Методы машинного обучения. Байесовская теория классификации

Воронцов Константин Вячеславович
www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov
вопросы к лектору: vokov@forecsys.ru

материалы курса:
github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-21-22
орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

ВМК МГУ • 2 ноября 2021

Содержание

Вероятностная постановка задачи классификации

X — объекты, Y — классы, $X \times Y$ — в.п. с плотностью $p(x,y)$
Дано: $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \sim p(x,y)$ — простая выборка (i.i.d.)
Найти: $a\colon X \to Y$ с минимальной вероятностью ошибки

Пусть известна совместная плотность

$$p(x,y) = p(x)\,\mathsf{P}(y|x) = \mathsf{P}(y)p(x|y)$$

$\mathsf{P}(y)$ — *априорная вероятность* класса y
$p(x|y)$ — *функция правдоподобия* класса y
$\mathsf{P}(y|x)$ — *апостериорная вероятность* класса y

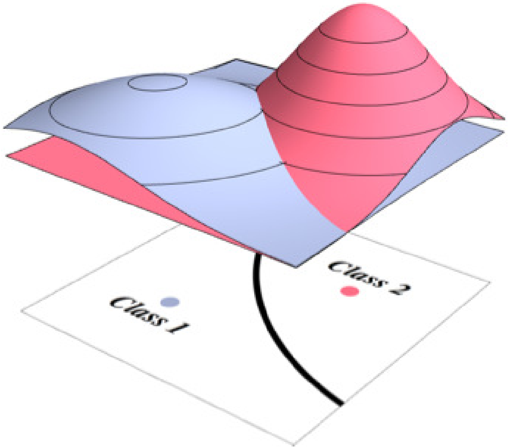
По формуле Байеса: $\mathsf{P}(y|x) = \frac{P(y)p(x|y)}{p(x)}$

Байесовский классификатор:

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

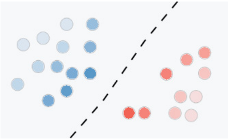
Классификация по максимуму функции правдоподобия

Частный случай: $a(x) = \arg\max\limits_{y \in Y} p(x|y)$ при равных $P(y)$

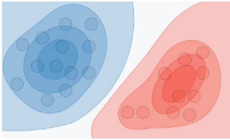


Два подхода к обучению классификации

1. **Дискриминативный** (discriminative):
   x — неслучайные векторы
   $P(y|x,w)$ — модель классификации
   Примеры: LR, GLM, SVM, RBF



2. **Генеративный** (generative):
   $x \sim p(x|y)$ — случайные векторы
   $p(x|y,\theta)$ — модель генерации данных
   Примеры: NB, PW, FLD, RBF



Байесовские модели классификации — генеративные:

- моделируют форму классов не только вдоль границы, но и на всём пространстве, что избыточно для классификации
- требуют больше данных для обучения
- более устойчивы к шумовым выбросам

Оптимальный байесовский классификатор

Теорема

Пусть $\mathsf{P}(y)$ и $p(x|y)$ известны, $\lambda_y \geqslant 0$ — *потеря от ошибки* на объекте класса $y \in Y$. Тогда минимум среднего риска

$$R(a) = \sum_{y \in Y} \lambda_y \int [a(x) \neq y] \, p(x, y) dx$$

достигается *оптимальным байесовским классификатором*

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

Замечание 1: после подстановки эмпирических оценок $\hat{P}(y)$ и $\hat{p}(x|y)$ байесовский классификатор уже не оптимален

Замечание 2: задача оценивания плотности распределения — более сложная, чем задача классификации

Задачи эмпирического оценивания

Частотная оценка априорной вероятности:

$$\hat{P}(y) = \ell_y / \ell, \quad \ell_y = |X_y|, \quad X_y = \{x_i \in X \colon y_i = y\}$$

Оценки плотности $\hat{p}(x|y)$ по i.i.d. выборкам X_y, $y \in Y$:

1. Параметрическая оценка плотности:
$$\hat{p}(x|y) = \varphi(x, \theta_y); \qquad \theta_y = \arg\max_{\theta} \sum_{x_i \in X_y} \log \varphi(x_i, \theta)$$

2. Непараметрическая оценка плотности:
$$\hat{p}(x|y) = \sum_{x_i \in X_y} \frac{1}{\ell V_h} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

3. Восстановление смеси распределений:
$$\hat{p}(x|y) = \sum_{j=1}^{k} w_{yj} \varphi(x_i, \theta_{yj}); \quad (w_y, \theta_y) = \arg\max_{w,\theta} \sum_{x_i \in X_y} \log \hat{p}(x|y)$$

Наивный байесовский классификатор (Naïve Bayes)

Наивное предположение:
признаки $f_j\colon X \to D_j$ — независимые случайные величины с плотностями распределения, $p_j(\xi|y)$, $y \in Y$, $j = 1, \dots, n$

Тогда функции правдоподобия классов представимы в виде произведения одномерных плотностей по признакам, $x^j \equiv f_j(x)$:

$$p(x|y) = p_1(x^1|y) \cdots p_n(x^n|y), \quad x = (x^1, \dots, x^n), \quad y \in Y$$

Прологарифмировав под argmax, получим классификатор

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y \hat{P}(y) + \sum_{j=1}^{n} \ln \hat{p}_j(x^j|y) \right)$$

Восстановление n одномерных плотностей
— намного более простая задача, чем одной n-мерной

Признаки с плотностями экспоненциального вида

Предположение: одномерные плотности экспоненциальны:

$$p_j(x^j|y;\theta_{yj},\varphi_{yj}) = \exp\left(\frac{x^j\theta_{yj} - c(\theta_{yj})}{\varphi_{yj}} + h(x^j,\varphi_{yj})\right)$$

где θ_{yj}, φ_{yj} — параметры, $c(\theta)$, $h(x,\varphi)$ — параметры-функции.

Задача максимизации log-правдоподобия

$$L(\theta,\varphi) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{y\in Y}\left(\sum_{x_i\in X_y} \ln p(x_i^j|y;\theta_{yj},\varphi_{yj})\right) \to \max_{\theta,\varphi}$$

распадается на независимые подзадачи для каждого (y,j):

$$\sum_{x_i\in X_y}\left(\frac{x^j\theta_{yj} - c(\theta_{yj})}{\varphi_{yj}} + h(x^j,\varphi_{yj})\right) \to \max_{\theta_{yj},\varphi_{yj}}$$

По θ_{yj} задача решается аналитически, по φ_{yj} не всегда

Линейный наивный байесовский классификатор

Решение θ_{yj} через среднее значение признака j в классе y:

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_{yj}} = 0 \quad\Rightarrow\quad c'(\theta_{yj}) = \sum_{x_i \in X_y} \frac{x_i^j}{|X_y|} \equiv \bar{x}_{yj} \quad\Rightarrow\quad \theta_{yj} = [c']^{-1}(\bar{x}_{yj})$$

Решение φ_{yj} не всегда выражается из уравнения $\frac{\partial L}{\partial \varphi_{yj}} = 0$, но для распределений Пуассона, Бернулли, биномиального $\varphi_{yj} = 1$; для гауссовского распределения (и если φ_{yj} не зависит от y):

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi_{yj}} = 0 \quad\Rightarrow\quad \varphi_{yj} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left(x_i^j - \bar{x}_{y_i j}\right)^2$$

В итоге Naïve Bayes оказывается линейным классификатором:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\sum_{j=1}^{n} x^j \underbrace{\frac{\theta_{yj}}{\varphi_{yj}}}_{w_{yj}} + \underbrace{\ln(\lambda_y P(y)) - \sum_{j=1}^{n} \frac{c(\theta_{yj})}{\varphi_{yj}}}_{b_y} + \underbrace{\cancel{h(x^j, \varphi_{yj})}}_{\text{если от } y \text{ не зависит}} \right)$$

Напоминание. Примеры экспоненциальных распределений

μ — параметр матожидания, $\theta = g(\mu)$ — функции связи:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\Bigl(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\Bigr) &= \exp\Bigl(\frac{x\mu-\frac{1}{2}\mu^2}{\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2}\ln(2\pi\sigma^2)\Bigr)\\
\mu^x(1-\mu)^{1-x} &= \exp\bigl(x \ln\frac{\mu}{1-\mu} + \ln(1-\mu)\bigr)\\
C_k^x\left(\frac{\mu}{k}\right)^x\left(1-\frac{\mu}{k}\right)^{k-x} &= \exp\bigl(x\ln\frac{\mu}{k-\mu} + k\ln(k-\mu) + \ln C_k^x - k\ln k\bigr)\\
\frac{1}{x!}e^{-\mu}\mu^x &= \exp\bigl(x\ln(\mu) - \mu - \ln x!\bigr)
\end{aligned}$$

распределение	значения	$c(\theta)$	$c'(\theta)$	$[c']^{-1}(\mu)$	φ	$h(x,\varphi)$
нормальное	$\mathbb{R}$	$\frac{1}{2}\theta^2$	θ	μ	σ^2	$-\frac{x^2}{2\varphi} - \frac{\ln(2\pi\varphi)}{2}$
Бернулли	$\{0,1\}$	$\ln(1+e^\theta)$	$\frac{1}{1+e^{-\theta}}$	$\ln\frac{\mu}{1-\mu}$	1	0
биномиальное	$\{0,\dots,k\}$	$k\ln\frac{1+e^\theta}{k}$	$\frac{k}{1+e^{-\theta}}$	$\ln\frac{\mu}{k-\mu}$	1	$\ln C_k^x - k\ln k$
Пуассона	$\{0,1,\dots\}$	e^θ	e^θ	$\ln\mu$	1	$-\ln x!$

Задачи классификации (категоризации) текстов

x — текстовый документ (последовательность слов)
$y \in Y$ — класс (тематическая категория или рубрика)
$j \in \{1, \dots, n\}$ — слова, n — число слов в словаре
$f_j(x_i) = x_i^j$ — частота (число вхождений) слова j в документе x_i
$p_j(x^j|y)$ — распределение Пуассона, экспоненциального вида
$\theta_{yj} = \ln \bar{x}_{yj}$ — оценка максимума правдоподобия, $\varphi_{yj} = 1$

Наивный байесовский классификатор — линейный, с весами θ_{yj}:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Biggl(\sum_{j=1}^{n} \theta_{yj} x^j + \underbrace{\ln(\lambda_y P(y)) - \bar{N}_y}_{b_y} \Biggr),$$

$\bar{N}_y = \sum_{j=1}^{n} c(\theta_{yj}) = \sum_{j=1}^{n} \bar{x}_{yj}$ — средняя длина документов в классе y

Замечание: если $\bar{x}_{yj}$ не зависит от y, то слово j не влияет на $a(x)$

Мультиномиальный наивный байесовский классификатор

$x = (j_1, \ldots, j_{N_x})$ — текстовый документ, длиной N_x слов

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \bigl(\ln p(x|y) + \ln \lambda_y P(y)\bigr)$$

$\pi_{yj} = p(j|y)$ — вероятность слова j в текстах класса y

$$\ln p(x|y) = \ln \prod_{t=1}^{N_x} p(j_t|y) = \sum_{j=1}^{n} \ln(\pi_{yj})^{x^j} = \sum_{j=1}^{n} x^j \ln \pi_{yj}$$

Частотная оценка (оценка максимума правдоподобия):

$$\pi_{yj} = \frac{\#\mathrm{count}(y,j)}{\#\mathrm{count}(y)} = \frac{\sum_{i \in X_y} x_i^j}{\sum_{j=1}^{n} \sum_{i \in X_y} x_i^j} = \frac{\bar{x}_{yj}}{\sum_{j=1}^{n} \bar{x}_{yj}} = \frac{\bar{x}_{yj}}{\bar{N}_y}$$

Тот же линейный NB, но с другой поправкой на длину текста:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\sum_{j=1}^{n} x^j \ln \bar{x}_{yj} + \ln(\lambda_y P(y)) - N_x \ln \bar{N}_y \right)$$

Выводы про наивный байесовский классификатор

Достоинства:

- очень быстрое обучение за $O(\ell n)$ — вычисление $\bar{x}_{yj}$, φ_{yj}
- почти нет переобучения, даже на коротких выборках
- единообразная обработка разнотипных признаков
- хорошее начальное приближение для других методов
- базовый уровень качества при классификации текстов
- оценка полезности признаков: $\max_y p(y|j) = \max_y \frac{\bar{x}_{yj}}{\bar{x}_j}$
- при классификации текстов отбор признаков по полезности удаляет стоп-слова, общую и нерелевантную лексику

Ограничения и недостатки:

- гипотеза о независимости признаков
- низкий уровень качества в большинстве приложений

Напоминание. Метод парзеновского окна (Parzen Window, PW)

Непараметрическая оценка плотности Парзена–Розенблатта с функцией расстояния $\rho(x, x')$, для каждого класса $y \in Y$:

$$\hat{p}_h(x|y) = \frac{1}{\ell_y V_h} \sum_{x_i \in X_y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right),$$

Метод окна Парзена — это метрический классификатор:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y \frac{P(y)}{\ell_y} \sum_{x_i \in X_y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right).$$

Замечание 1: нормирующий множитель $V_h = \int_X K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right) dx$ сокращается под argmax, если он не зависит от x_i и y_i.

Замечание 2 (напоминание): имеем проблемы выбора ядра $K(r)$, ширины окна h, функции расстояния $\rho(x, x')$.

Квадратичный дискриминант (Quadratic Discriminant Analysis)

Гипотеза: каждый класс $y \in Y$ имеет n-мерную гауссовскую плотность с центром μ_y и ковариационной матрицей Σ_y:

$$p(x|y) = \mathcal{N}(x; \mu_y, \Sigma_y) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^\intercal \Sigma_y^{-1}(x-\mu_y)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma_y}}$$

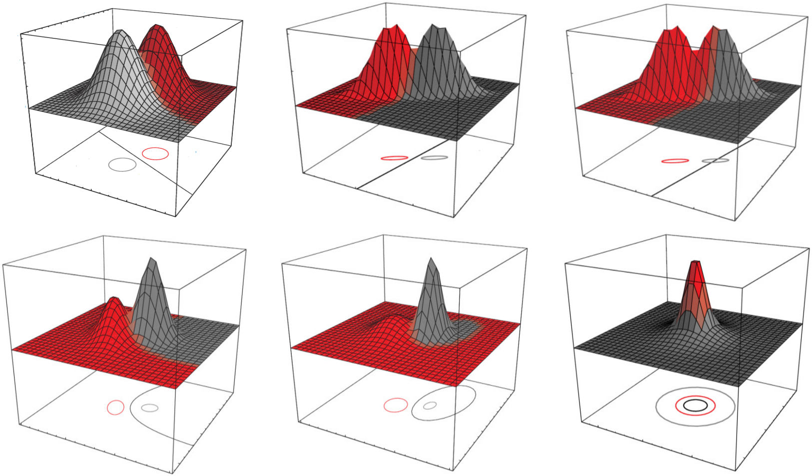
Теорема

1. Разделяющая поверхность, определяемая уравнением $\lambda_y P(y) p(x|y) = \lambda_s P(s) p(x|s)$, квадратична для всех $y, s \in Y$.
2. Если $\Sigma_y = \Sigma_s$, то поверхность вырождается в линейную.

Квадратичный дискриминант — подстановочный алгоритм:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y P(y) - \tfrac{1}{2}(x-\hat{\mu}_y)^\intercal \hat{\Sigma}_y^{-1}(x-\hat{\mu}_y) - \tfrac{1}{2} \ln\det \hat{\Sigma}_y\right)$$

Геометрический смысл квадратичного дискриминанта



Линейный дискриминант Фишера (Fisher Linear Discriminant)

Проблема: для малочисленных классов возможно $\det \hat{\Sigma}_y = 0$.

Пусть ковариационные матрицы классов равны: $\Sigma_y = \Sigma$, $y \in Y$.

Оценка максимума правдоподобия для Σ:

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (x_i - \hat{\mu}_{y_i})(x_i - \hat{\mu}_{y_i})^{\mathsf{T}}$$

Линейный дискриминант — подстановочный алгоритм:

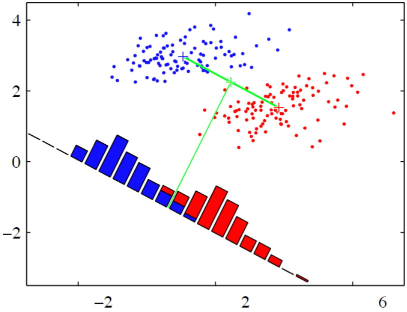
$$\begin{aligned} a(x) &= \arg\max_{y \in Y} \lambda_y \hat{P}(y) \hat{p}(x|y) = \\ &= \arg\max_{y \in Y} \bigl(\underbrace{\ln(\lambda_y \hat{P}(y)) - \tfrac{1}{2} \hat{\mu}_y^{\mathsf{T}} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y}_{\beta_y} + x^{\mathsf{T}} \underbrace{\hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y}_{\alpha_y} \bigr); \end{aligned}$$

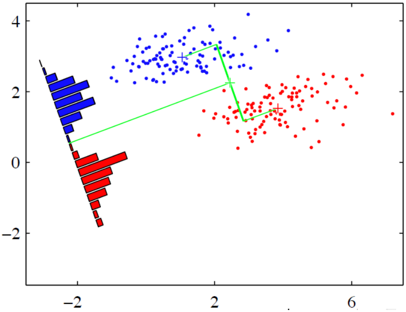
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \bigl(x^{\mathsf{T}} \alpha_y + \beta_y \bigr).$$

Недостаток: всё равно приходится обращать матрицу $\hat{\Sigma}$.

Геометрическая интерпретация линейного дискриминанта

В одномерной проекции на направляющий вектор разделяющей гиперплоскости классы разделяются наилучшим образом, то есть с минимальной вероятностью ошибки:





Fisher R. A. The use of multiple measurements in taxonomic problems. 1936.

Гауссовская смесь с диагональными матрицами ковариации

Гауссовская смесь GMM — Gaussian Mixture Model

Допущения:

1. Функции правдоподобия классов $p(x|y)$ представимы в виде смесей k_y компонент, $y \in Y$
2. Компоненты $j = 1, \dots, k_y$ имеют n-мерные гауссовские плотности с некоррелированными признаками: $\mu_{yj} = (\mu_{yj1}, \dots, \mu_{yjn})$, $\Sigma_{yj} = \mathrm{diag}(\sigma^2_{yj1}, \dots, \sigma^2_{yjn})$:

$$p(x|y) = \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x), \quad p_{yj}(x) = \mathcal{N}(x; \mu_{yj}, \Sigma_{yj})$$

$$\sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} = 1, \quad w_{yj} \geqslant 0$$

EM-алгоритм. Эмпирические оценки средних и дисперсий

Числовые признаки: $f_d\colon X \to \mathbb{R}$, $d = 1, \dots, n$.

E-шаг: для всех $y \in Y$, $j = 1, \dots, k_y$, $d = 1, \dots, n$:

$$g_{yij} = \frac{w_{yj} \mathcal{N}(x_i; \mu_{yj}, \Sigma_{yj})}{p(x_i|y)} \equiv \mathsf{P}(j|x_i, y_i = y)$$

M-шаг: для всех $y \in Y$, $j = 1, \dots, k_y$, $d = 1, \dots, n$

$$w_{yj} = \frac{1}{\ell_y} \sum_{i\colon y_i = y} g_{yij}$$

$$\hat{\mu}_{yjd} = \frac{1}{\ell_y w_{yj}} \sum_{i\colon y_i = y} g_{yij} f_d(x_i)$$

$$\hat{\sigma}^2_{yjd} = \frac{1}{\ell_y w_{yj}} \sum_{i\colon y_i = y} g_{yij} \bigl(f_d(x_i) - \hat{\mu}_{yjd}\bigr)^2$$

Замечание: компоненты «наивны», но смесь не «наивна»

Байесовский классификатор

Подставим гауссовскую смесь в байесовский классификатор:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \underbrace{\lambda_y P_y \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} \underbrace{\mathcal{N}_{yj} \exp\left(-\tfrac{1}{2}\rho_{yj}^2(x, \mu_{yj})\right)}_{p_{yj}(x)}}_{\Gamma_y(x)}$$

$\mathcal{N}_{yj} = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}(\sigma_{yj1} \cdots \sigma_{yjn})^{-1}$ — нормировочные множители;
$\rho_{yj}(x, \mu_{yj})$ — *взвешенная евклидова метрика* в $X = \mathbb{R}^n$:

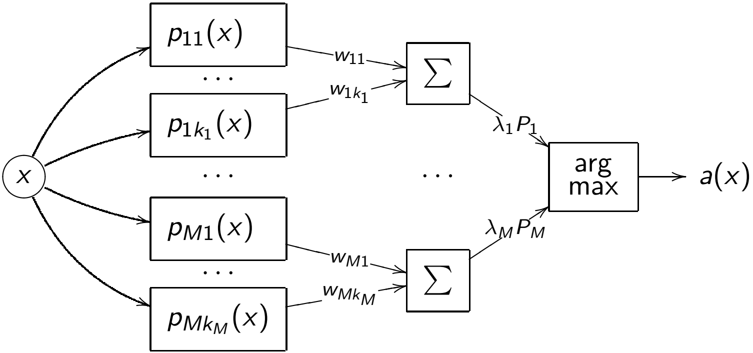
$$\rho_{yj}^2(x, \mu_{yj}) = \sum_{d=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{yjd}^2} \bigl(f_d(x) - \mu_{yjd}\bigr)^2.$$

Интерпретация — как у метрического классификатора:
$p_{yj}(x)$ — близость объекта x к j-й компоненте класса y;
$\Gamma_y(x)$ — близость объекта x к классу y.

Сеть радиальных базисных функций (RBF)

Трёхслойная сеть RBF (Radial Basis Functions):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y P_y \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x)$$



ЕМ-алгоритм как метод обучения радиальных сетей

Отличия генеративного RBF-EM от дискриминативного RBF-SVM:

- опорные векторы μ_{yj} — это не пограничные объекты выборки, а центры локальных сгущений классов
- автоматически строится *структурное описание* каждого класса в виде совокупности компонент — *кластеров*

Преимущества ЕМ-алгоритма:

- ЕМ-алгоритм легко сделать устойчивым к шуму
- как правило, ЕМ-алгоритм довольно быстро сходится

Недостатки ЕМ-алгоритма:

- ЕМ-алгоритм чувствителен к начальному приближению
- Определение числа компонент — трудная задача (простые эвристики могут плохо работать)

Резюме по байесовской теории классификации

- Основная формула: $a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y P(y) p(x|y)$
- Байесовские модели классификации — генеративные:
  — моделируют форму классов на всём пространстве,
  — требуют большего объёма данных для обучения,
  — менее чувствительны к шумовым выбросам
- Наивный байесовский классификатор основан
  на предположении о независимости признаков.
  Это неплохо работает в задачах категоризации текстов

Три подхода к восстановлению плотности $p(x|y)$ по выборке:

- *Параметрический подход:*
  гауссовские классы $\Rightarrow$ нормальный дискриминантный анализ
- *Непараметрический подход:*
  задана функция расстояния $\Rightarrow$ метод парзеновского окна
- *Разделение смеси распределений:*
  классы описываются смесями гауссиан $\Rightarrow$ сеть RBF