Логистическая регрессия. Дискриминантный анализ. Отбор признаков.

Владимир Агеев, 622 гр.

3 октября, 2017г.

Задача классификации

Дано:

- Множество объектов $X \in \mathbb{R}^p$;
- Множество ответов Y, $Y_i \in \mathcal{G}$.

Задача:

- По выборке $X^N = (\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1}^N$ построить классификатор $a: \mathbb{R}^p \to \mathcal{G}$, который по новому вектору признаков X предскажет отметку класса, т.е. $a(\mathbf{x}) \in \mathcal{G}$;
- На a(x) должна достигаться минимальная ошибка классификации в некотором смысле;
- Хотим знать вероятности принадлежности объекта к тому или иному классу.

Задача классификации

На генеральном языке:

- ullet $\xi \in \mathbb{R}^p$ случайный вектор признаков;
- $\eta \in \mathcal{G} = \{G_k\}_{k=1}^K$ дискретная случайная величина, класс;
- $P(\xi, \eta)$ их совместное распределение.

Дано: выборка $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1}^N - N$ реализаций случайных векторов $(\boldsymbol{\xi}, \eta)$.

По выборке необходимо построить классифицирующую функцию

$$a: \mathbb{R}^p \to \mathcal{G}$$
.

Мера ошибки предсказания (функция потерь):

$$\mathbf{L} = (\lambda_{ij})_{i,j=1}^K, \ K = card(\mathcal{G}), \lambda_{ij}$$
 – цена ошибки.

Средний риск: $R(a) = \mathbb{E}(\mathsf{L}(\eta, a(\xi)))$.

Задача: $R(a) o \min_a$.

Байесовский классификатор

Средний риск:

$$R(a) = \mathbb{E}(L(\eta, a(\xi))) = \mathbb{E}_{\xi} \sum_{k=1}^{K} L(G_k, a(\xi)) P(G_k \mid \xi).$$

Функция классификации:

$$a(\mathbf{x}) = \underset{G \in \mathcal{G}}{\operatorname{arg \, min}} \sum_{k=1}^{K} \mathbf{L}(G_k, G) P(G_k \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}).$$

Подставим сюда 0-1 функцию потерь

$$a(\mathbf{x}) = \arg\min_{G \in \mathcal{G}} (1 - P(G \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})).$$

Равносильно

$$a(\mathbf{x}) = \underset{G \in \mathcal{G}}{\operatorname{arg \, max}} \, P(G \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \underset{G \in \mathcal{G}}{\operatorname{arg \, max}} \, P(G) P(\boldsymbol{\xi} \mid \boldsymbol{\eta} = G).$$

4 / 29

Это решение называется байесовским классификатором.

Для построения байесовского классификатора, необходимо знать апостериорные вероятности $P(G\mid \pmb{\xi}=\mathbf{x})$. Обозначим

- $p_k(\mathbf{x}) = P(\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} \mid \eta = G_k)$ условные плотности классов;
- $\pi_k = P(\eta = G_k)$ априорные вероятности, $\sum_{k=1}^K \pi_k = 1$.

По теореме Байеса

$$P(\eta = G_k \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \frac{p_k(\mathbf{x})\pi_k}{\sum_{i=1}^K p_i(\mathbf{x})\pi_i}.$$

Возникает вопрос: откуда брать априорные вероятности?

- Брать равновероятные: $\pi_i = \frac{1}{K}$;
- ullet Брать пропорционально объемам классов $\pi_i = rac{n_i}{N};$
- Соответственно имеющейся информации.

Предположим, что $P(\boldsymbol{\xi} \mid \eta = \mathcal{G}_k) = \mathcal{N}_{p}(\mu_k, \Sigma_k)$, его плотность

$$\rho_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_k|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_k)^{\mathrm{T}} \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \mu_k)}.$$

Подставим плотности в байесовский классификатор

$$\begin{split} a(\mathbf{x}) &= \underset{i \in 1 \dots K}{\arg\max} \, \pi_i p_i(\mathbf{x}) = \underset{i \in 1 \dots K}{\arg\max} \, \log(\pi_i p_i(\mathbf{x})) = \\ &= \underset{i \in 1 \dots K}{\arg\max} (-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_i)^\mathrm{T} \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\mathbf{x} - \mu_i) - \frac{1}{2} \log(|\boldsymbol{\Sigma}_i|) + \log(\pi_i)) = \\ &= \underset{i \in 1 \dots K}{\arg\max} \, g_i(\mathbf{x}). \end{split}$$

Заметим, что получившийся классификатор квадратично зависит от x, отсюда название quadratic discriminant analysis.

Пусть распределения классов $P(\xi \mid \eta = G_k) = \mathcal{N}_p(\mu_k, \Sigma)$. Упростим классификатор:

$$a(\mathbf{x}) = \underset{i \in 1...K}{\arg \max} \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_i)^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu_i) - \frac{1}{2} \log(|\Sigma|) + \log(\pi_i) \right) =$$

$$= \underset{i \in 1...K}{\arg \max} \left(-\frac{1}{2} \mu_i^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} \mu_i + \mu_i^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} \mathbf{x} + \log(\pi_i) \right) = \underset{i \in 1...K}{\arg \max} \delta_i(\mathbf{x}).$$

Зависимость от х линейна.

Разделяющая два класса гиперплоскость:

$$\begin{aligned} &\{\mathbf{x}: \delta_i(\mathbf{x}) = \delta_j(\mathbf{x})\} = \\ &= \{\mathbf{x}: -\frac{1}{2}(\mu_i - \mu_j)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mu_i + \mu_j) + (\mu_i - \mu_j)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} + \log(\pi_i/\pi_j) = 0\}. \end{aligned}$$

7 / 29

От соотношения между априорными вероятностями зависит положение границы относительно классов (к какому она ближе).

Оценка параметров

ОМП параметров нормальных плотностей:

• Среднее

$$\widehat{\mu}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j: y_j = G_i} \mathsf{x}_j;$$

• Ковариационная матрица класса

$$\widehat{\Sigma}_i = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j: y_j = G_i} (\mathbf{x}_j - \widehat{\mu}_i)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}_j - \widehat{\mu}_i);$$

Pooled ковариационная матрица

$$\widehat{\Sigma} = \sum_{j=1}^{K} \frac{n_i - 1}{N - K} \widehat{\Sigma}_i.$$

Возвращение к вероятностям

Если нам необходимо получить вероятности отношения ${\bf x}$ к классу i, то, вычислив $\widehat{\delta}_i({\bf x})$, можно вычислить

$$\widehat{P}(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \frac{e^{\widehat{\delta}_i(\mathbf{x})}}{\sum\limits_{j=1}^K e^{\widehat{\delta}_j(\mathbf{x})}},$$

подставив оценки $\pi_i \widehat{p_i}(\mathbf{x})$ в формулу байеса для $P(\eta = G_k \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})$. Далее относим \mathbf{x} к тому классу, для которого оценка максимальна.

Regularized Discriminant Analysis

Компромис между LDA и QDA.

• Regularized Discriminant Analysis. Рассматривается матрица

$$\widehat{\Sigma}_i(\alpha) = \alpha \widehat{\Sigma}_i + (1 - \alpha) \widehat{\Sigma},$$

где $\widehat{\Sigma}$ — pooled ковариационая матрица. Здесь $\alpha \in [0,1]$ порождает континуум моделей между LDA и QDA, выбирается скользящим контролем.

• Модифицируем pooled ковариационную матрицу и рассмотрим

$$\widehat{\Sigma}(\gamma) = \gamma \widehat{\Sigma} + (1 - \gamma)\sigma^2 \mathbf{I}_p,$$

где γ определяет вид ковариационной матрицы и выбирается скользящим контролем.

Пришли к выбору ковариационных матриц $\widehat{\Sigma}_i(lpha,\gamma)$ скользящим контролем.

Проблемы с ковариационной матрицей

Матрица $\widehat{\Sigma}_i$ окажется вырожденной если признаки линейно зависимы, и может оказаться плохо обусловлена.

Способы разрешения этой проблемы:

• Регуляризация ковариационной матрицы. Предлагается обращать

$$\widehat{\Sigma}_i + \tau \mathbf{I}_p,$$

где au выбрано по скользящему контролю.

• Нормальный наивный байесовский классификатор. Пусть

$$p_i(x) = \prod_{j=1}^p p_{ij}(x_j), \quad p_{ij}(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}} e^{-\frac{(x_j - \mu_{ij})^2}{2\sigma_{ij}^2}}.$$

Классифицирующая функция:

$$\delta_i(x) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^p \frac{(x_j - \mu_{ij})^2}{2\sigma_{ij}^2} + \log(\pi_i).$$

Канонические переменные

Пусть $\zeta = A \xi$, тогда $P(\zeta \mid \eta = G_k) = \mathcal{N}_p(A^{\mathrm{T}}\mu_k, A^{\mathrm{T}}\Sigma_k A)$. На выборочном языке: $Z = A^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$. Выборочная дисперсия Z имеет вид

$$A^{\mathrm{T}}\mathsf{T}A = A^{\mathrm{T}}(\mathsf{W} + \mathsf{B})A = A^{\mathrm{T}}\mathsf{W}A + A^{\mathrm{T}}\mathsf{B}A,$$

где

- T total covariance matrix X,
- первое слагаемое оценка внутригрупповых отклонений,
- второе слагаемое оценка межгрупповых отклонений.

Канонические переменные

Выборочная дисперсия Z имеет вид

$$A^{\mathrm{T}}\mathsf{T}A = A^{\mathrm{T}}(\mathsf{W} + \mathsf{B})A = A^{\mathrm{T}}\mathsf{W}A + A^{\mathrm{T}}\mathsf{B}A,$$

Обобщенная задача на собственные числа и собственные вектора:

$$rac{A^{\mathrm{T}}\mathsf{B}A}{A^{\mathrm{T}}\mathsf{W}A}
ightarrow \max_{A}.$$

Путь $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_d$ – собственные числа $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{W}$, а A_1,\ldots,A_d – собственные вектора. Причем $A_i^\mathrm{T}\mathbf{W}A_j=0$. Максимум равен λ_1 и достигается на A_1 .

$$\max_{A,A\perp A_1} \frac{A^{\mathrm{T}}\mathbf{B}A}{A^{\mathrm{T}}\mathbf{W}A} = \lambda_2$$

достигается на A_2 и так далее.

Вектора A_i – канонические коэффициенты, новые признаки Z_i – канонические переменные, Z_i ортогональны в обычном смысле.

Значимость канонических переменных

Сколько канонических переменных нам окажется достаточно взять?

 $H_0: A_i, i=\ell,\ldots,d$ не описывают отличия.

Введем статистику $\Lambda - prime$:

$$\Lambda_{\ell}^{p} = \prod_{i=1}^{d} \frac{1}{1 + \lambda_{i}}.$$

Тогда гипотезу выше можно переформулировать так

$$H_0: \Lambda_\ell^p = 1 \Leftrightarrow \lambda_\ell = \ldots = \lambda_d = 0 \Leftrightarrow \mathit{rank} \, \mathsf{B} = \ell - 1.$$

Критерий:

$$t = \Lambda_{\ell}^{p} \sim \Lambda_{\nu_{\mathsf{B}} + (\ell-1), \nu_{\mathsf{W}} - (\ell-1)}.$$

Последовательный дискриминантный анализ

Какие признаки следует исключить?

- Имеют большой коэффициент множественной корреляции $\mathsf{R}^2 = \mathsf{R}^2_{pooled}(\xi_i; \{\xi_j \mid j \neq i\});$
- Не влияют на качество разделения. Введем статистику

$$(Partial \Lambda)_i = \Lambda(X_i \mid X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_p) =$$

$$= \frac{\Lambda(X_1, \dots, X_p)}{\Lambda(X_i \mid X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_p)}.$$

Гипотеза:

$$H_0: (Partial \Lambda)_i = 1.$$

Критерий:

$$F_i = rac{1 - (Partial \Lambda)_i /
u_{
m B}}{(Partial \Lambda)_i / (
u_{
m W} - p + 1)} \sim F_{
u_{
m B},
u_{
m W} - p + 1}.$$

Далее жадным образом отбираем признаки.

Постановка задачи

Задача: по выборке построить функцию классификации $a(\xi)$, на которой достигается минимум среднего риска

$$R(a) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \sum_{k=1}^K \mathsf{L}(G_k, a(\boldsymbol{\xi})) P(G_k \mid \boldsymbol{\xi}) o \min_{\boldsymbol{a}}.$$

Выше был получен оптимальный байесовский классификатор, на котором достигается минимум R(a):

$$a(\mathbf{x}) = \underset{G \in \mathcal{G}}{\operatorname{arg\,max}} P(G \mid \boldsymbol{\xi}).$$

Далее рассмотрим логистическую регрессию как метод оценки апостериорных вероятностей $P(G \mid \xi)$.

Модель задается системой

$$\log \frac{P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})}{P(\eta = G_K \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})} = \beta_{i0} + \beta_i^{\mathrm{T}} \mathbf{x}, \quad i = 1, \dots, K - 1.$$

То есть границы между классами линейны.

Перейдем от логитов к вероятностям, их сумма будет равна единице

$$\begin{split} P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) &= \frac{e^{\beta_{i0} + \beta_i^{\mathrm{T}} \mathbf{x}}}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\beta_{k0} + \beta_k^{\mathrm{T}} \mathbf{x}}}, \quad i = 1, \dots, K-1, \\ P(\eta = G_K \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) &= \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\beta_{k0} + \beta_k^{\mathrm{T}} \mathbf{x}}}. \end{split}$$

Метод максимального правдоподобия

Воспользуемся ММП для оценки параметров условного распределения. Логарифм функции правдоподобия

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log P(\eta = G_k \mid \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\mathsf{x}}_i; \theta), \quad \theta = (\beta_{10}, \beta_1^{\mathrm{T}}, \dots, \beta_{(K-1)0}, \beta_{K-1}^{\mathrm{T}}).$$

Случай двух классов $\mathcal{G}=\{0,1\}$. Тогда

$$\ell(eta) = \sum_{i=1}^N (y_i eta^{\mathrm{T}} \mathsf{x}_i - \log(1 + e^{eta^{\mathrm{T}} \mathsf{x}_i})), \quad eta = \{eta_{10}, eta_1\}.$$

Обозначим $p(\mathbf{x},\theta)=P(\eta=0\mid \pmb{\xi}=\mathbf{x};\theta)$ и $1-p(\mathbf{x},\theta)=P(\eta=1\mid \pmb{\xi}=\mathbf{x};\theta)$. Приравниваем производные к нулю, получаем систему из p+1 уравнения

$$\frac{\partial \ell(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}(y_{i} - p(x_{i}; \beta)) = 0.$$

Задача классификации

Минимизация аппроксимированного эмпирического риска

На языке ML рассмотрим задачу классификации, $Y = \{-1, +1\}$. Введем некотороые понятия:

- $a(x,\beta) = \operatorname{sign} f(x,\beta)$ семейство классификаторов;
- $M_i(\beta) = y_i f(x_i, \beta)$ отступ объекта x_i ;
- $\mathcal{L}(M_i(\beta))$ монотонно невозрастающая функция потерь, мажорирующая [M < 0].

Задача поиска классификатора $a(x, \beta)$ сводится к задаче

$$Q(\beta, \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{N} [M_i(\beta) < 0] \leq \sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}(M_i(\beta)) \to \min_{\beta}.$$

Положив $\mathcal{L}(M_i(\theta)) = -\log P(x_i, y_i; \theta)$ получаем эквивалентность с задачей максимизации правдоподобия.

Минимизация аппроксимированного эмпирического риска

В логистической регрессии минимизируется аппроксимация:

$$Q(eta) = \sum_{i=1}^N \log(1 + e^{-y_i eta^{\mathrm{T}} x_i})
ightarrow \min_{eta},$$

то есть функция потерь имеет вид $\mathcal{L}(M_i(heta)) = \log(1 + e^{-y_i eta^{\mathrm{T}} x_i}).$

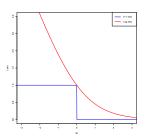


Рис.: Логистическая функция потерь

Метод Ньютона-Рафсона

Используем метод Ньютона-Рафсона для решения системы

$$\frac{\partial \ell(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}(y_{i} - p(\mathbf{x}_{i}; \beta)) = 0.$$

Гессиан логарифма правдоподобия

$$\frac{\partial^2 \ell(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^{\mathrm{T}}} = -\sum_{i=1}^N x_i x_i^{\mathrm{T}} p(\mathbf{x}_i; \beta) (1 - p(\mathbf{x}_i; \beta)) = 0.$$

 eta^{old} — начальное приближение eta, итерация алгоритма:

$$\beta^{\text{new}} = \beta^{\text{old}} - \left(\frac{\partial^2 \ell(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^{\text{T}}}\right)^{-1} \frac{\partial \ell(\beta)}{\partial \beta},$$

где производные вычисляются в точке β^{old} .

Итерация алгоритма H-P как IRLS

Пусть у – ответы y_i , X – матрица данных, $\mathbf{p} = (p(\mathbf{x}_i; \beta^{old}))$, $\mathbf{W} = diag\{w_1, \dots, w_n\}$, где $w_i = p(\mathbf{x}_i; \beta^{old})(1 - p(\mathbf{x}_i; \beta^{old}))$. Тогда

$$\frac{\partial \ell(\beta)}{\partial \beta} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}}(\mathbf{y} - \mathbf{p}), \quad \frac{\partial^2 \ell(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^{\mathrm{T}}} = -\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\mathbf{X}.$$

Перепишем шаг алгоритма Ньютона-Рафсона

$$\beta^{\textit{new}} = \beta^{\textit{old}} + (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}(\mathbf{y} - \mathbf{p}) = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W}\mathbf{z}.$$

Получили взвешенную регрессию, где в качестве ответа выступает

$$\mathbf{z} = \mathbf{X}\beta^{old} + \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{p}).$$

Получили IRLS, на каждом шаге решается задача

$$\beta^{new} = \underset{\beta}{\arg\min}(\mathbf{z} - \mathbf{X}\beta)^{\mathrm{T}}\mathbf{W}(\mathbf{z} - \mathbf{X}\beta).$$

В качестве eta^{old} можно взять оценки линейной регрессии или $eta^{old}=0$.

Агеев В.А, 622 гр. LR и DA 3 октября, 2017г. 22 / 29

Регуляризация

LASSO:

$$\max_{\beta_0,\beta} \sum_{i=1}^{N} \left(y_i (\beta_0 + \beta^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i) - \log(1 + e^{\beta_0 + \beta^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i}) \right) - \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|.$$

Ridge Regression:

$$\max_{\beta_0,\beta} \sum_{i=1}^{N} \left(y_i (\beta_0 + \beta^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i) - \log(1 + \mathrm{e}^{\beta_0 + \beta^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i}) \right) - \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2.$$

Для этого можно снова использовать алгоритм Ньютона-Рафсона, λ выбирается с помощью скользящего контроля.

Посмотрим на log-posterior odds между классами i и K в случае LDA:

$$\log \frac{P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})}{P(\eta = G_K \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})} =$$

$$= -\frac{1}{2}(\mu_i - \mu_K)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mu_i + \mu_K) + (\mu_i - \mu_K)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{x} + \log(\pi_i/\pi_K) =$$

$$= \alpha_{i0} + \alpha_i^{\mathrm{T}} \mathbf{x}.$$

С другой стороны, линейная логистическая регрессия имеет линейные логиты по построению

$$\log \frac{P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})}{P(\eta = G_K \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})} = \beta_{i0} + \beta_i^{\mathrm{T}} \mathbf{x}.$$

Модели выглядят очень похоже. Различие заключается в том как оцениваются линейные коэффициенты.

Агеев В.А, 622 гр. LR и DA 3 октября, 2017г. 24 / 29

Выпишем совместную плотность ${m \xi}$ и η

$$P(\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}, \eta = G_i) = P(\mathbf{x})P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}).$$

И в линейном дискриминантном анализе, и в логистической регрессии второй множитель выражается как

$$P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \frac{e^{\beta_{i0} + \beta_i^{\mathrm{T}} \mathbf{x}}}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\beta_{k0} + \beta_k^{\mathrm{T}} \mathbf{x}}}.$$

В логистической регрессии $P(\mathbf{x})$ – произвольная плотность, а параметры $P(\eta = G_i \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})$ оцениваются максимизацией условного правдоподобия (discriminative learning). Решается задача

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log P(\eta = G_k \mid \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}_i; \theta) \to \max_{\theta}.$$

В LDA максимизируется полноценный логарифм функции правдоподобия совместной плотности

$$P(\mathbf{x}, \eta = G_i) = \phi(\mathbf{x}; \mu_i, \Sigma)\pi_i,$$

где $\phi(\mathbf{x}; \mu_i, \Sigma)$ - плотность нормального распределения (generative learning).

Решается задача

$$\ell(\mu_i, \Sigma) = \sum_{i=1}^{N} \phi(\mathbf{x}_i; \mu_i, \Sigma) \pi_i \to \max_{\mu_i, \Sigma}.$$

При этом P(x) – это смесь распределений

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{K} \phi(\mathbf{x}; \mu_i, \Sigma) \pi_i.$$

Некоторые плюсы и минусы методов:

- Предположение о нормальности распределения дает нам больше информации о параметрах, отсюда меньше дисперсия оценок;
- Точки, далекие от разделяющей плоскости (у которых в логистической регрессии вес будет меньше), влияют на оценку ковариационной матрицы. LDA не является робастным по отношению к выбросам;
- В логистической регрессии более гибкая модель;
- В логистической регрессии требуется оценка меньшего числа параметров;
- Алгоритм Ньютона-Рафсона требует обращения матрицы на каждом шаге.

Непараметрическая классификация

Непараметрическая оценка плотности

Локальная непараметрическая оценка Парзена-Розенблата

$$\widehat{p}_h(\mathbf{z}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{p} \frac{1}{h_j} K\left(\frac{z_j - x_{ij}}{h_j}\right),$$

где

- K(x) ядро, четная и нормированная функция $\int K(x) dx = 1$;
- h > 0 ширина окна, выбирается с помощью скользящего контроля (LOO).

Если

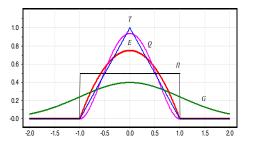
- K(x) непрерывно, $\int K(x)^2 dx < \infty$,
- ullet последовательность h_N такая, что $\lim_{N o\infty}h_N=0$, $\lim_{N o\infty}Nh_N=\infty$,

тогда $\widehat{p}_{h_m}(\mathbf{z}) o p(x)$ п.в. при $N o \infty$.

Непараметрическая классификация

Непараметрическая оценка плотности

Выбор ядра не влияет на качество оценки, но определяет гладкость функции \hat{p}_h и влияет на эффективность вычислений.



- Е Епанечикова
- Q Квартическое
- Т Треугольное
- G Гауссовское
- П Прямоугольное