Kompletne formule strojnog učenja

1 Osnovni koncepti

1.1 Primjeri, hipoteza, model

Primjer hipoteze za regresiju:

$$h(x; \theta_0, \theta_1) = \theta_1 x + \theta_0$$

Primjer hipoteze za klasifikaciju pravcem:

$$h(x_1, x_2; \theta_0, \theta_1, \theta_2) = \mathbf{1}\{\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_0 \ge 0\}$$

gdje je $\mathbf{1}\{P\}$ indikatorska funkcija:

$$\mathbf{1}\{P\} = \begin{cases} 1 & \text{ako } P \equiv \top \\ 0 & \text{inače} \end{cases}$$

Model – skup hipoteza parametriziranih s θ :

$$\mathcal{H} = \{h(x;\theta)\}_{\theta}$$

1.2 Pogreška i funkcija gubitka

Empirijska pogreška za klasifikaciju:

$$E(h|\mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{1} \{ h(x^{(i)}) \neq y^{(i)} \}$$

Funkcija gubitka nula-jedan:

$$L(y, h(x)) = \mathbf{1}\{h(x^{(i)}) \neq y^{(i)}\}\$$

Općenito, empirijska pogreška je očekivana vrijednost funkcije gubitka:

$$E(h|\mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(y^{(i)}, h(x^{(i)}))$$

2 Regresija

2.1 Linearna regresija

Jednostavna linearna regresija (n = 1):

$$h(x; w_0, w_1) = w_0 + w_1 x$$

Višestruka linearna regresija (n > 1):

$$h(x; w) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n = \sum_{i=1}^n w_i x_i + w_0 = w^T x$$

Kvadratni gubitak:

$$L(y, h(x)) = (y - h(x))^2$$

Funkcija pogreške za regresiju (zbroj kvadratnih reziduala):

$$E(h|\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (y^{(i)} - h(x^{(i)}))^{2}$$

Optimizacijski postupak:

$$h^* = \underset{h \in \mathcal{H}}{\arg \min} E(h|\mathcal{D}) = \underset{h \in \mathcal{H}}{\arg \min} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (y^{(i)} - h(x^{(i)}))^2$$

Rješenje za jednostavnu regresiju (iz $\nabla_{w_0,w_1}E=0$):

$$w_0 = \bar{y} - w_1 \bar{x}$$

$$w_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} x^{(i)} y^{(i)} - N\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{N} (x^{(i)})^2 - N\bar{x}^2}$$

Matrica dizajna za višestruku regresiju:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \dots & x_n^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \dots & x_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_1^{(N)} & x_2^{(N)} & \dots & x_n^{(N)} \end{pmatrix}$$

Funkcija pogreške (matrični oblik):

$$E(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2}(Xw - y)^{T}(Xw - y) = \frac{1}{2}(w^{T}X^{T}Xw - 2y^{T}Xw + y^{T}y)$$

Minimizacija:

$$\nabla_w E = w^T X^T X - y^T X = 0$$

Rješenje najmanjih kvadrata (OLS):

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y = X^+ y$$

gdje je $X^+ = (X^T X)^{-1} X^T$ Moore-Penroseov pseudoinverz.

Uvjet za postojanje rješenja: $\operatorname{rang}(X^TX) = \operatorname{rang}(X) = n+1$ Gramova matrica: X^TX je $(n+1) \times (n+1)$ matrica.

2.2 Nelinearna regresija

Bazne funkcije:

$$\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m\}, \quad \phi_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \quad \phi_0(x) = 1$$

Funkcija preslikavanja u prostor značajki:

$$\phi: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{m+1}; \phi(x) = (\phi_0(x), \dots, \phi_m(x))$$

Model s preslikavanjem:

$$h(x; w) = \sum_{j=0}^{m} w_j \phi_j(x) = w^T \phi(x)$$

Primjeri preslikavanja:

- Linearna regresija: $\phi(x) = (1, x_1, x_2, \dots, x_n)$
- Jednostruka polinomijalna: $\phi(x) = (1, x, x^2, \dots, x^m)$
- Višestruka polinomijalna (2. stupanj): $\phi(x)=(1,x_1,x_2,x_1x_2,x_1^2,x_2^2)$

Matrica dizajna s preslikavanjem:

$$\Phi = \begin{pmatrix} 1 & \phi_1(x^{(1)}) & \dots & \phi_m(x^{(1)}) \\ 1 & \phi_1(x^{(2)}) & \dots & \phi_m(x^{(2)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \phi_1(x^{(N)}) & \dots & \phi_m(x^{(N)}) \end{pmatrix}_{N \times (m+1)}$$

Rješenje s preslikavanjem u prostor značajki:

$$w = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T u = \Phi^+ u$$

2.3 Regularizacija

p-norma vektora težina:

$$\Omega(w) = ||w||_p = \left(\sum_{j=1}^m |w_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

Različite norme:

•
$$L_2$$
-norma $(p=2)$: $||w||_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^m w_j^2} = \sqrt{w^T w}$

•
$$L_1$$
-norma $(p=1)$: $||w||_1 = \sum_{j=1}^m |w_j|$

•
$$L_0$$
-norma $(p=0)$: $||w||_0 = \sum_{j=1}^m \mathbf{1}\{w_j \neq 0\}$

L2-regularizacija (Tikhonovljeva regularizacija):

$$E_R(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (w^T \phi(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2} ||w||_2^2$$

Hrbatna regresija (Ridge regression) - L2 regularizacija:

$$E_R(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2}(\Phi w - y)^T(\Phi w - y) + \frac{\lambda}{2}w^T w$$

Rješenje hrbatne regresije:

$$w = (\Phi^T \Phi + \lambda I)^{-1} \Phi^T y$$

L1-regularizacija (LASSO):

$$E_R(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (w^T \phi(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2} ||w||_1$$

L0-regularizacija:

$$E_R(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (w^T \phi(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^{m} \mathbf{1} \{ w_j \neq 0 \}$$

2.4 Probabilistička interpretacija

Model sa šumom:

$$y^{(i)} = f(x^{(i)}) + \epsilon_i$$
, gdje je $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$

Normalna razdioba:

$$p(Y = y | \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Vjerojatnost oznake za zadani primjer:

$$p(y|x) = \mathcal{N}(f(x), \sigma^2)$$

Vjerojatnost cijelog skupa primjera (uz iid pretpostavku):

$$p(y|X) = \prod_{i=1}^{N} p(y^{(i)}|x^{(i)})$$

Log-izglednost težina w:

$$\ln p(y|X, w) = \ln \prod_{i=1}^{N} \mathcal{N}(h(x^{(i)}; w), \sigma^{2}) \propto -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (y^{(i)} - h(x^{(i)}; w))^{2}$$

3 Linearni diskriminativni modeli

Linearni diskriminativni model:

$$h(x; w) = w^T x$$

Granica između klasa: h(x) = 0 (ponekad h(x) = 0.5). Geometrija linearnog modela (za n = 2):

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_0 = 0$$

Normala hiperravnine: w je normala hiperravnine.

Udaljenost primjera od hiperravnine:

$$d = \frac{h(x)}{\|w\|} = \frac{w^T x + w_0}{\|w\|}$$

Višeklasna klasifikacija:

- \bullet Jedan-naspram-jedan (OVO): ${K \choose 2}$ binarnih modela
- \bullet Jedan-naspram-ostali (OVR): K binarnih modela

OVO shema:

$$h(x) = \arg\max_{i} \sum_{j \neq i} \operatorname{sgn}(h_{ij}(x))$$

OVR shema:

$$h(x) = \arg\max_{j} h_j(x)$$

3.1 Klasifikacija regresijom

Funkcija pogreške:

$$E(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (w^{T} \phi(x^{(i)}) - y^{(i)})^{2} = \frac{1}{2} (\Phi w - y)^{T} (\Phi w - y)$$

Model za klasifikaciju regresijom:

$$h(x; w) = \mathbf{1}\{w^T \phi(x) \ge 0.5\}$$

3.2 Perceptron

Perceptron model:

$$h(x) = f(w^T \phi(x))$$

Funkcija praga kao aktivacijska funkcija:

$$f(\alpha) = \begin{cases} +1 & \text{ako } \alpha \ge 0\\ -1 & \text{inače} \end{cases}$$

Gubitak perceptrona:

$$L(y, h(x)) = \max(0, -w^T \phi(x)y)$$

Funkcija pogreške perceptrona:

$$E(w|\mathcal{D}) = -\sum_{i: f(w^T\phi(x^{(i)})) \neq y^{(i)}} w^T\phi(x^{(i)})y^{(i)} = \sum_{i=1}^N \max(0, -w^T\phi(x^{(i)})y^{(i)})$$

Gradijent funkcije gubitka:

$$\nabla_w L = -\phi(x) y$$

Widrow-Hoffovo pravilo:

$$w \leftarrow w + \eta \phi(x) y$$

4 Logistička regresija

Logistička (sigmoidalna) funkcija:

$$\sigma(\alpha) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha)}$$

Derivacija sigmoide:

$$\frac{\partial \sigma(\alpha)}{\partial \alpha} = \sigma(\alpha)(1 - \sigma(\alpha))$$

Model logističke regresije:

$$h(x; w) = \sigma(w^T \phi(x)) = \frac{1}{1 + \exp(-w^T \phi(x))} = P(y = 1|x)$$

Bernoullijeva razdioba izlaza:

$$P(y|\mu) = \begin{cases} \mu & \text{ako } y = 1\\ 1 - \mu & \text{inače} \end{cases} = \mu^y (1 - \mu)^{1-y}$$

Vjerojatnost primjera:

$$P(y^{(i)}|x^{(i)}) = h(x^{(i)}; w)^{y^{(i)}} (1 - h(x^{(i)}; w))^{1 - y^{(i)}}$$

Log-izglednost oznaka:

$$\ln P(y|X,w) = \sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} \ln h(x^{(i)}; w) + (1 - y^{(i)}) \ln(1 - h(x^{(i)}; w)) \right)$$

Empirijska pogreška (negativna log-izglednost):

$$E(w|\mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(-y^{(i)} \ln h(x^{(i)}; w) - (1 - y^{(i)}) \ln(1 - h(x^{(i)}; w)) \right)$$

Gubitak unakrsne entropije:

$$L(y, h(x)) = -y \ln h(x) - (1 - y) \ln(1 - h(x))$$

Logistički gubitak (za $y \in \{-1, +1\}$):

$$L(y, h(x)) = \frac{1}{\ln 2} \ln(1 + \exp(-yw^T \phi(x)))$$

Gradijent funkcije gubitka:

$$\nabla_w L(y, h(x)) = (h(x) - y)\phi(x)$$

Gradijent funkcije pogreške:

$$\nabla_w E(w|\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) \phi(x^{(i)})$$

4.1 Gradijentni spust

Općenito pravilo gradijentnog spusta:

$$x \leftarrow x - n\nabla f(x)$$

Grupni gradijentni spust:

$$w \leftarrow w - \eta \sum_{i=1}^{N} \nabla L(y^{(i)}, h(x^{(i)}; w))$$

Stohastički gradijentni spust (SGD):

$$w \leftarrow w - \eta \nabla L(y^{(i)}, h(x^{(i)}; w))$$

4.2 Regularizirana logistička regresija

L2-regularizirana pogreška:

$$E_R(w|\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} \left(-y^{(i)} \ln h(x^{(i)}) - (1 - y^{(i)}) \ln(1 - h(x^{(i)})) \right) + \frac{\lambda}{2} w^T w$$

Ažuriranje težina za L2 regularizaciju:

$$w \leftarrow w(1 - \eta \lambda) - \eta \sum_{i=1}^{N} (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) \phi(x^{(i)})$$

4.3 Višeklasna logistička regresija

Softmax funkcija:

$$\operatorname{softmax}_{k}(x_{1},\ldots,x_{K}) = \frac{\exp(x_{k})}{\sum_{i,j=1}^{K} \exp(x_{j})}$$

Multinomijalna logistička regresija:

$$h_k(x; W) = \frac{\exp(w_k^T \phi(x))}{\sum_{j=1}^K \exp(w_j^T \phi(x))} = P(y = k | x, W)$$

Multinomijalna razdioba:

$$P(y|\mu) = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{y_k}$$

Poopćena pogreška unakrsne entropije:

$$E(W|\mathcal{D}) = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} y_k^{(i)} \ln h_k(x^{(i)}; W)$$

Gradijent za klasu k:

$$\nabla_{w_k} E(W|\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} (h_k(x^{(i)}; W) - y_k^{(i)}) \phi(x^{(i)})$$

5 Stroj potpornih vektora (SVM)

SVM linearan model:

$$h(x; w, w_0) = w^T x + w_0$$

Linearna odvojivost (uz $y \in \{-1, +1\}$):

$$\forall (x^{(i)}, y^{(i)}) \in \mathcal{D} : y^{(i)}h(x^{(i)}) \ge 0$$

Udaljenost primjera od hiperravnine:

$$d^{(i)} = \frac{1}{\|w\|} y^{(i)} (w^T x^{(i)} + w_0)$$

Problem maksimalne margine:

$$\underset{w,w_0}{\arg\max} \left\{ \frac{1}{\|w\|} \min_{i} y^{(i)} (w^T x^{(i)} + w_0) \right\}$$

Normalizacija (za primjere najbliže margini):

$$y^{(i)}(w^Tx^{(i)} + w_0) = 1$$

SVM primarni problem (tvrda margina):

$$\underset{w,w_0}{\arg\min} \frac{1}{2} ||w||^2 \quad \text{uz } y^{(i)} (w^T x^{(i)} + w_0) \ge 1, \quad \forall i$$

5.1 Lagrangeova dualnost

Lagrangeova funkcija:

$$\mathcal{L}(w, w_0, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \left(y^{(i)} (w^T x^{(i)} + w_0) - 1 \right)$$

Uvjeti iz derivacija:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_0} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Dualna Lagrangeova funkcija:

$$\tilde{\mathcal{L}}(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} (x^{(i)})^T x^{(j)}$$

SVM dualni problem:

$$\arg\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{N} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_{i} \alpha_{j} y^{(i)} y^{(j)} (x^{(i)})^{T} x^{(j)}$$

uz
$$\alpha_i \ge 0$$
 i $\sum_{i=1}^N \alpha_i y^{(i)} = 0$

KKT uvjeti:

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + w_0) \ge 1, \quad \alpha_i \ge 0, \quad \alpha_i(y^{(i)} h(x^{(i)}) - 1) = 0$$

Dualni SVM model (za predikciju):

$$h(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} (x^{(i)})^T x + w_0$$

5.2 Meka margina

Reformulacija ograničenja (dopuštanje ulaska u marginu):

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + w_0) \ge 1 - \xi_i, \quad \xi_i \ge 0$$

SVM meke margine (primarni problem):

$$\underset{w,w_0,\xi}{\operatorname{arg\,min}} \left\{ \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i \right\}$$

uz
$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + w_0) \ge 1 - \xi_i \text{ i } \xi_i \ge 0, \quad \forall i$$

Lagrangeova funkcija za meku marginu:

$$\mathcal{L}(w, w_0, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y^{(i)}(w^T x^{(i)} + w_0) - 1 + \xi_i) - \sum_{i=1}^{N} \beta_i \xi_i$$

Dodatni uvjet iz derivacija:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \xi_i} = 0 \Rightarrow \alpha_i = C - \beta_i$$

Dualni problem za meku marginu: Isti kao za tvrdu marginu, uz dodatno ograničenje $0 \le \alpha_i \le C$. Gubitak zglobnice (hinge loss):

$$L(y, h(x)) = \max(0, 1 - yh(x))$$

Alternativna formulacija SVM ciljne funkcije:

$$E(w|\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} \max(0, 1 - y^{(i)}h(x^{(i)})) + \frac{\lambda}{2}||w||^2 \quad (\text{gdje je } \lambda = 1/C)$$

6 Jezgrene metode

Jezgrena funkcija (mjera sličnosti):

$$\kappa: \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$$

Jezgreni trik:

$$\kappa(x, x') = \phi(x)^T \phi(x')$$

Primjeri jezgri:

- Linearna jezgra: $\kappa(x, x') = x^T x'$
- Gaussova RBF-jezgra: $\kappa(x, x') = \exp(-\gamma ||x x'||^2)$
- Eksponencijalna jezgra: $\kappa(x,x') = \exp(-\gamma ||x-x'||)$
- Inverzna kvadratna jezgra: $\kappa(x,x') = \frac{1}{1+\|x-x'\|^2}$
- Polinomijalna jezgra: $\kappa(x, x') = (\gamma x^T x' + c)^d$
- RBF s Mahalanobisovom udaljenosti: $\kappa(x,x') = \exp(-\frac{1}{2}(x-x')^T \Sigma^{-1}(x-x'))$

Jezgreni stroj (model s jezgrama kao baznim funkcijama):

$$\phi(x) = (1, \kappa(x, \mu_1), \kappa(x, \mu_2), \dots, \kappa(x, \mu_m))$$

Jezgreni SVM model (za predikciju):

$$h(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} \kappa(x, x^{(i)}) + w_0$$

Jezgreni SVM dualni problem:

$$\arg\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{N} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_{i} \alpha_{j} y^{(i)} y^{(j)} \kappa(x^{(i)}, x^{(j)})$$

Jezgrena (Gramova) matrica:

$$K_{ij} = \kappa(x^{(i)}, x^{(j)}) \Rightarrow K = \Phi \Phi^T$$

7 Neparametarske metode

k-NN klasifikator:

$$h(x) = \underset{j \in \{0, \dots, K-1\}}{\arg\max} \sum_{(x^{(i)}, y^{(i)}) \in \text{NN}_k(x)} \mathbf{1}\{y^{(i)} = j\}$$

Težinski k-NN klasifikator:

$$h(x) = \underset{j \in \{0, \dots, K-1\}}{\arg\max} \sum_{i=1}^{N} \kappa(x^{(i)}, x) \mathbf{1} \{ y^{(i)} = j \}$$

k-NN zaglađivač (regresija):

$$h(x) = \frac{1}{k} \sum_{(x^{(i)}, y^{(i)}) \in NN_k(x)} y^{(i)}$$

Jezgreni zaglađivač (regresija):

$$h(x) = \frac{\sum_{i=1}^{N} \kappa(x^{(i)}, x) y^{(i)}}{\sum_{i=1}^{N} \kappa(x^{(i)}, x)}$$

8 Osnove vjerojatnosti i procjene parametara

8.1 Slučajne varijable

Očekivanje:

$$E[X] = \sum_{x} x P(x)$$
 ili $E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx$

Varijanca:

$$Var(X) = \sigma_X^2 = E[(X - E[X])^2]$$

Kovarijanca:

$$Cov(X, Y) = \sigma_{X,Y} = E[(X - E[X])(Y - E[Y])]$$

Pearsonov koeficijent korelacije:

$$\rho_{X,Y} = \frac{\operatorname{Cov}(X,Y)}{\sqrt{\operatorname{Var}(X)\operatorname{Var}(Y)}} = \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_X\sigma_Y} \in [-1,+1]$$

Matrica kovarijacije:

$$\Sigma = E[(X - E[X])(X - E[X])^T] = \begin{pmatrix} \operatorname{Var}(X_1) & \operatorname{Cov}(X_1, X_2) & \dots \\ \operatorname{Cov}(X_2, X_1) & \operatorname{Var}(X_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

8.2 Distribucije

Bernoullijeva razdioba:

$$P(x|\mu) = \mu^{x} (1 - \mu)^{1 - x}$$

Kategorička (Multinulijeva) razdioba:

$$P(x|\mu) = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{x_k}$$
, gdje je x one-hot vektor

Normalna (Gaussova) razdioba:

$$p(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Multivarijatna normalna razdioba:

$$p(x|\mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$$

Mahalanobisova udaljenost (kvadrat):

$$\Delta^2 = (x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu)$$

Beta-distribucija:

$$p(\mu|\alpha,\beta) = \frac{1}{B(\alpha,\beta)} \mu^{\alpha-1} (1-\mu)^{\beta-1}$$

Dirichletova distribucija:

$$P(\mu|\alpha) = \frac{1}{B(\alpha)} \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{\alpha_k - 1}, \quad \text{uz } \sum \mu_k = 1$$

8.3 Procjenitelji

Pristranost (bias) procjenitelja Θ :

$$b(\Theta) = E[\Theta] - \theta$$

Funkcija izglednosti (Likelihood):

$$L(\theta|\mathcal{D}) = p(\mathcal{D}|\theta) = \prod_{i=1}^{N} p(x^{(i)}|\theta)$$

MLE - Procjenitelj najveće izglednosti:

$$\hat{\theta}_{\mathrm{MLE}} = \mathop{\arg\max}_{\theta} L(\theta|\mathcal{D}) = \mathop{\arg\max}_{\theta} \ln L(\theta|\mathcal{D})$$

MLE za parametre normalne razdiobe:

$$\hat{\mu}_{\text{MLE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x^{(i)}, \quad \hat{\sigma}_{\text{MLE}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x^{(i)} - \hat{\mu}_{\text{MLE}})^2$$

Aposteriorna vjerojatnost parametra:

$$p(\theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\theta)p(\theta)}{p(\mathcal{D})} \propto L(\theta|\mathcal{D})p(\theta)$$

MAP - Maximum A Posteriori procjenitelj:

$$\hat{\theta}_{\text{MAP}} = \arg\max_{\theta} p(\theta|\mathcal{D}) = \arg\max_{\theta} \ln(L(\theta|\mathcal{D})p(\theta))$$

MAP za Bernoullijevu (Beta apriorna):

$$\hat{\mu}_{\text{MAP}} = \frac{m + \alpha - 1}{N + \alpha + \beta - 2}$$

Laplaceovo zaglađivanje (MAP za Bern. uz $\alpha = \beta = 2$):

$$\hat{\mu}_{\text{MAP}} = \frac{m+1}{N+2}$$

MAP za kategoričku (Dirichlet apriorna, $\alpha_k = 2$ za sve k):

$$\hat{\mu}_{k,\text{MAP}} = \frac{N_k + 1}{N + K}$$

9 Bayesov klasifikator i PGM-ovi

9.1 Pravila vjerojatnosti

Pravilo zbroja:

$$P(x) = \sum_{y} P(x, y)$$

Pravilo umnoška:

$$P(x,y) = P(y|x)P(x) = P(x|y)P(y)$$

Bayesovo pravilo:

$$P(y|x) = \frac{P(x|y)P(y)}{P(x)}$$

Pravilo lanca:

$$P(x_1, \dots, x_n) = P(x_1)P(x_2|x_1)\dots P(x_n|x_1, \dots, x_{n-1}) = \prod_{k=1}^n P(x_k|x_1, \dots, x_{k-1})$$

9.2 Bayesov klasifikator

Model Bayesovog klasifikatora:

$$h_j(x;\theta) = P(y = j|x) = \frac{p(x|y = j)P(y = j)}{\sum_k p(x|y = k)P(y = k)}$$

MAP-hipoteza:

$$h(x) = \operatorname*{arg\,max}_{j} p(x|y=j) P(y=j)$$

Log-vjerojatnost za Gaussov klasifikator:

$$h_j(x) = \ln p(x|y=j) + \ln P(y=j) \propto -\frac{1}{2} \ln |\Sigma_j| - \frac{1}{2} (x - \mu_j)^T \Sigma_j^{-1} (x - \mu_j) + \ln P(y=j)$$

Pretpostavka uvjetne nezavisnosti (Naivni Bayes):

$$p(x_1, \dots, x_n | y) = \prod_{k=1}^n p(x_k | y)$$

Naivni Bayesov klasifikator:

$$h(x_1,...,x_n) = \arg\max_{j} P(y=j) \prod_{k=1}^{n} P(x_k|y=j)$$

9.3 Probabilistički grafički modeli (PGM)

Faktorizacija Bayesove mreže:

$$p(x) = \prod_{k=1}^{n} p(x_k | \text{pa}(x_k))$$

Uvjetna nezavisnost $X \perp Y|Z$:

$$P(X,Y|Z) = P(X|Z)P(Y|Z) \Leftrightarrow P(X|Y,Z) = P(X|Z)$$

Zaključivanje (posteriorni upit):

$$p(x_q|x_o) = \frac{\sum_{x_n} p(x_q, x_o, x_n)}{p(x_o)}$$

Zaključivanje (MAP-upit):

$$x_q^* = \operatorname*{arg\,max}_{x_q} \sum_{x_n} p(x_q, x_o, x_n)$$

10 Grupiranje

K-sredina ciljna funkcija:

$$J = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} b_k^{(i)} ||x^{(i)} - \mu_k||^2$$

Ažuriranje centroida K-sredina:

$$\mu_k = \frac{\sum_{i=1}^{N} b_k^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{N} b_k^{(i)}}$$

Model Gaussove mješavine (GMM):

$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)$$

GMM odgovornost (E-korak):

$$h_k^{(i)} = P(y = k|x^{(i)}) = \frac{\pi_k p(x^{(i)}|\theta_k)}{\sum_{i=1}^K \pi_i p(x^{(i)}|\theta_i)}$$

GMM ažuriranje parametara (M-korak):

$$\mu_k \leftarrow \frac{\sum_{i} h_k^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i} h_k^{(i)}}$$

$$\Sigma_k \leftarrow \frac{\sum_{i} h_k^{(i)} (x^{(i)} - \mu_k) (x^{(i)} - \mu_k)^T}{\sum_{i} h_k^{(i)}}$$

$$\pi_k \leftarrow \frac{1}{N} \sum_{i} h_k^{(i)}$$

Udaljenosti za HAC:

- Jednostruko povezivanje: $d_{\min}(G_i,G_j) = \min_{x \in G_i, x' \in G_j} d(x,x')$
- Potpuno povezivanje: $d_{\max}(G_i, G_j) = \max_{x \in G_i, x' \in G_j} d(x, x')$
- Prosječno povezivanje: $d_{\mathrm{avg}}(G_i,G_j) = \frac{1}{N_i N_j} \sum_{x \in G_i} \sum_{x' \in G_j} d(x,x')$

Silueta (mjera kvalitete grupiranja):

$$s^{(i)} = \frac{b^{(i)} - a^{(i)}}{\max(a^{(i)}, b^{(i)})}$$

Randov indeks:

$$R = \frac{a+b}{\binom{N}{2}}$$

11 Vrednovanje modela

Matrica zabune:

$$\begin{pmatrix} TP & FP \\ FN & TN \end{pmatrix}$$

Točnost (Accuracy):

$$Acc = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

Preciznost (Precision):

$$P = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FP}}$$

Odziv (Recall, TPR):

$$R = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$$

Stopa lažno pozitivnih (FPR):

$$\mathrm{FPR} = \frac{\mathrm{FP}}{\mathrm{FP} + \mathrm{TN}}$$

Specifičnost:

$$S = \frac{\mathrm{TN}}{\mathrm{TN} + \mathrm{FP}} = 1 - \mathrm{FPR}$$

F1 mjera:

$$F_1 = \frac{2PR}{P+R}$$

F-beta mjera:

$$F_{\beta} = \frac{(1+\beta^2)PR}{\beta^2 P + R}$$

z-statistika:

$$z = \frac{\bar{x} - \mu}{\sigma / \sqrt{N}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

t-statistika:

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{\hat{\sigma} / \sqrt{N}} \sim t(N - 1)$$

Interval pouzdanosti (uz t-distribuciju):

$$\mu = \bar{x} \pm t_{\alpha/2, N-1} \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{N}}$$

Upareni t-test:

$$t = \frac{\bar{d}}{\hat{\sigma}_d / \sqrt{K}}$$

gdje je \bar{d} prosječna razlika performansi na K preklopa.

12 Odabir značajki

Uzajamna informacija (mjera zavisnosti):

$$I(x,y) = \sum_{x,y} P(x,y) \ln \frac{P(x,y)}{P(x)P(y)} = D_{KL}(P(x,y)||P(x)P(y))$$

t-statistika (za usporedbu srednjih vrijednosti značajke x_k):

$$t = \frac{\bar{x}_{0k} - \bar{x}_{1k}}{\hat{\sigma}_i \sqrt{\frac{1}{N_0} + \frac{1}{N_1}}}$$

 χ^2 -statistika (za kategoričke značajke):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{K_k} \sum_{j=1}^K \frac{(O_{i,j} - E_{i,j})^2}{E_{i,j}}$$

Ažuriranje težina za RELIEF algoritam:

$$w_k \leftarrow w_k - \frac{1}{N}(x_k - x_k^h)^2 + \frac{1}{N}(x_k - x_k^m)^2$$

Faktor inflacije varijance (VIF):

$$VIF_k = \frac{1}{1 - R_k^2}$$

CFS vrijednost podskupa značajki:

$$\mathrm{Merit}_S = \frac{k \bar{r}_{x,y}}{\sqrt{k + k(k-1)\bar{r}_{x,x}}}$$