

MO2

March 2021

Part I

Лекции

1 Ядровые методы

Данные: $x = (x_1, \dots, x_m)$

Базисные функции: $\phi(x_1, \dots)$

Модель принимает вид: $a(x) = \sum_{j=1}^m w_j \phi_j(x)$

Для хорошего качества нужно много базисных функций \rightarrow Ядровые методы позволяют не перебирать большое количество базисных функций

- Быстрое обучение

Ядровые методы

1. Двойственное представление для линейной регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l (\sum_{j=1}^m (w_j \phi_j(x_i) - y_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|w\|_2^2 = \frac{1}{2} \|\Phi w - y\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|w\|_2^2$$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(x_l) & \dots & \phi_m(x_l) \end{pmatrix}$$

$$\nabla_w Q = \Phi^T (\Phi w - y) + \lambda w \rightarrow w = -\frac{1}{\lambda} \Phi^T (\Phi w - y) \rightarrow w = \Phi^T a$$

w является линейной комбинацией строк $\Phi \rightarrow$ Решение можно искать из $w = \Phi^T a$

$$Q(a) = \frac{1}{2} \|\Phi \Phi^T a - y\| + \frac{\lambda}{2} a^T \Phi \Phi^T a \rightarrow \min_a$$

$\Phi \Phi^T$ - матрица Грама (попарных скалярных произведений объектов)

Можно записать $Q(w)$ так, что он зависит только от скалярных произведений объектов

2. SVM

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^l \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \lambda_i \lambda_j y_i y_j < x_i, x_j > \rightarrow \max_{\lambda} \\ 0 \geq \lambda_i \leq C \\ \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i = 0 \end{cases}$$

Такая формулировка задачи зависит от скалярных произведений объектов

3. Алгоритм

- (a) Добавляем новые признаки
- (b) $x, z \in X$
- (c) Делаем это так, что $\langle \phi(x), \phi(z) \rangle$ выражается через $\langle x, z \rangle$
- (d) Используем метод, который использует скалярные произведения объектов
- (e) В этом методе $\langle x, z \rangle \rightarrow \langle \phi(x), \phi(z) \rangle$ (*Kernel trick*)

4. Ядро - функция $K(x, z) = \langle \phi(x), \phi(z) \rangle$, где $\phi : X \rightarrow H$

- (a) H - спрямляющее пространство
- (b) ϕ - спрямляющее отображение

5. Теорема Мерсера

- (a) $K(x, z)$ - ядро $\leftrightarrow \begin{cases} K(x, z) = K(z, x) \\ K \text{ неотрицательно определенная} \end{cases}$
- (b) $\text{НО} \rightarrow \forall l, \forall (x_1, \dots, x_l) \in R^d \rightarrow (K(x_i, x_j))_{i,j=1}^l \text{ НО}$
- (c) На практике теорема Мерсера слишком сложна для применения

6. Теорема 1

- (a) Если
 - i. $K_1(x, z), K_2(x, z)$ - ядра, $x, z \in X$

- ii. $f^{(x)}$ - вещественная функция на X
 - iii. $\phi : X \rightarrow R^n$
 - iv. K_3 - ядро заданное на R^n
- (b) То следующие функции являются ядрами:
- i. $K(x, z) = K_1(x, z) + K_2(x, z)$
 - ii. $K(x, z) = \alpha K_1(x, z)$
 - iii. $K(x, z) = K_1 K_2$
 - iv. $K(x, z) = f^{(x)} f^{(z)}$
 - v. $K(x, z) = K(\phi(x), \phi(z))$

7. Теорема 2

- (a) Если:
- i. $K_1(x, z), K_2(x, z), \dots$ - последовательность ядер
 - ii. $\exists K(x, z) = \lim_{n \rightarrow \infty} K_n(x, z), \forall x, z$
- (b) То:
- i. K - ядро

8. Полиномиальные ядра

- (a) $p(v)$ - многочлен с неотриц. коэфф
- (b) $K(x, z) = w_0 + w_1 \langle x, z \rangle + w_2 \langle x, z \rangle^2 + \dots$
- (c) Является ядром по теореме 1
- (d) $K(x, z) = (\langle x, z \rangle + R)^m = \sum_{i=0}^m C_m^i R^{m-i} \langle x, z \rangle^i$
- i. Если расписать все $\langle x, z \rangle^i$, то получим все мономы степени i от исходных признаков
 - ii. Зачем R ? \rightarrow коэффициент при мономе $= \sqrt{C_m^i R^{m-i}}$
 - iii. Сравним веса при мономах 1 и $(m-1)$ $\sqrt{\frac{C_m^{m-1} R}{C_m^1 R^{m-1}}} = \sqrt{\frac{1}{R^{m-2}}}$
 - iv. R больше - мономы высоких степеней имеют низкий вклад
 - v. Конечномерное спрямляющее пространство, но можно сделать линейно разделимое пространство

9. Гауссовы ядра

- (a) Позволяет перевести в бесконечномерное спрямляющее пространство
- (b) $K(x, z) = \exp\left(-\frac{\|x-z\|^2}{2\sigma^2}\right)$

$$i. \exp(\langle x, z \rangle) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle x, z \rangle^k}{k!}, \forall x, z = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle x, z \rangle^k}{k!}$$

А. Разложение через ряд Тейлора

В. Ядро, как последовательность ядер

$$ii. \frac{\exp(\langle x, z \rangle)}{2\sigma^2} - \text{ядро, аналогично}$$

$$iii. \exp\left(-\frac{\|x-z\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{\langle x-z, x-z \rangle}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{\langle x, x \rangle - \langle x, z \rangle - \langle z, z \rangle + \langle x, z \rangle}{2\sigma^2}\right) = \frac{\exp(\langle x, z \rangle / \sigma^2)}{\exp(\|x\|^2 / \sigma^2) \exp(\|z\|^2 / \sigma^2)}$$

$$iv. \exp(\langle x, z \rangle / \sigma^2) = K(x, z) = \langle \phi(x), \phi(z) \rangle$$

$$v. \tilde{\phi}(x) = \frac{\phi(x)}{\|\phi(x)\|} = \frac{\phi(x)}{\sqrt{K(x, x)}}$$

$$vi. \langle \tilde{\phi}(x), \tilde{\phi}(z) \rangle = \frac{\langle \phi(x), \phi(z) \rangle}{\sqrt{K(x, x)K(z, z)}}$$

(c) Какое спрямляющее пространство? - бесконечная сумма всех мономов

(d) Утверждение: x_1, \dots, x_l - различные векторы из \mathbb{R}^d

Тогда:

$$G = \left(\exp\left(-\frac{\|x-z\|^2}{2\sigma^2}\right)\right)_{i,j=1}^l - \text{невыврожденная при } \sigma^2 > 0$$

(e) $x_1, \dots, x_l \in \mathbb{R}^d$ - их матрица Грамма невырождена $\rightarrow \phi(x_1, \dots, x_l)$
ЛНЗ \rightarrow бесконечное количество ЛНЗ векторов \rightarrow бесконечномерное пространство

10. Ядровой SVM

$$(a) \begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^l \xi_i \rightarrow \min_{w,b,\xi} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

$$L(w, b, \xi, \lambda, \mu) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^d \xi_i - \sum_{i=1}^l \lambda_i (y_i(\langle w, x_i \rangle + b) - 1 + \xi_i) - \sum_{i=1}^l \mu_i \xi_i$$

В точке оптимума $\nabla_w L = 0$

$$\nabla_w L = w - \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i x_i = 0 \rightarrow w = \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i x_i$$

$$\nabla_b L = \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i = 0$$

$$\nabla_{\xi_i} L = C - \lambda_i - \mu_i = 0 \rightarrow \lambda_i + \mu_i = C$$

Условие дополняющей нежесткости:

$$\lambda_i(y_i(< w, x_i > + b) - 1 + \xi_i) = 0 \rightarrow \lambda_i = 0 \text{ или } (y_i(< w, x_i > + b) - 1 + \xi_i) = 0$$

$$\mu_i \xi_i = 0 \rightarrow \mu_i = 0 \text{ или } \xi_i = 0$$

Свойства лагранжиана:

$$\lambda \geq 0, \mu \geq 0$$

(b) Типы объектов

- i. $\lambda_i = 0 \rightarrow \mu_i = C \rightarrow \xi_i = 0 \rightarrow x_i$ лежит с правильной стороны от разделяющей гиперплоскости и на достаточном расстоянии от нее. $w = \sum_{i=1}^l \lambda y_i x_i \rightarrow$ объект не влияет на веса. Называется **периферийный**.
- ii. $0 < \lambda_i < 1 \rightarrow \mu \neq 0 \rightarrow \xi_0 = 0$. x_i не залезает на разделяющую полосу, но $y_i(< w, x_i > + b) = 1 \rightarrow x_i$ лежит прямо на границе. Дает вклад в w . x_i - **опорный граничный**.
- iii. $\lambda_i = C \rightarrow \xi_i > 0$. x_i дает вклад в w . $\xi_i > 0 \rightarrow x_i$ нарушает границу - **Опорные нарушители**.

(c) Подставляем $w = \sum_{i=1}^l \lambda y_i x_i$ в лагранжиан, учтем ограничения $\sum_{i=1}^l \lambda_i y_i = 0$ и $C - \lambda_i - \mu_i = 0$

Двойственная задача SVM

$$\begin{cases} L = \sum_{i=1}^l \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle \rightarrow \max_{\lambda} \\ \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i = 0 \\ 0 \leq \lambda_i \leq C \end{cases}$$

(d) Если λ - решение, то $w = \sum_{i=1}^l \lambda_i y_i x_i$ - решение исходной задачи

(e) Задача зависит от объектов только через скалярное произведение \rightarrow можно заменить его на ядро

(f) Находим b Берем $x_i : 0 < \lambda_i < C \rightarrow \xi_i = 0 \rightarrow y_i(< w, x_i > + b) = 1 \rightarrow b = y_i - \langle w, x_i \rangle$

(g) Минусы ядрового SVM

- i. Сложно контролировать переобучение
- ii. Необходимо хранить в памяти матрицу Грамма

iii. Нельзя менять функцию потерь

11. Применение ядерной модели

$$(a) \ a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle + b) = \text{sign}(\langle \sum_{i=1}^l \lambda y_i x_i, x \rangle + b) = \text{sign}(\sum_{i=1}^l \lambda_i y_i \langle x_i, x \rangle + b)$$

2 Аппроксимации ядер, ЕМ алгоритм

Скалярные произведения тяжело хранить из-за размера матрицы.
Есть ли возможность построить $\tilde{\phi}(x) \rightarrow \langle \tilde{\phi}(x_i), \tilde{\phi}(x_j) \rangle \approx K(x_i, x_j)$

2.1 Метод случайных признаков Фурье

$$K(x, z) = K(x - z)$$

K - непрерывная функция

Теорема Бохнера

$$K(x - z) \rightarrow \exists p(w) \rightarrow K(x - z) = \int_{R^d} p(w) e^{iw^T(x-z)} dw$$

Используем:

$$K(x-z) = \int_{R^d} p(w) e^{iw^T(x-z)} dw \xrightarrow{\text{Формула Эйлера}^1} \int_{R^d} p(w) \cos(w^T(x-z)) + i \int_{R^d} p(w) \sin(w^T(x-z))$$

$$\xrightarrow{K(x-z) - \text{веществ.}} \text{Комплексная часть} = 0 \rightarrow K(x-z) = \int_{R^d} p(w) \cos(w^T(x-z)) dw$$

$$\xrightarrow{\text{Монте-Карло}^2} K(x-z) \approx \{w_j \sim p(w)\} : \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos w_j^T(x-z)$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos w_j^T x \cos w_j^T z + \sin w_j^T x \sin w_j^T z$$

$$\tilde{\phi}(x) = \frac{1}{n} (\cos w_1^T x, \dots, \cos w_n^T x, \sin w_1^T x, \dots, \sin w_n^T x)$$

$$K(x-z) = \langle \tilde{\phi}(x), \tilde{\phi}(z) \rangle$$

¹ $e^{ix} = \cos x + i \sin x$

² $\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^N f(u_i)$

Для гауссова ядра:

$$p(w) = \mathcal{N}(0, 1)$$

2.2 ЕМ алгоритм

Смесь распределений:

$$\begin{cases} p(x) = \sum_{k=0}^K \pi_k p_k(x) \\ \sum \pi_k = 1 \end{cases}$$

Вероятностный эксперимент:

Выбираем K из $[\pi_1, \dots, \pi_K]$, выбираем x из $p_{i_k}(x)$

Z - скрытые переменные

$$Z = \{0, 1\}^K, \sum Z_k = 1$$

$$p(Z_k = 1) = \pi_k$$

$$p(z) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{Z_k}$$

$$p(x | Z_k = 1) = p_k(x)$$

$$p(x | z) = \prod_{k=1}^K (p_k(x)^{Z_k})$$

$$p(x, z) = p(x | z)p(z) = \prod_{k=1}^K (\pi_k p_k(x))^{Z_k}$$

$$p(x) = \sum_{k=1}^K p(x, z = k) = \sum_{k=1}^K \pi_k p_k(x)$$

Вероятностная кластеризация:

$p_k(x)$ - распределение k -го кластера

$$x \rightarrow (p_1(x), \dots, p_k(x))$$

Хотим описать X смесью распределений

$$p(x) = \sum_{k=1}^K \pi_k \phi(x | \theta_k), \phi(x | \theta_k) \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma), \theta = (\mu, \Sigma)$$

Неполное правдоподобие:

$$\ln(P(X | \Theta)) = \sum_{i=1}^l \log \sum_{k=1}^K \pi_k \phi(x_i | \theta_k) \rightarrow \max_{\theta}$$

Логарифм многооптимальная функция - просто оптимизировать ее сложно
Используем функцию полного правдоподобия

$$\log(P, X | \Theta) = \sum_{i=1}^l \log \sum_{k=1}^K (\pi_k \phi(x_i | \theta_k))^{Z_k}$$

$$\sum_{i=1}^l \sum_{k=1}^K Z_{ik} (\log \pi_k + \log \phi(x_i | \theta_k)) \rightarrow \max_{\Theta}$$

Известно аналитическое решение для нормального распределения.
Не знаем Z_{ik}

$$\Theta = (\pi_1, \dots, \pi_k, \theta_1, \dots, \theta_k)$$

Используем метод ALS для поиска Z, Θ

1. Оптимизация по скрытым переменным

Апостериорное распределение: $p(Z | X, \Theta) = \frac{P(X, Z | \Theta)}{p(X | \Theta)}$

$$Z^* = \arg \max_Z p(Z | X, \Theta)$$

2. Оптимизировать по Θ

$$\log p(X, Z^* | \Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$$

3. Повторять до сходимости

Можно лучше. Не гарантирует сходимости

ЕМ-алгоритм - метод обучения моделей со скрытыми переменными

ЕМ-алгоритм

1. Е-шаг - вычисляем $p(Z | X, \Theta)$ и запоминаем

2. М-шаг

$$E_{Z \sim p(Z | X, \Theta)} \log p(X, Z | \Theta) = \sum_Z p(Z | X, \Theta) \log p(X, Z | \Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$$

Вывод ЕМ-алгоритма

$$\log p(X | \Theta) = Z(q, \Theta) + KL(q || p)$$

$$L(q, \Theta) = \sum_Z q(Z) \log \frac{p(X, Z | \Theta)}{q(Z)}$$

$$KL(q || p) = - \sum_Z q(Z) \log \frac{p(Z | X, \Theta)}{q(Z)}$$

$$\forall q(Z)$$

$L(q, \Theta)$ - нижняя оценка

Берем $q(Z) = p(Z | X, \Theta)$ - получаем Е-шаг

$L(q, \Theta) = \sum_{Z \sim q(Z)} p(Z) \log(\dots)$ - М-шаг

ЕМ-алгоритм дает гарантии на рост правдоподобия

3 ЕМ алгоритм 2

Свойства

1. $\log P(X | \Theta^{new}) \geq \log P(X | \Theta^{old})$
2. Если Θ_i не является стационарной точкой l, то $\Theta_{i+1} \neq \Theta_i$

$$\nabla l(\Theta_i) \neq 0$$

$$\log P(X | \Theta_i) = L(q | \Theta_i) + KL(q(\Theta_i) || p)$$

$$KL = 0 \rightarrow \nabla_{\Theta} KL(q || p) = 0 \rightarrow \nabla L(q | \Theta_i) \neq 0 \rightarrow$$

На М шаге точно сдвинемся и поменяем Θ

Теорема

$$Q(\Theta, \Theta^{Old}) = E_{z \sim p(Z|X, \Theta^{Old})} \log P(Z, X | \Theta^{Old})$$

Пусть Q непрерывна по обоим аргументам

Тогда:

1. Все предельные точки последовательности Θ являются стационарными точками $\log P(X | \Theta)$

2. $\log P(X \mid \Theta)$ монотонно сходится к $\log P(X \mid \Theta^*)$ - одной из стационарных точек

Отвлеченная штука:

X - обучающая выборка

Хотим подогнать под нее распределение $p(x \mid \theta)$

Эмпирическое распределение:

$$\hat{p}(x \mid X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l [x = x_i]$$

Минимизировать KL-дивергенцию между эмпирическим и параметрическим распределением.

$$KL(\hat{p}(x \mid X) \parallel p(x \mid \theta)) \rightarrow \min_{\theta}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^l \frac{1}{l} \log \frac{1/l}{p(x_i \mid \theta)} = \sum_{i=1}^l \frac{1}{l} \log(1/l) - \log p(x_i \mid \theta) \rightarrow \\ &\quad \sum_{i=1}^l \log p(x_i \mid \theta) \rightarrow \max_{\theta} \end{aligned}$$

4 Поиск аномалий

В обучении есть только один класс - неаномальный, надо научиться отделять от него аномалии

Несбалансированная классификация

1. (Under/over)sampling - взвешенный функционал ошибки
2. Синтетические объекты

(a) SMOTE

- i. Выбираем объекты X_1 из минорного класса, выбираем случайный объект из k ближайших соседей тоже из минорного класса X_2
- ii. Новый объект: $X = \alpha X_1 + (1 - \alpha) X_2, \alpha \sim U(0, 1)$
- iii. Предполагает существование объектов между X_1, X_2

(b) Аугментации

Одноклассовая классификация

Бенчмарк: Классификация X на нормальные и аномальные, стандартные метрики

1. Статистический подход - описываем плотностью $p(x)$ для новых объектов смотрим на вероятность - $p(x)$ - novelty score.

Откуда брать p

- (a) Параметрический подход:

$$\sum_{i=1}^l \log P(x | \theta) \rightarrow \max_{\theta}$$

- (b) Непараметрический подход:

- i. $d = 1$:

$$p(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{2h} P(\xi \in [x - h, x + h])$$

$$\begin{aligned} \hat{p}(x) &= \frac{1}{2h} \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbb{I}[|x_i - x| < h] = \\ &= \frac{1}{lh} \sum_{i=1}^l \frac{1}{2} \mathbb{I}\left[\frac{|x_i - x|}{h} < 1\right] \end{aligned}$$

Можно заменить на более гладкую плотность:

$$\frac{1}{lh} \sum_{i=1}^l \frac{1}{2} K\left(\frac{x_i - x}{h}\right)$$

- A. $K(z) = K(-z)$
B. $\int_{\mathcal{R}} K(z) dz = 1$
C. $K(z) \geq 0$
D. Не возрастает при $Z > 0$

- ii. $d > 1$:

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{lV(h)} \sum_{i=1}^l K\left(\frac{\rho(x_i, x)}{h}\right)$$

$$V(h) = \int K\left(\frac{\rho(x_i, x)}{h}\right) dx$$

h - гиперпараметр

2. Метрический подход

x - аномалия, если он далеко от других объектов

Смотреть на количество объектов в ϵ -окрестности?

Плохой подход:

Надо смотреть не на единую окрестность, а смотреть на плотность объектов в отдельной точке и на основе нее оценивать окрестность

Определения:

(a) $\rho_k(x)$ - такое минимальное число n , что:

Для $\geq k$ объектов из $X/\{x\}$ выполнено $\rho(x, z) \leq n$

Для $\leq k-1$ объектов выполнено $\rho(x, z) < n$

По сути: расстояние до k -го ближайшего соседа

(b) k -окрестность:

$$\mathcal{N}_k(x) = \{z \in X/\{x\} : \rho(x, z) \leq \rho_k(x)\}$$

(c) Reachability Distance:

$$rd_k(x, z) = \max(\rho_k(z), \rho(x, z))$$

Позволяет сгладить расстояние между объектами

(d) Local Reachability Distance

$$lrd_k(x) = \frac{1}{\frac{1}{|\mathcal{N}_k(x)|} \sum_{z \in \mathcal{N}_k(x)} rd_k(x, z)}$$

Обращенное среднее расстояние от x до ближайших соседей

(e) Local Outlier Factor

$$LOF_k(x) = \frac{\frac{1}{|\mathcal{N}_k(x)|} \sum_{z \in \mathcal{N}_k(x)} lrd_k(z)}{lrd_k(x)}$$

Отлавливаем объекты у которых соседи находятся в плотных областях, но сами они находятся далеко от соседей

3. Model-based AD

(a) Есть примеры нормальных объектов

(b) Хотим найти наименьшую область, содержащую все объекты

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - \rho)$$

Идея:

Отделяем X от начала координат с помощью $a()$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|w\|^2 + \frac{1}{\nu \ell} \sum \xi_i - \rho \rightarrow \min_{w, \xi, \rho} \\ \langle w, x_i \rangle \geq \rho - \xi_i, \forall i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

ν - гиперпараметр

$$\sum [a(x) = -1] \leq \nu$$

Требования к решению:

- i. Отделить как можно больше объектов от 0. За это отвечает $\sum \xi_i$
- ii. Максимизировать отступ. За это отвечает $\|w\|^2$
- iii. Гиперплоскость как можно дальше от нуля. За это отвечает ρ

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - \rho)$$

Можно записать двойственную задачу:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \sum \lambda_i \lambda_j K(x_i, x_j) \rightarrow \min_{\lambda} \\ 0 < \lambda_i \leq \frac{1}{\nu \ell} \\ \sum \lambda_i = 1 \end{cases}$$

С помощью ядра получаем компактную область

4. Random projections

(a) Isolation Forest

Строим жадное дерево со случайными предикатами по случайным признакам

Если в каком-то листе оказывается 1 объект - прекращаем разбиение

Аномальные объекты рано получают свой лист

Обучение:

Строим лес из N деревьев, в каждом случайные предикаты.

Максимальная глубина $D = \log_2 \ell$

Применение:

$h_n(x)$ - оценка аномальности x с точки зрения n дерева

$K_n(x)$ - глубина листа в который попадает x в n дереве

Нужно сделать поправку на количество объектов в листе

$$h_n(x) = K_n(x) + C(m_n(x))$$

$$C(m) = 2H(m-1) - 2\frac{m-1}{m}$$

$$H(i) \approx \ln i + 0.577$$

Можно использовать и $\log_2(m)$

$$a(x) = 2^{-\frac{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N h_n(x)}{C(l)}}$$

$C(l)$ - средняя длина пути

(b) Extra Random Trees

Берем индикатор попадания в листья и строим линейную модель

Как измерять качество:

1. Anomaly detection

Есть примеры аномалий, но мало данных

Смотрим какое количество аномалий модель угадывает

2. Novelty detection

Аномалии не даны, качество модели оценивается глазами

5 Обучение без учителя

1. Кластеризация: DBScan, Спектральная классификация, Affinity Propagation

2. Внешние метрики качества кластеризации

3. Тематическое моделирование

K-means:

Основная проблема - ищет сферические кластеры

5.1 DBScan

Типы объектов:

1. Ядровые:
В ϵ -окрестности находится N объектов
2. Пограничные объекты:
Достижимы из ядровых, находится в ϵ -окрестности ядрового
3. Выбросы:
Все остальные

Псевдокод:

```
K = 0 #Num clusters
rho #metric
epsilon , N #hyperparam
for i = 1 ... l:
    if label(x[i]) != 0:
        continue
    #point neighborhood
    U = {x in X | rho(x[i], x[j]) <= epsilon}
    if |U| < N:
        label(x[i]) = noise
        continue
    K++ # found new cluster if |U| > N
    label(x[i]) = K
    U = U \ {x[i]}
    for x[j] in U:
        if label(x[j]) = noise:
            label(x[j]) = K
        if label(x[j]) != 0:
            continue
        label(x[j]) = K
    #point neighborhood
    R = {xm in X | rho(x[m], x[j]) < epsilon}
    if |R| >= N:
        #new core object neighborhood included in U
        U = U & R
```

Преимущества:

1. Находит кластеры сложной формы
2. Находит выбросы
3. Быстрый
4. Не надо задавать число кластеров

Недостатки:

1. Проблемы если кластеры разной плотности
2. Проблемы с точками на краях
3. Не работает если кластеры характеризуются неплотность
4. Не параллелится

5.2 Иерархическая кластеризация

Цель: Найти кластерную структуру

Визуализировать разную структуру кластеров при разном их количестве

Агломеративная кластеризация

Начинаем с того, что каждый объект является кластером

Псевдокод:

```

C = {{x[1]}, {x[2]}, ..., {x[l]}}
for n = 2, ..., l:
    G, H = argmin rho(G, H) #find nearest clusters
    C = (C \ {G, H}) U {G U H}

```

Функция расстояния между кластерами ρ :

1. Single Linkage:

$$\rho_{sl}(G, H) = \min_{x_i \in G, x_j \in H} \rho(x_i, x_j)$$

Чувствителен к выбросам

Главная проблема: Chaining

Алгоритм подцепляет отдельные объекты, а не кластеры

Дендрограмма - картинка присоединения объектов

2. Complete linkage

$$\rho_{cl}(G, H) = \max_{x_i \in G, x_j \in H} \rho(x_i, x_j)$$

Кластеры не будут компактными

3. Group Average

$$\rho_{ga}(G, H) = \frac{1}{|G| |H|} \sum_{x_i \in G, x_j \in H} \rho(x_i, x_j)$$

5.3 Графовая кластеризация

$G = (X, E)$

E - ребра:

1. Полный граф - все вершины связаны

$$w_{ij} = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

2. KNN-граф:

$$w_{ij} \neq 0 \Leftrightarrow x_i, x_j \text{ ближайшие соседи}$$

3. ϵ -граф:

$$w_{ij} \neq 0 \Leftrightarrow \rho(x_i, x_j) \leq \epsilon$$

Поиск решение

1. Найти связные компоненты (для Зего варианта)

Тупой метод

2. Минимальное остовное дерево (Алгоритм Краскала)

(a) Начинаем с отдельных вершин

(b) Сливаем два кластера с максимальным ребром между ними

(c) Повторить пока не будет K кластеров

(d) Это агломеративная кластеризация с sl

(e) Решает задачу:

$$\max \min_{x_i \in G, x_j \in H} \rho(x_i, x_j)$$

3. Спектральная кластеризация

$$A, B \subset X, A \cap B = \emptyset$$

$$W(A, B) = \sum_{x_i \in A, x_j \in B} w_{ij}$$

$$X = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_k$$

Ошибка кластеризации:

$$\text{Ratio Cut}(A_1, \dots, A_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^K \frac{w(A_i, \bar{A}_i)}{|A_i|} \rightarrow \min_{A_1, \dots, A_k} (\star)$$

$$\bar{A}_i = X \setminus A_i$$

Хотим, чтобы ребра между кластерами были как можно менее значимы \rightarrow Каждый кластер должен быть изолированным

$K = 2 \rightarrow$ Задача поиска максимального потока

$K > 2 \rightarrow$ NP-полная задача

$$G = (X, E)$$

$d_i = \sum_{j=1} dw_{ij}$ - сумма ребер, которые с ней связаны

$$D = \text{diag}(d_1, \dots, d_l)$$

$L = D - W$, W - матрица смежности, L - **лаплассиан**

Свойства лаплассиана

(a)

$$f \in R^d$$
$$f^T L f = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l w_{ij} (f_i - f_j)^2$$

(b) L - симметричная

(c) L - неотрицательно определенная

Теорема

(a) Кратность $\lambda = 0$ у L равна числу компонент связности графа
Кратность:

- i. Собственные значения: $Ax = \lambda x$
- ii. $\det(A - \lambda I) = 0 \rightarrow \lambda_i$
- iii. λ_i - решение
- iv. $\lambda_i, \forall i$ - спектр графа
- v. Характеристическое уравнение выражаем в виде характеристического многочлена и раскладываем его в виде решений

$$P_A(\lambda) = (-1)^n \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i) = (-1)^n (\lambda - \lambda_1)^{k_1} \dots$$

k_1 называется кратностью для λ_1

(b) A_1, \dots, A_k

Вектор индикатор: $f_i = ([x_j \in A_i])_{j=1}^\ell$

f_1, \dots, f_k - собственные векторы для $\lambda = 0$

Доказательство:

$K = 1$:

(a) Является ли $\lambda = 0$ собственным значением

$$f = (1, \dots, 1)$$

$$Lf = Df - Wf = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_\ell \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sum w_{1,j} \\ \vdots \\ \sum w_{\ell,j} \end{pmatrix} = 0$$

(b) Кратность $\lambda = 0 = 1 \rightarrow$ нет других собственных векторов

Допустим:

$$\exists f' \in R^\ell : \exists p \neq q, f'p \neq f'q, Lf' = 0$$

$$(f')^T Lf' = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^\ell w_{ij} (f'_i - f'_j)^2 = 0$$

$$\forall i, j : \begin{cases} w_{ij} = 0 & \text{Нет ребра} \\ f'_i = f'_j \end{cases}$$

Граф G связный \rightarrow Существует путь из p в q \rightarrow

Путь: $w \rightarrow i_1 \rightarrow \dots \rightarrow p$

$$w_{pi_1} \neq 0 \rightarrow f'p = f'_{i_1} \rightarrow w_{i_1 \dots} \neq 0 \rightarrow \dots \rightarrow f'_p = f'_{i_1} = \dots = f'_q$$

\perp

$K > 1$:

Можно упорядочить объекты так, чтобы L был блочно-диагональным

$$L = \begin{pmatrix} L_1 & 0 & 0 \\ 0 & L_2 & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & 0 & L_K \end{pmatrix}$$

Спектр блочно-диагональной матрицы = объединение спектров отдельных блоков

$$L_i \rightarrow f_i = ([x_j \in A_i])_{j=1}^\ell$$

Кратность $\lambda = 0$ равна K

Гипотеза: x_i, x_j - похожие объекты \Rightarrow у собственного вектора f_i для $\lambda_i \approx 0$, будет $f_{ij} \approx f_{ik}$

Для связанных графов не берем $\lambda = 0$, т.к. тогда будет одна компонентна

Алгоритм:

- (a) Строим лапласиан
- (b) Находим m (гиперпараметр) нормированных собственных векторов u_1, \dots, u_m , соотв. наименьшим собственным значениям.
Сложность: $O(l^3)$
- (c) $U = (u_1 \mid \dots \mid u_m) \in R^{\ell \times m}$
- (d) Новые признаки близки для объектов в одной плотной области
- (e) K-means

Как это связано с задачей (\star) :

Если эту задачу релаксировать и искать не жесткое приписывание к классам, а распределение, то ее решение U .

Part II

Семинары

6 Семинар: Задачи условной оптимизации

Учебник: *Boyd, Convex Optimization*

$$\begin{cases} f_0(x) \rightarrow \min_{x \in R^d} \\ f_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_i(x) = 0, i = 1, \dots, p \end{cases}$$

$$G(x) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m I_-(f_i(x)) + \sum_{i=1}^p I_0(h_i(x)) \rightarrow \min$$

Штрафы за нарушение ограничений:

$$I_-(z) = \begin{cases} 0, z \leq 0 \\ +\infty, z > 0 \end{cases}$$

$$I_0 = \begin{cases} 0, z = 0 \\ +\infty, z \neq 0 \end{cases}$$

$G(x) \rightarrow \infty$ в точках где не выполняется условие

Проблема: Недифференцируема

Заменяем функции на их аппроксимации ($\hat{I}_- = ax$)

Лагранжиан:

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$
$$\lambda_i \geq 0$$

x - прямые (primal) переменные

λ, ν - двойственные переменные

Двойственная функция

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu)$$

- Двойственная функция всегда вогнутая

- Дает нижнюю оценку на минимум функции в прямой задаче
 x' - допустимая точка (все условия выполнены)

$$L(x', \lambda, \nu) = f_0(x') + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x') + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x')$$

$$f_i(x) \leq 0, h_i(x) = 0 \rightarrow L(x', \lambda, \nu) \leq f_0(x')$$

$$\inf_x L(x, \lambda, \nu) \leq \inf_{x'} L(x', \lambda, \nu) \leq \inf_{x'} f_0(x')$$

\uparrow - это и есть решение исходной задачи

$$g(\lambda, \nu) \leq f_0(x_*)$$

$$g(\lambda, \nu) \rightarrow \max_{\lambda, \nu}, \lambda_i \geq 0$$

λ^*, ν^* - решение двойственной задачи

$g(\lambda^*, \nu^*) \leq f_0(x_*)$ - слабая двойственность

$g(\lambda^*, \nu^*) = f_0(x_*)$ - сильная двойственность

Достаточное условие сильной двойственности (Условие Слейтера)

– Задача выпуклая:

f_0, f_1, \dots, f_m - выпуклые

h_1, \dots, h_p - линейные

– $\exists x'$, что все ограничения выполнены строго

Пусть имеет место сильная двойственность:

$$g(\lambda^*, \nu^*) = f_0(x_*)$$

$$g(\lambda^*, \nu^*) = \inf_x (f_0(x) + \sum \lambda^* f_i(x) + \sum \nu^* h_i(x)) \leq f_0(x_*) + \sum \lambda^* f_i(x_*) + \sum \nu^* h_i(x_*) \leq f_0(x_*)$$

Все неравенства являются равенствами:

- Если решить безусловную задачу при подставлении λ^*, ν^* , то получим решение прямой задачи
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0$ - условие дополняющей нежесткости

Теорема Куна-Такера

Необходимые условия для

$$\begin{cases} \nabla_x L(x_*, \lambda^*, \nu^*) = 0 \\ f_i(x) \leq 0 \\ h_i(x) = 0 \\ \lambda_i \geq 0 \\ \lambda_i f_i(x_*) = 0 \\ \text{Сильная двойственность} \end{cases} \Leftrightarrow x_*, \lambda^*, \nu^* \text{ решения}$$

7 Семинар 3: ЕМ алгоритм

На М-шаге:

$$\Theta = \arg \max_{\Theta} E_q \log p(X, Z \mid \Theta)$$

$$\log p(X \mid \Theta_{i+1}) > \log p(X \mid \Theta_i)$$

Задача: **Шумная разметка изображений 100 экспертами**

i - изображение, j - эксперт: $l_{ij} \in \{0, 1\}$

Истинный класс для картинки $Z_i \in \{0, 1\}$

Дополнительные параметры:

$$\beta_i \in (0, +\infty), \alpha_j \in \mathcal{R}$$

β - сложность изображения, α - уровень эксперта

$$p(l_{ij} = Z_i \mid Z_i, \alpha_j, \beta_i) = \sigma(\alpha_j \beta_i) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha_j \beta_i}}$$

$$p(Z_i, l_i \mid \alpha, \beta) = p(Z_i) \prod_j p(l_{ij} \mid Z_i, \alpha_j, \beta_i)$$

$p(Z_i)$?

1. Задать как 1/2, т.к. имеем два класса
2. Задать как баланс классов
3. Найти как параметр $p(1) = \pi$

$$p(Z, l \mid \alpha, \beta) = \prod_i Z_i \prod_j p(l_{ij} \mid Z_i, \alpha_j, \beta_i)$$

Необходимо свести вероятность $l_{ij} = Z_i$ к вероятности l_{ij}

$$p(l_{ij} = Z_i \mid \dots) = \sigma(\alpha\beta)$$

$$p(l_{ij} \neq Z_i \mid \dots) = 1 - \sigma(\alpha\beta)$$

Бернулли:

$$p(l \mid \dots) = p(l = Z \mid \dots)^{[l=Z]} \times p(l \neq Z \mid \dots)^{[l \neq Z]} = \sigma(\alpha\beta)^{[l=Z]} \sigma(-\alpha\beta)^{[l \neq Z]}$$

$$p(Z_i, l_{ij} \mid \dots) = p(Z_i) \prod_j \sigma(\alpha\beta)^{[l=Z]} \sigma(-\alpha\beta)^{[l \neq Z]}$$

Е-шаг:

$$q^*(Z_i) = p(Z_i \mid l_{ij}, \alpha_j, \beta_i) \xrightarrow{\text{Теорема Байеса}} \frac{p(Z_i, l_{ij} \mid \alpha, \beta)}{p(l_{ij} \mid \alpha, \beta)} = \frac{p(Z_i, l_{ij} \mid \alpha, \beta)}{\sum_t p(t, l_{ij} \mid \alpha, \beta)}$$

$$q^*(Z) = \frac{p(Z_i) \prod_j \sigma(\alpha\beta)^{[l=Z]} \sigma(-\alpha\beta)^{[l \neq Z]}}{\sum_{t \in \{0,1\}} p(t_i) \prod_j \sigma(\alpha\beta)^{[l=t]} \sigma(-\alpha\beta)^{[l \neq t]}} = \frac{\gamma_i^{Z_i}}{\gamma_i^0 + \gamma_i^1} = \frac{e^{\log \gamma_i^{Z_i}}}{e^{\log \gamma_i^0 + \gamma_i^1}}$$

М-шаг:

$$E_{q^*} \log p(Z, l \mid \alpha, \beta) \rightarrow \max_{\alpha, \beta}$$

$$\begin{aligned} E_{q^*} \log \prod_i p(Z, l \mid \alpha, \beta) &= \sum_i E_{q_i^*} \log p(Z, l \mid \alpha, \beta) = \\ &= \sum_i E_{q_i^*} [\log p(Z_i) + \sum_j [l_{ij} = Z_i] \log \sigma(\alpha\beta) + [l_{ij} \neq Z_i] \log \sigma(-\alpha\beta)] \rightarrow \max_{\alpha, \beta} \\ &\quad \sum_i \sum_j \sum_{t \in \{0,1\}} q_i^*(t) [[l_{ij} = t] \log \sigma(\alpha\beta) + [l_{ij} \neq t] \log \sigma(-\alpha\beta)] \end{aligned}$$

Оптимизируем:

$$\frac{\partial}{\partial x} \log \sigma(x) = \sigma(-x)$$

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

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

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} E_{q^*} \log p(Z, l \mid \alpha, \beta) = \sum_i \sum_t q_i^* \beta ([l = t] \sigma(-\alpha \beta)) - [l \neq t] \sigma(\alpha \beta))$$

По β аналогично

8 Семинар 4: Основы байесовских методов

Существует распределение $p(x, y)$

Интересует распределение: $p(y \mid x)$

Формула Байеса

$$p(y \mid x) = \frac{p(x \mid y)p(y)}{p(x)}$$

$p(x \mid y)$ - правдоподобие X , распределение объектов для некоторого класса

$p(y)$ - априорное распределение, доли классов в обучающей выборке

$p(x)$ - нормировочная константа

Функционал среднего риска

$$R(a) = \int_Y \int_X L(y, a(x)) p(x, y) dx dy$$

$$E_{y,x} L(y, a(x))$$

Как использовать оптимальное распределение, когда оно найдено?

$$L(y, a) = [y \neq a]$$

Функционал среднего риска:

$$R(a) = \int_Y \int_X [y \neq a(x)] p(x, y) dx dy = \sum_{y=1}^K \int_X [y \neq a(x)] p(x, y) dx dy =$$

$$= \int_X \sum_{y \neq a(x)} p(x, y) dx dy = \int_X (1 - \sum_{y=a(x)} p(x, y)) dx dy =$$

$$1 - \int_X p(x, a(x)) dx dy \rightarrow \min \Rightarrow a_*(x) = \arg \max_{y \in Y} P(y | x)$$

Для регрессии:

$$L(y, a) = (y - a)^2$$

$$a_*(x) = E(y | x)$$

Как найти $p(y | x)$

В классификации:

$$a_*(x) = \arg \max_{y \in Y} p(y | x) = \arg \max_{y \in Y} \frac{p(x | y)p(y)}{p(x)} =$$

$$= \arg \max_{y \in Y} p(x | y)p(y)$$

$p(y)$ задается исходя из распределения y

$p(x | y, \theta)$ находим θ ММП

Пример:

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

Правдоподобие:

$$\prod_{i=1}^{\ell} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - < w, x_i >)^2}{2\sigma^2}\right) \rightarrow \max_w$$

$$\log L = -\ell \log \sqrt{2\pi\sigma^2} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{\ell} (y_i - < w, x_i >)^2 \rightarrow \max_w \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{\ell} (y_i - < w, x_i >)^2 \rightarrow \min_w$$

Классификация:

Нужно найти $p(x | y, \theta)$ для всех классов

$$p(x | y, \theta) = \mathcal{N}(\mu_y, \Sigma_y)$$

Можем найти μ_y, Σ_y по ММП

Если параметры распределены нормально - Нормальный дискриминантный анализ

Если $\Sigma_y = \Sigma$, метод называется линейный дискриминант Фишера

Разделяющая поверхность:

$$p(y = +1 | x, \theta) = p(y = -1 | x, \theta)$$

$\Sigma_{-1} \neq \Sigma_{+1} \Rightarrow$ квадратичная поверхность

$\Sigma_{-1} = \Sigma_{+1} \Rightarrow$ Линейная поверхность

Больше распределений:

$$p(w | y, x) = \frac{p(y | x, w)p(w)}{p(x, y)}$$

$p(w) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$ - запрещаем модели большие веса

$$\log P(w | y, x) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{\ell} (y_i - \langle w, x_i \rangle)^2 - \frac{\ell}{2\alpha^2} \sum_{j=1}^{\alpha} w_j^2 \rightarrow \max_w$$

Фактически: MSE с регуляризацией L^2

$$\lambda = \frac{\ell\sigma^2}{\alpha^2}$$

Что если $w_j \sim \iota, \alpha$?

Отдельный коэффициент регуляризации для каждого параметра - такое не особо выводится в классическом машинном обучении \rightarrow RVM

Наивный Байесовский алгоритм

Исходя из предположения о независимости признаков:

$$p(x | y) = \prod_{j=1}^d p(x_j | y)$$

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} p(y | x) = \arg \max_y (\ln P(y) + \sum_{j=1}^d \ln P(x_j | y))$$