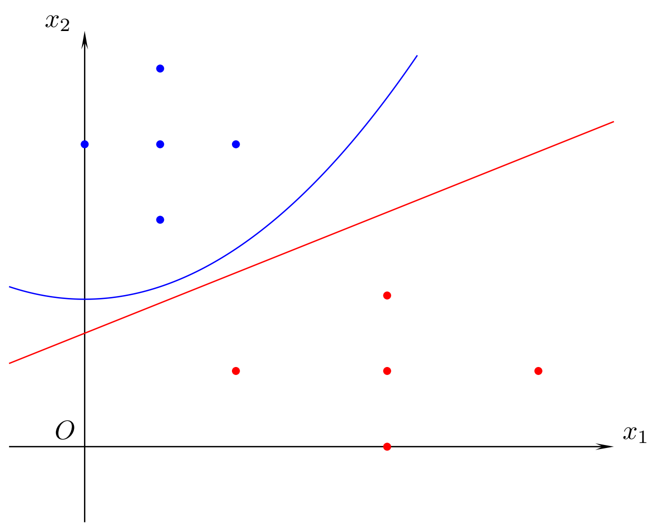
Квадратичные дискриминантные функции:

$$\delta_0(x) = -\frac{1}{2} \ln \det \widehat{\mathbf{\Sigma}}_0 - \frac{1}{2} (x - \widehat{\mu}_0)^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}_0^{-1} (x - \widehat{\mu}_0) + \ln \widehat{\mathsf{Pr}} \{Y = 0\} = -x_1^2 + 2x_1 - x_2^2 + 8x_2 - 17,$$

$$\delta_1(x) = -\frac{1}{2} \ln \det \widehat{\mathbf{\Sigma}}_1 - \frac{1}{2} (x - \widehat{\mu}_1)^\top \widehat{\mathbf{\Sigma}}_1^{-1} (x - \widehat{\mu}_1) + \ln \widehat{\mathsf{Pr}} \{Y = 1\} = -\frac{1}{4} x_1^2 + 2x_1 - x_2^2 + 2x_2 - 5 - \ln 2.$$

Разделяющая поверхность — парабола с уравнением (синяя кривая на графике)

$$\frac{3}{4} x_1^2 - 6x_2 + 12 - \ln 2 = 0.$$



Задачи

8. Дана обучающая выборка

x_1	0	1	0	2	2	2	4	3
x_2	-1	0	0	0	1	0	1	2
y	0	0	0	0	0	1	1	1

1) Методом линейного дискриминантного анализа для каждого класса построить дискриминантную функцию и записать уравнение разделяющей поверхности.
2) Методом квадратичного дискриминантного анализа построить дискриминантные функции.
   Изобразить точки и разделяющие поверхности (кривые).

9. Задача Фишера сводится к максимизации отношения Рэлея

$$\max_a \frac{a^\top \mathbf{B} a}{a^\top \mathbf{W} a}.$$

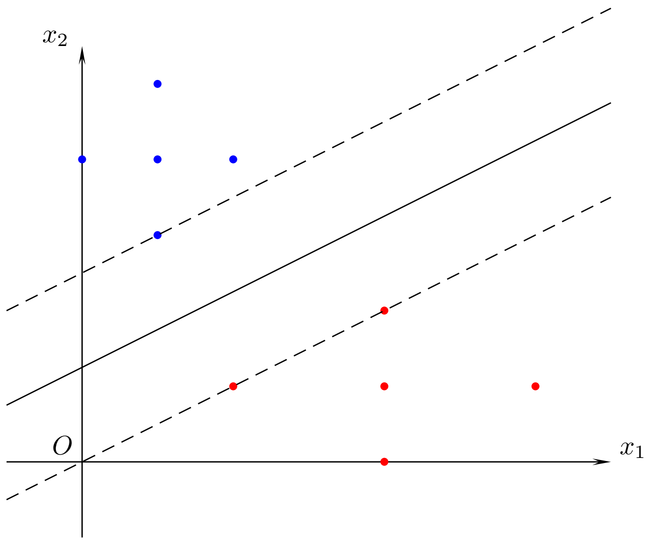
Показать, как эта задача сводится к обобщенной задаче на собственные значения

$$\mathbf{B}a = \lambda \mathbf{W}.$$

3. Машина опорных векторов

Пример 4. Для данных из предыдущего примера найти уравнение оптимальной разделяющей гиперплоскости, указать опорные точки.

Решение: В качестве двух возможных наборов кандидатур в опорные точки подходят $(1,3)$, $(2,1)$, $(4,2)$ или $(1,3)$, $(2,4)$, $(2,1)$. Среди этих двух наборов нужно выбрать тот, для которого ширина «разделяющего коридора» больше. Для первого набора этот коридор заключен между прямыми (они изображены на рисунке — штриховая малиновая линия) $x_1 - 2x_2 = 0$ и $x_1 - 2x_2 = -5$. Расстояние между прямыми, т. е. ширина коридора, есть $\sqrt{5}$. Для второго набора точек получаем коридор, ограниченный прямыми $x_1 - x_2 = 1$, $x_1 - x_2 = -2$. Его ширина равна ${}^3/\!\sqrt{2}$. Первый коридор шире, поэтому прямая $2x_1 - 4x_2 = -5$, проходящая через его центр, — оптимальная разделяющая, а точки $(1,3)$, $(2,1)$, $(4,2)$ — опорные.



Задачи

10. Показать, что оптимальная гиперплоскость, разделяющая два множества, является плоскостью, проходящей через середину отрезка, соединяющего пару ближайших точек из выпуклой оболочки каждого из классов, и перпендикулярно ему. Указание: рассмотреть задачу, двойственную к задаче определения оптимальной гиперплоскости.

11. Показать, что в алгоритме *SVM* задача

$$\min_{\beta,\,\beta_0,\,\xi_i} \frac{1}{2}\|\beta\|^2 + \gamma \sum_{i=1}^{N} \xi_i,$$

при ограничениях

$$y_i(x_i^\top \beta + \beta_0) \geq 1 - \xi_i, \quad \xi_i \geq 0 \quad (i = 1, 2, \ldots, N),$$

эквивалентна задаче

$$\min_{\beta,\,\beta_0} \sum_{i=1}^{N} \Big[1 - y_i \left(x_i^\top \beta + \beta_0\right)\Big]_+ + \alpha \|\beta\|^2,$$

где $[\cdot]_+$ означает положительную часть, и $\alpha = 1/(2\gamma)$.

12. *SVM и задача восстановления регрессии.* Для восстановления β, β_0 в модели $f(x) = x^\top \beta + \beta_0$. рассмотрим задачу минимизации функции

$$H(\beta, \beta_0) = \sum_{i=1}^{N} V\left(y_i - f(x_i)\right) + \frac{\alpha}{2}\|\beta\|^2,$$

где

$$V(t) = V_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0, & \text{если } |t| < \varepsilon, \\ |t| - \varepsilon & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Доказать, что решение $\widehat{\beta}$, $\widehat{\beta}_0$, минимизирующее функцию $H(\beta, \beta_0)$, можно представить в виде

$$\widehat{\beta} = \sum_{i=1}^{N} (\widehat{\alpha}_i^* - \widehat{\alpha}_i) x_i, \quad \widehat{f}(x) = \sum_{i=1}^{N} (\widehat{\alpha}_i^* - \widehat{\alpha}_i) \langle x, x_i \rangle + \beta_0,$$

где $\widehat{\alpha}_i$ и $\widehat{\alpha}_i^*$ являются решением следующей задачи квадратичного программирования:

$$\min_{\alpha_i,\,\alpha_i^*} \left(\varepsilon \sum_{i=1}^{N} (\alpha_i^* + \alpha_i) - \sum_{i=1}^{N} y_i (\alpha_i^* - \alpha_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} (\alpha_i^* - \alpha_i)(\alpha_j^* - \alpha_j) \langle x_i, x_j \rangle \right)$$

при ограничениях

$$0 \leq \alpha_i, \alpha_i^* \leq \frac{1}{\lambda}, \quad \sum_{i=1}^{N} (\alpha_i^* - \alpha_i) = 0, \quad \alpha_i \alpha_i^* = 0.$$

13. Дана обучающая выборка:

x_1	-1	-1	1	1
x_2	-1	1	-1	1
y	1	-1	-1	1

Подобрать ядро и указать соответствующий SVM-классификатор, для которого ошибка на обучающей выборке равна 0.

4. Наивный байесовский классификатор

Пример 5. Дана обучающая выборка:

x_1	1	0	0	0	1	0	1	1	1	0
x_2	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
y	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1

С помощью наивного байесова классификатора оценить апостериорные вероятности $\mathsf{Pr}\,(y\,|\,x)$, если (a) $x_1 = 1$, $x_2 = 0$; (b) $x_1 = 0$, $x_2 = 1$.

Оцениваем априорные вероятности:

$$\widehat{\mathsf{Pr}}\,\{Y=0\} = \frac{1}{2}, \qquad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{Y=1\} = \frac{1}{2}.$$

Оцениваем условные вероятности:

$$\widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_1=0\,|\,Y=0\} = \frac{3}{5}, \quad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_1=1\,|\,Y=0\} = \frac{2}{5}, \qquad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_1=0\,|\,Y=1\} = \frac{2}{5}, \quad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_1=1\,|\,Y=1\} = \frac{3}{5},$$

$$\widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_2=0\,|\,Y=0\} = \frac{1}{5}, \quad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_2=1\,|\,Y=0\} = \frac{4}{5}, \qquad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_2=0\,|\,Y=1\} = 1, \quad \widehat{\mathsf{Pr}}\,\{X_2=1\,|\,Y=1\} = 0.$$

Используя основное предположение наивного байесова классификатора, получаем

$$\mathsf{Pr}\,\{Y=0\,|\,X_1=1,X_2=0\} = \frac{\mathsf{Pr}\,\{X_1=1\,|\,Y=0\}\,\mathsf{Pr}\,\{X_2=0\,|\,Y=0\}\,\mathsf{Pr}\,\{Y=0\}}{\mathsf{Pr}\,\{X_1=1,\,X_2=0\}} \approx \frac{\frac{2}{5}\cdot\frac{1}{5}\cdot\frac{1}{2}}{\frac{1}{25}+\frac{3}{10}} = \frac{\frac{1}{25}}{\frac{17}{50}} = \frac{2}{17},$$

$$\mathsf{Pr}\,\{Y=1\,|\,X_1=1,X_2=0\} = \frac{\mathsf{Pr}\,\{X_1=1\,|\,Y=1\}\,\mathsf{Pr}\,\{X_2=0\,|\,Y=1\}\,\mathsf{Pr}\,\{Y=1\}}{\mathsf{Pr}\,\{X_1=1,\,X_2=0\}} \approx \frac{\frac{3}{5}\cdot 1\cdot\frac{1}{2}}{\frac{1}{25}+\frac{3}{10}} = \frac{\frac{3}{10}}{\frac{17}{50}} = \frac{15}{17}$$

(знаменатели в двух формулах выше равны сумме всех числителей и, следовательно окончательные оценки апостериорных вероятностей получаются после вычисления всех числителей).

$$\mathsf{Pr}\,\{Y=0\,|\,X_1=0,X_2=1\} = \frac{\mathsf{Pr}\,\{X_1=0\,|\,Y=0\}\,\mathsf{Pr}\,\{X_2=1\,|\,Y=0\}\,\mathsf{Pr}\,\{Y=0\}}{\mathsf{Pr}\,\{X_1=0,\,X_2=1\}} \approx \frac{\frac{3}{5}\cdot\frac{4}{5}\cdot\frac{1}{2}}{\frac{6}{25}+0} = \frac{\frac{6}{25}}{\frac{6}{25}} = 1,$$

$$\mathsf{Pr}\,\{Y=1\,|\,X_1=0,X_2=1\} = \frac{\mathsf{Pr}\,\{X_1=0\,|\,Y=1\}\,\mathsf{Pr}\,\{X_2=1\,|\,Y=1\}\,\mathsf{Pr}\,\{Y=1\}}{\mathsf{Pr}\,\{X_1=0,\,X_2=1\}} \approx \frac{\frac{2}{5}\cdot 0\cdot\frac{1}{2}}{\frac{6}{25}+0} = \frac{0}{\frac{6}{25}} = 0.$$

Задачи

14. Дана обучающая выборка

x_1	0	0	1	1	0	0	1	1	1	0
x_2	0	1	0	1	1	1	1	1	1	1
y	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1

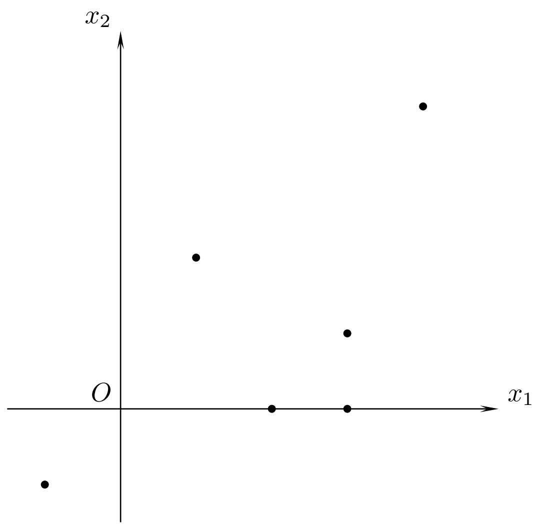
С помощью наивного байесова классификатора оценить вероятности $\mathsf{Pr}(Y=0\,|\,X_1=1,\ X_2=1)$; $\mathsf{Pr}(Y=1\,|\,X_1=1,\ X_2=1)$.

5. Метод главных компонент

Пример 6. Дана выборка:

x_1	4	−1	3	3	2	1
x_2	4	−1	0	1	0	2

Найти главные направления и объясненные дисперсии по главным компонентам.



Решение: Имеем

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 4 & 4 \\ -1 & -1 \\ 3 & 0 \\ 3 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

1 шаг. Центрируем данные. Находим $\overline{x} = (2, 1)$. Вычитая компоненты $\overline{x}$ из первого и второго столбца матрицы $\mathbf{X}$ соответственно, получаем

$$\mathbf{X}_{\text{c}} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -3 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

2 шаг. Находим

$$\mathbf{C} = \mathbf{X}_{\text{c}}^{\top}\mathbf{X}_{\text{c}} = \begin{pmatrix} 16 & 10 \\ 10 & 16 \end{pmatrix}.$$

Матрица

$$\frac{1}{N-1}\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 16/5 & 2 \\ 2 & 16/5 \end{pmatrix}.$$

— это выборочная матрица ковариации.

3 шаг. Находим собственные числа и собственные векторы матрицы $\mathbf{C}$:

$$\det(\mathbf{C} - \lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} 16-\lambda & 10 \\ 10 & 16-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 32\lambda + 156 = (\lambda - 26)(\lambda - 6).$$

Собственные векторы нормируем:

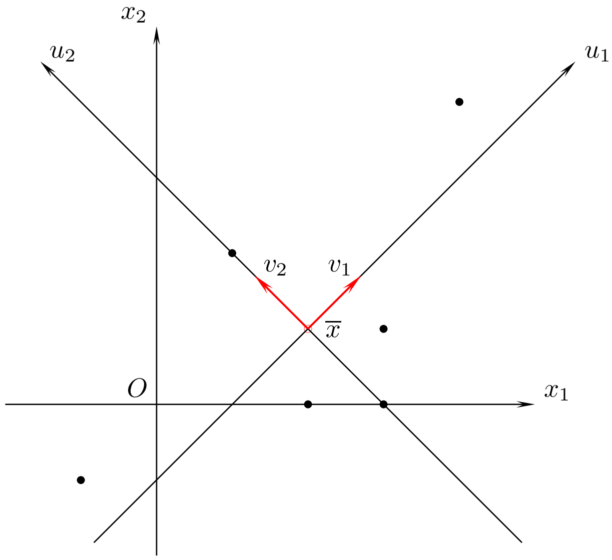
$$\lambda_1 = 26, \quad v_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_2 = 6, \quad v_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Векторы v_1, v_2 — главные компоненты. Значения

$$\frac{1}{N-1}\lambda_1 = \frac{1}{N-1}\sigma_1^2 = \frac{26}{5} = 5.2, \qquad \frac{1}{N-1}\lambda_2 = \frac{1}{N-1}\sigma_2^2 = \frac{6}{5} = 1.2$$

— дисперсии по главным компонентам. Находим доли объясненной дисперсии:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} = 0.8125, \qquad \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} = 0.1875.$$



Найдем сингулярное разложение матрицы $\mathbf{X}_c = \mathbf{U\Sigma V}^\top$:

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{26} & 0 \\ 0 & \sqrt{6} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{V} = (v_1 \mid v_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U\Sigma} = \mathbf{X}_c\mathbf{V} = \begin{pmatrix} 5\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -5\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 3.5355 & 0.7071 \\ -3.5355 & 0.7071 \\ 0 & -1.4142 \\ 0.7071 & -0.7071 \\ -0.7071 & -0.7071 \\ 0 & 1.4142 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{X}_c\mathbf{V\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} 5\sqrt{13}/26 & \sqrt{3}/6 \\ -5\sqrt{13}/26 & \sqrt{3}/6 \\ 0 & -\sqrt{3}/3 \\ \sqrt{13}/26 & -\sqrt{3}/6 \\ -\sqrt{13}/26 & -\sqrt{3}/6 \\ 0 & \sqrt{3}/3 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.6934 & 0.2887 \\ -0.6934 & 0.2887 \\ 0 & -0.5774 \\ 0.1387 & -0.2887 \\ -0.1387 & -0.2887 \\ 0 & 0.5774 \end{pmatrix}.$$

Напомним, что

- в матрице *нагрузок* (loadings) $\mathbf{V}$ по столбцам записаны координаты векторов главных компонент v_1, v_2;
- в матрице *счетов*, или *результатов*, (scores) $\mathbf{U\Sigma}$ по строкам — координаты проекций точек на главные компоненты;
- в матрице *Z-счетов*, или *Z-результатов*, (z-scores) $\mathbf{U}$ по строкам — координаты проекций точек на главные компоненты, нормированные на единичные выборочные дисперсии.

Задачи

15. Дана выборка:

x_1	4	0	−2	2
x_2	3	1	−3	−1

Найти главные направления и дисперсии по главным компонентам. Изобразить точки и главные направления.

16. Дана выборка:

x_1	4	0	−1	3	4
x_2	2	−3	−2	1	2
x_3	3	2	2	1	−3

Найти главные направления и дисперсии по главным компонентам.

6. Теория Вапника–Червоненкиса

17. Пусть $Z_1, Z_2, \ldots, Z_N$ — независимые одинаково распределенные случайные величины.

$$\mathsf{Pr}(Z_i = 1) = \theta, \qquad \mathsf{Pr}(Z_i = 0) = 1 - \theta$$

(схема Бернулли). Доказать, что

$$\mathsf{Pr}(|\widehat{\theta} - \theta| > \gamma) \leq 2e^{-2\gamma^2 N},$$

где

$$\widehat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} Z_i.$$

18. Доказать, что если $\mathcal{F}$ конечно, то $\mathrm{VC}\,\mathcal{F} \leq \log_2 |\mathcal{F}|$. Для каждого d построить пример $\mathcal{F}$, на котором эта оценка достигается.

19. Доказать, что при $h \leq N$

$$\binom{N}{0} + \binom{N}{1} + \cdots + \binom{N}{h} < \left(\frac{eN}{h}\right)^h.$$

20. Пусть $\mathcal{X}$ — подмножество в $\mathbf{R}^d$, а $\mathcal{F}$ — некоторое множество функций, отображающих $\mathcal{X}$ в $\{0,1\}$. Введем класс $\mathcal{F}' = \{f \vee g :\ f, g \in \mathcal{F}\}$, состоящий из дизъюнкций каждой пары функций в $\mathcal{F}$. Доказать, что для функции роста класса $\mathcal{F}'$ справедливо неравенство $\Delta(\mathcal{F}', N) \leq \Delta(\mathcal{F}, N)^2$. Воспользовавшись леммой Зауэра, доказать, что $\mathrm{VC}\,\mathcal{F}' \leq 10\,\mathrm{VC}\,\mathcal{F}$. Что изменится, если вместо лизънкций рассмотреть (а) все конъюнкции, (б) суммы по модулю 2?

21. Функцию $f :\ \mathbf{R}^d \to \{0,1\}$ назовем *ящиком*, если существуют вещественые числа $a_1, a_2, \ldots, a_d$, $b_1, b_2, \ldots, b_d$, такие, что $f(x) = 1$ тогда и только тогда, когда $a_i \leq x \leq b_i$ $(i = 1, 2, \ldots, d)$. Найти функцию роста и размерность Вапника–Червоненкиса для класса всех ящиков. Проиллюстрировать на этом примере лемму Зауэра.

22. Пусть T_h — множество всех функций $f :\ \mathbf{R}^d \to \{0,1\}$, вычисляемых бинарными деревьями решений, высоты не выше h. Найти функцию роста и размерность Вапника–Червоненкиса для класса T_h. Проиллюстрировать на этом примере лемму Зауэра.

23. Пусть H_d — множество всех булевых функций $f :\ \{0,1\}^d \to \{0,1\}$, представимых ДНФ, в которых каждая элементарная конъюнкиция представляет собой одиночный символ, обозначающий переменную (без отрицания). Найти функцию роста и размерность Вапника–Червоненкиса для класса H_d. Проиллюстрировать на этом примере лемму Зауэра.

24. Функцию $f :\ \mathbf{R}^2 \to \{0,1\}$ назовем полигоном (точнее: k-вершинным полигоном), если найдется выпуклый k-угольник M, такой, что $f(x) = 1$ тогда и только тогда, когда x принадлежит M. Пусть P — множество всех полигонов, а P_k — множество всех k-вершинных полигонов. Найти $\mathrm{VC}\,P$ и $\mathrm{VC}\,P_k$.

25. Привести пример бесконечного класса $\mathcal{F}$, для которого $\mathrm{VC}\,\mathcal{F} = 1$.

26. *Размерность Вапника–Червонекиса для задачи восстановления регрессии.* Пусть $\mathcal{F}$ — некоторый класс функций $f :\ \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$. Размерностью Вапника–Червоненкиса для класса $\mathcal{F}$ называется $\mathrm{VC}\,\mathcal{F}'$, где

$$\mathcal{F}' = \left\{ I\big(f(x) - y\big) :\ f \in \mathcal{F},\ y \in \mathcal{Y} \right\}.$$

Найти размерность Вапника–Червоненкиса для класса $\{\sin \alpha x :\ \alpha \in \mathbf{R}\}$.

7. Еще задачи

27. Пусть N точек распределены случайно равномерно в единичной d-мерной гиперсфере. Доказать, что медианное расстояние от центра сферы до ближайшей точки равно

$$\rho(d, N) = \sqrt[d]{1 - \sqrt[N]{1/2}}.$$

Найти предел $\rho(d, N)$ при $N \to \infty$, $d \sim N$. Какой вывод из этого можно сделать применительно к методу ближайшего соседа при больших d?

28. *Bias-variance trade-off.* Рассмотрим задачу восстановления зависимости $Y = f^*(X)$, где X — случайная величина, а f^* — неизвестная *детерминированная* функция. Пусть $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(N)}$ суть независимые реализации величины X. В качестве модельной зависимости возьмем функцию $f(x, D)$, где $D = \{x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(N)}\}$. Разложить $\mathsf{E}_D\big(f(x, D) - f^*(x)\big)^2$ в сумму квадрата математического ожидания смещения (bias) и дисперсии (variance).

29. *Может ли использование коррелированных переменных улучшить качество предсказания?* Рассмотрим задачу классификации с двумя классами. Пусть пространство признаков двумерное. Объекты каждого класса имеют нормальное распределение с математическим ожиданием $(-1, -1)$ и $(1, 1)$ соответственно и единичной матрицей ковариации каждый. Априорные вероятности классов равны $\frac{1}{2}$.

1) Вычислить коэффициент корреляции для переменных x_1, x_2.
2) Найти байесов классификатор и вычислить байесову ошибку для усеченной задачи, рассматривая только одну переменную x_1.
3) Найти байесов классификатор и вычислить байесову ошибку для исходной задачи.
4) Приводит ли использование второй переменной к уменьшению ошибки?

30. Рассмотрим задачу классификации с двумя классами 0 и 1. Пусть пространство признаков двумерное. Объекты каждого класса имеют нормальное распределение с математическим ожиданием $(0, 0)$ и $(1, 1)$ соответственно и матрицей ковариации

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Априорные вероятности классов равны $\mathsf{Pr}\,\{Y = 0\} = \frac{1}{3}$ и $\mathsf{Pr}\,\{Y = 1\} = \frac{2}{3}$.

1) Найти уравнение разделяющей поверхности байесова классификатора.
2) Найти собственное разложение матрицы $\mathbf{\Sigma}$.
3) Перейти к новым координатам, оси которых совпадают с собственными векторами матрицы $\mathbf{\Sigma}$.
4) Выписать уравнение разделяющей поверхности байесова классификатора в новых координатах.

31. *Влияние шума на качество предсказания.* Пусть пространство признаков одномерное и обучающая выборка состоит из двух объектов $x^{(0)} = 0$, $x^{(1)} = 1$. Добавим к объектам шумовой признак, распределенный равномерно на отрезке $[-1, 1]$. Какова вероятность, что объект $x = (0.32, 0)$ окажется ближе (по евклидову расстоянию) к объекту $x^{(1)}$, чем к $x^{(0)}$? (Шум к x не добавляется. Только к $x^{(0)} = 0$ и $x^{(1)} = 1$.)

32. Выпуклым полиэдром (или выпуклым многогранником) в пространстве $\mathbf{R}^d$ называется пересечение конечного числа полупространств, т. е. множество решений некоторой системы линейных неравенств:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \ a_{12}x_2 + \ldots + \ a_{1d}x_d \ \le \ b_1, \\ a_{21}x_1 + \ a_{22}x_2 + \ldots + \ a_{2d}x_d \ \le \ b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{md}x_d \le b_m, \end{cases}$$

Доказать, что область, в которой все точки имеют одинаковых k ближайших соседей (для евклидова расстояния) есть полиэдр.

33. В дереве решений (для некоторой задачи классфикации с K классами) рассмотрим вершину m и соответствующий ящик R_m. Обозначим p_{mk} долю объектов класса k в этом ящике ($k = 1, 2, \ldots, K$). Рассмотрим классификатор, который для объектов, попавших в ящик R_m выбирает класс случайно, причем класс k выбирается с вероятностью, равной p_{mk}. Доказать, что математическое ожидание частоты ошибок этого классификатора на объектах обучающей выборки, попавших в R_m, равно индексу Джини.

34. Пусть при построении дерева решений в задаче классификации с двумя классами в текущую вершину попало 400 объектов из первого класса и столько же из второго. Пусть необходимо сделать выбор между разбиением на две ветви $(300, 100)$ и $(100, 300)$ и разбиением на две ветви $(200, 400)$, $(200, 0)$. Какое из этих разбиений кажется предпочтительнее (объясните)? Какое разбиение выберет критерий на основе минимизации ошибки, энтропийный критерий и критерий Джини? Приведите свой пример, когда все три критерия дают разные разбиения.