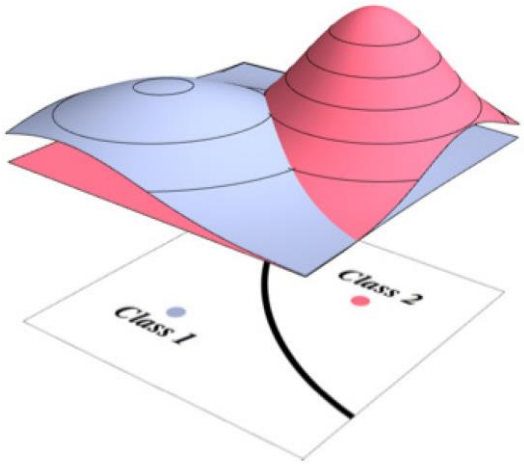
Лекция 17: Методы Байеса

Вероятностная постановка задачи классификации

- X – объекты, Y – классы, $X \times Y$ – в.п. с плотностью $p(x, y)$.
- Дано: $X^l = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^l \sim p(x, y)$ – простая выборка (i.i.d.).
- Найти: $a: X \to Y$ с минимальной вероятностью ошибки.
- Пусть известна совместная плотность

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

  - $P(y)$ – априорная вероятность класса y
  - $p(x|y)$ – функция правдоподобия класса y
  - $P(y|x)$ – апостериорная вероятность класса y



- По формуле Байеса:

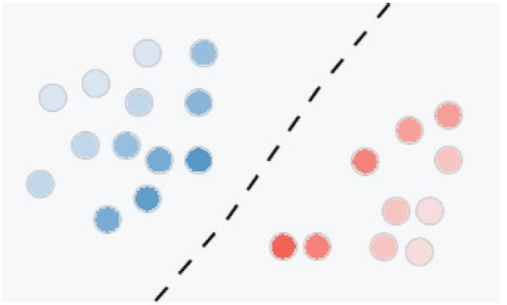
$$\boldsymbol{P(y|x) = \frac{P(y)p(x|y)}{p(x)}}$$

- Байесовский классификатор:

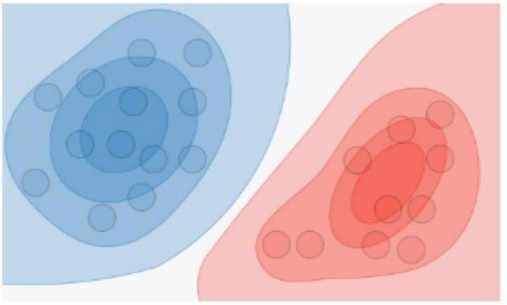
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} P(y|x) = \arg\max_{y \in Y} P(y)p(x|y)$$

Два подхода к обучению классификации

- Дискриминантный (discriminative):
  - x – неслучайные векторы
  - $P(y|x,w)$ – модель классификации
  - Примеры: LR, GLM, SVM



- Генеративный (generative):
  - $x \sim p(x|y)$ – случайные векторы
  - $p(x|y,\theta)$ – модель генерации данных
  - Примеры: NB, RBF, PW и др.



- Байесовские модели – генеративные:
  - Моделируют **форму классов не только вдоль границы**, но и на всем пространстве, что избыточно для классификации
  - Требуют больше данных для обучения
  - Более устойчивы к шумовым выбросам

Оптимальный байесовский классификатор

- Теорема:
  - Пусть $P(y)$ и $p(x|y)$ известны, $\lambda_y \geq 0$ – 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

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

- 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 (смещение?):

$$\hat{P}(y) = \frac{l_y}{l}, \qquad l_y = |X_y|, \qquad X_y = \{x_i \in X : y_i = y\}$$

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

$$\hat{p}(x|y) = \varphi(x, \theta_y); \quad \theta_y = \arg max_\theta \sum_{x_i \in X_y} \log \varphi(x_i, \theta)$$

- Непараметрическая оценка плотности:

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

- Восстановление смеси распределений:

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

Наивный байесовский классификатор (Naïve Bayes)

- Наивное предположение: признаки f_j: $X \to D_j$ – **независимые** случайные величины с плотностями распределения
$$p_j(\xi|y), \qquad y \in Y, \qquad j = 1, \dots, n$$
- Тогда функции правдоподобия классов представимы в виде произведения одномерных плотностей по признакам, $x^j = f_j(x)$:
$$p(x|y) = p_1\left(x^1\middle|y\right) \cdots p_n(x^n|y), \qquad x = \left(x^1, \dots, x^n\right), \qquad y \in Y$$
- **Прологарифмировав** под argmax, получим классификатор
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y}(\ln \lambda_y \hat{P}(y) + \sum_{j=1}^{n} \ln \hat{p}_j(x^j|y))$$
- Восстановление n одномерных плотностей – намного более простая задача, чем одной n-мерной.

Признаки с плотностями экспоненциального вида

- Предположение: одномерные плотности **экспоненциальны**:

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

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

- Задача максимизации log-правдоподобия:

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

распадается на независимые подзадачи для каждой пары (y,j):

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

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

Напоминание. Примеры экспоненциальных распределений

- μ – параметр матожидания, $\boldsymbol{\theta = g(\mu)}$ – функции связи:

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

$$\mu^x(1-\mu)^{1-x} = \exp\left(x\,\boldsymbol{\ln\frac{\mu}{1-\mu}} + \ln(1-\mu)\right)$$

$$C_k^x\left(\frac{\mu}{k}\right)^x\left(1-\frac{\mu}{k}\right)^{k-x} = \exp(x\,\boldsymbol{\ln\frac{\mu}{k-\mu}} + k\ln(k-\mu) + \ln C_k^x - k\ln k)$$

$$\frac{1}{x!}e^{-\mu}\mu^x = \exp(x\,\boldsymbol{ln(\mu)} - \mu - \ln x!)$$

Распределение	Значения	$c(\theta)$	$c'(\theta)$	$[\boldsymbol{c'}]^{-1}(\boldsymbol{\mu})$	$\boldsymbol{\varphi}$	$h(x,\varphi)$
Нормальное	$\mathbb{R}$	$\frac{1}{2}\theta^2$	θ	$\boldsymbol{\mu}$	$\boldsymbol{\sigma^2}$	$-\frac{x^2}{2\varphi} - \frac{\ln(2\pi\varphi)}{2}$
Бернулли	$\{0,1\}$	$\ln(1+e^\theta)$	$\frac{1}{1+e^{-\theta}}$	$\boldsymbol{\ln\frac{\mu}{1-\mu}}$	**1**	0
Биноминальное	$\{0,\dots,k\}$	$k\ln\frac{1+e^\theta}{k}$	$\frac{k}{1+e^{-\theta}}$	$\boldsymbol{\ln\frac{\mu}{k-\mu}}$	**1**	$\ln C_k^x - k\ln k$
Пуассона	$\{0,1,\dots\}$	e^θ	e^θ	$\boldsymbol{\ln\mu}$	**1**	$-\ln x!$

Линейный наивный байесовский классификатор

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

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

- Решение φ_{yj} **не всегда выражается** из уравнения $\frac{\partial L}{\partial \varphi_{yj}} = 0$, но для Пуассона, Бернулли, биноминального $\boldsymbol{\varphi_{yj} = 1}$;

для гауссовского распределения (и если φ_{yj} не зависит от y):

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

- В итоге Naïve Bayes оказывается **линейным** классификатором:

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

Пример

```
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn import naive_bayes
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.inspection import DecisionBoundaryDisplay
```

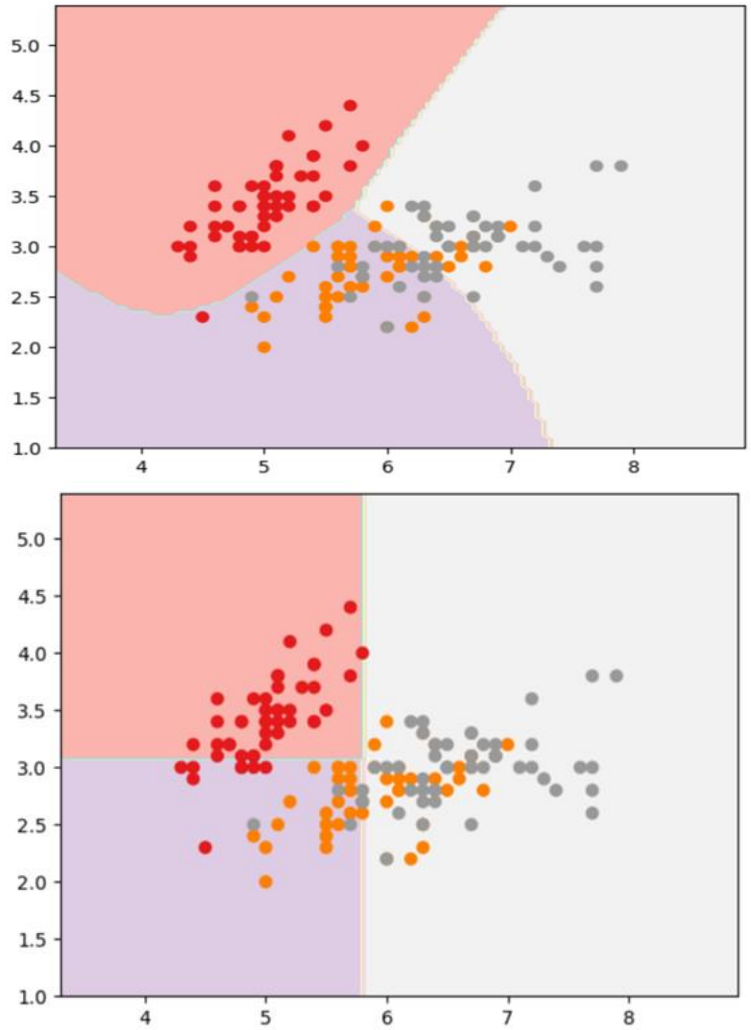
```
X, y = load_iris(return_X_y=True)
X = X[:, :2]
```

```
model = Pipeline([
    ("scaler", StandardScaler()),
    ("bayes", naive_bayes.GaussianNB())
])
```

```
model.fit(X, y)
```

```
DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(model, X, cmap="Pastel1")
plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```

```
DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(Pipeline([
    ("1", StandardScaler(),),
    ("2", naive_bayes.BernoulliNB(),)]).fit(X, y), X, cmap="Pastel1")
plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```



Пример: построить модель прогноза возможности поиграть в теннис

outlook	
P(sunny|p) = 2/9	P(sunny|n) = 3/5
P(overcast|p) = 4/9	P(overcast|n) = 0
P(rain|p) = 3/9	P(rain|n) = 2/5
temperature	
P(hot|p) = 2/9	P(hot|n) = 2/5
P(mild|p) = 4/9	P(mild|n) = 2/5
P(cool|p) = 3/9	P(cool|n) = 1/5
humidity	
P(high|p) = 3/9	P(high|n) = 4/5
P(normal|p) = 6/9	P(normal|n) = 2/5
windy	
P(true|p) = 3/9	P(true|n) = 3/5
P(false|p) = 6/9	P(false|n) = 2/5

P(p) = 9/14
P(n) = 5/14

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	Class
sunny	hot	high	false	N
sunny	hot	high	true	N
overcast	hot	high	false	P
rain	mild	high	false	P
rain	cool	normal	false	P
rain	cool	normal	true	N
overcast	cool	normal	true	P
sunny	mild	high	false	N
sunny	cool	normal	false	P
rain	mild	normal	false	P
sunny	mild	normal	true	P
overcast	mild	high	true	P
overcast	hot	normal	false	P
rain	mild	high	true	N

- Новый пример: <rain, hot, high, false>?
  - $P(x|p) \cdot P(p) = P(rain|p) \cdot P(hot|p) \cdot P(high|p) \cdot P(false|p) \cdot P(p) = 3/9 \cdot 2/9 \cdot 3/9 \cdot 6/9 \cdot 9/14 = 0.010582$
  - $P(x|n) \cdot P(n) = P(rain|n) \cdot P(hot|n) \cdot P(high|n) \cdot P(false|n) \cdot P(n) = 2/5 \cdot 2/5 \cdot 4/5 \cdot 2/5 \cdot 5/14 = 0.018286$
- Вывод - скорее всего не поиграть, т.к. $P(x|n) \cdot P(n) > P(x|p) \cdot P(p)$

Задачи классификации (категоризации) текстов

- Дано:
  - 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}:

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

  - $\bar{N}_y = \sum_{j=1}^{n} c(\theta_{yj}) = \sum_{j=1}^{n} \bar{x}_{yj}$ – 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

- $x = (j_1, \dots, j_{N_x})$ – текстовый документ, длиной N_x слов

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

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

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

- Частотная оценка (оценка максимума правдоподобия):

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

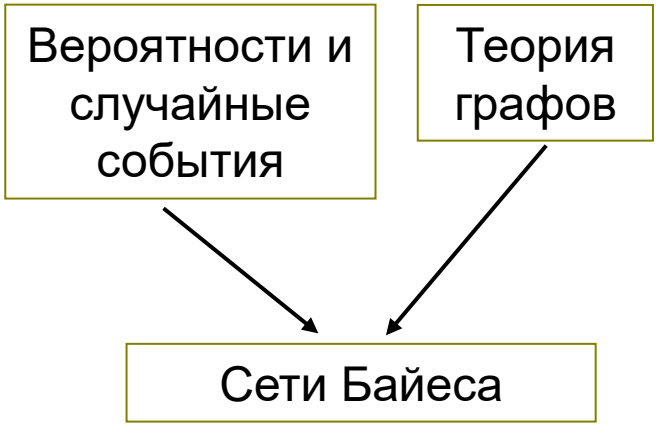
- Тот же линейный NB, но с другой поправкой на длину текста:

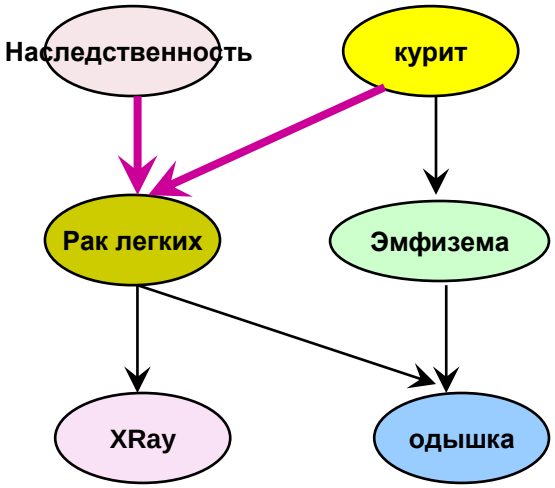
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\sum_{j=1}^{n} x^j \ln \bar{x}_{yj} + \ln \left(\lambda_y P(y) \right) - \boldsymbol{N_x \ln \bar{N}_y} \right)$$

Выводы про наивный байесовский классификатор

- Достоинства:
  - Очень **быстрое обучение** за $O(l\,n)$ – вычисление $\overline{x}_{yj}, \varphi_{yj}$
  - Почти **нет переобучения**, даже на коротких выборках
  - **Единообразная обработка** разнотипных признаков
  - **Хорошее начальное приближение** для других методов
  - **Оценка полезности** признаков: $\max_y p(y|j)$
  - **Базовый уровень качества** при классификации текстов
  - 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

Если зависимые признак?





- Особенности:
  - Случайные переменные (входные или **скрытые**) – **вершины** ориентированного графа
  - Отношения прямой зависимости – **ребра** графа
  - Каждая переменная может зависеть только от **некоторого множества своих соседей**
  - Плотность совместной вероятности значений всех переменных **редуцируется** до произведения условных плотностей

	(FH, S)	(FH, ~S)	(~FH, S)	(~FH, ~S)
Рак	0.8	0.5	0.7	0.1
~Рак	0.2	0.5	0.3	0.9

Байесовская сеть

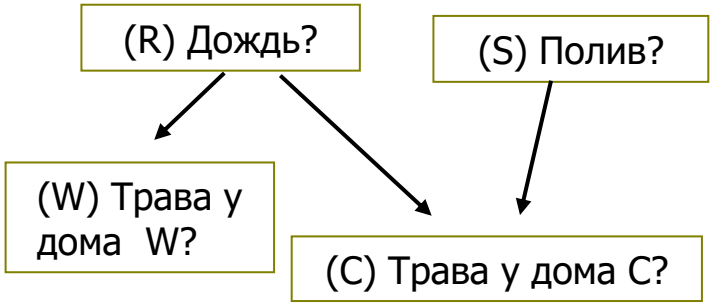
- Сеть Байеса:
  - Состоит из множества случайных переменных и направленных связей между переменными;
  - Каждая переменная (входная или скрытая) может принимать одно из конечного множества взаимоисключающих значений;
  - Переменные вместе со связями образуют ориентированный граф без циклов;
  - К каждой переменной-потомку *A* с переменными-предками $B_1,\ldots,B_n$ приписывается таблица условных вероятностей $P(A|\ B_1,\ldots,B_n)$
  - Переменные, не имеющие предков, описываются безусловными вероятностями, а их потомки на графе – условными
- Редукция совместной вероятности (цепное правило полной вероятности):

$$P(A_1,\ldots,A_n) = \prod_j P\left(A_j \middle| pa\left(A_j\right)\right),$$

где $pa\left(A_j\right)$ - состояния всех переменных – предков для переменной A_j.

Пример

Граф Байесовской сети



Таблицы вероятностей

R	P(R)
t	0.3
f	0.7

S	P(S)
t	0.2
f	0.8

R	P(W=t|R)	P(W=f|R)
t	0.8	0.2
f	0.1	0.9

R	S	P(C=t|R,S)	P(C=f|R,S)
t	t	0.9	0.1
t	f	0.8	0.2
f	t	0.7	0.3
f	f	0.1	0.9

Пример редукции вероятности (с учетом независимости):

4D

$$P(R,S,C,W) = P(R)\cdot P(S|R)\cdot P(C|R,S)\cdot P(W|R,S,C)$$

2D

$$P(R,S,C,W) = P(R)\cdot P(S)\cdot P(C|R,S)\cdot P(W|R)$$

$$P(C=t) = \sum_{R=\{t,f\},S=\{t,f\}} P(R)\cdot P(S)\cdot P(C=t|R,S) =$$

$$= 0.3\cdot 0.2\cdot 0.9 + 0.3\cdot 0.8\cdot 0.8 + 0.7\cdot 0.2\cdot 0.7 + 0.7\cdot 0.8\cdot 0.1 = 0.4$$

$$P(W=t) = \sum_{R=\{t,f\}} P(R)\cdot P(W=t|R) = 0.31$$

Точные и приближенные вычисления вероятностей

- Применение уже обученной сети (расчет вероятностей):
  - Сложность точных вычислений вероятностей растет комбинаторно
  - На практике широко используются приближенные алгоритмы: метод Монте-Карло, Expectation-Maximization, Belief propagation
- «Обучение» - расчет вероятностей при заданной структуре сети:
  - Множество обучающих примеров $\{x_i\}_{i=1}^{l} = \{x_i^1, \dots, x_i^1\}_{i=1}^{l}$, каждый элемент множества – вектор значений для всех переменных x^j (j-й признак), x_i^j - j-й признак i-го примера.
  - Классическая схема – поиск максимума правдоподобия:

$$L = \frac{1}{nl} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{l} \log\left(P\left(x^j \middle| pa\left(x^j\right), x_i\right)\right)$$

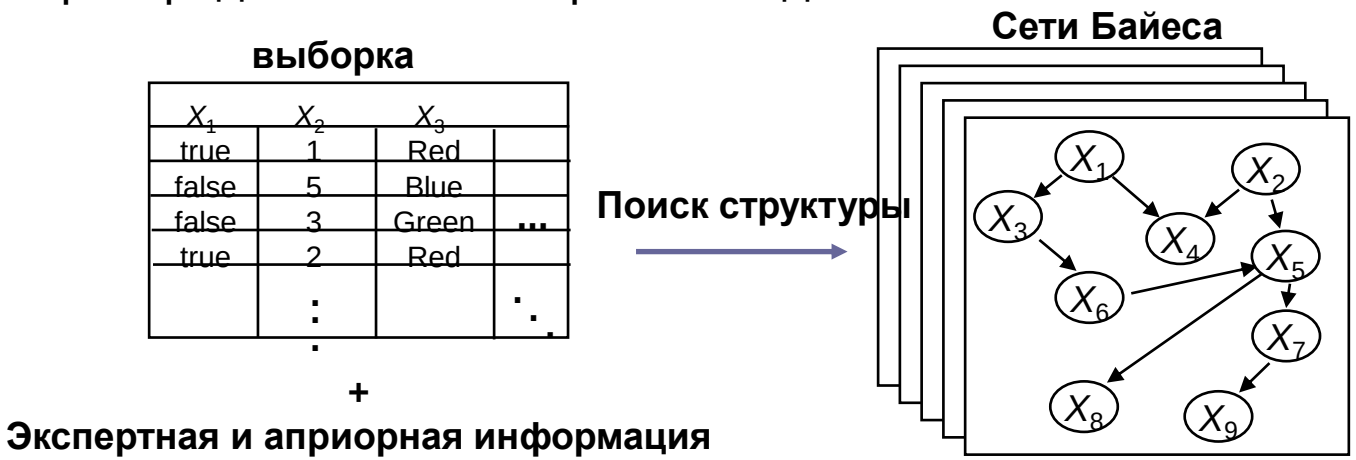
  - Условные вероятности переменные сети могут обучаться на отдельных наборах, учитывающих значения только тех переменных, которые влияют на данную, а условные вероятности $pa\left(x^j\right)$ могут быть представлены аппроксимациями плотности вероятности.

Синтез Байесовой сети на основе выборок

- Для построения «вручную» Байесовой сети необходимо:
  1. Сформулировать проблему в терминах вероятностей значений целевых переменных;
  2. Выбрать понятийное пространство задачи, определить переменные, имеющие отношение к целевым переменным, описать возможные значения этих переменных;
  3. Выбрать на основе опыта и имеющейся информации априорные вероятности значений переменных;
  4. Описать отношения "причина-следствие" (как косвенные, так и прямые) в виде ориентированных ребер графа, разместив в вершинах переменные;
  5. Для каждой вершины графа, имеющего входные ребра, указать оценки вероятностей различных значений переменной для комбинаций значений переменных-предков на графе.
- Машинное обучение сетей Байеса:
  - Шаги 2-5 желательно автоматизировать
  - Две задачи: поиск структуры сети и расчет условных вероятностей

Методы синтеза структуры

- Задача NP-трудная – есть два приближенных подхода (часто используют их комбинацию)
- На основе ограничений:
  - Поиск сети Байеса, где набор ограничений на комбинации независимых атрибутов «соответствует» таким комбинациям в эмпирических данных
- Скоринговые методы (информационные критерии типа BIC):
  - Поиск сети Байеса, наилучшим образом приближающей распределение в эмпирических данных



Методы синтеза сети

- Основные свойства :
  - Ограничивается пространство поиска с точностью до классов эквивалентности сети (графа)
  - Оценка качества, например, $BIC = -2loglik + log(l) \cdot \dim(edges)$
  - «Жадный» поиск наилучшего класса эквивалентности
- **Скоринговый** подход «от простого к сложному»:

  Инициализация **пустым графом**

  Стадия 1: Последовательно добавлять по 1 дуге, приводящей к максимальному улучшению оценки пока улучшается *BIC*

  Стадия 2: Последовательно удалять по 1 дуге, приводящей к максимальному улучшению оценки пока улучшается *BIC*
- Подход **на основе ограничений** «от сложного к простому»:

  Инициализация: **полносвязный неориентированный граф**

  Шаг 1: Рекурсивно проверка условной независимости каждой дуги и удаление дуг (статистическим тестом, например, по χ^2)

  Шаг 2: Получение ориентированного графа-для каждой дуги (A, B) статистический тест $A \Rightarrow B$ или $B \Rightarrow A$

Метод парзеновского окна тоже применим в «не наивном» случае (Parzen Window, PW)

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

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

- Метод окна Парзена – это метрический классификатор:

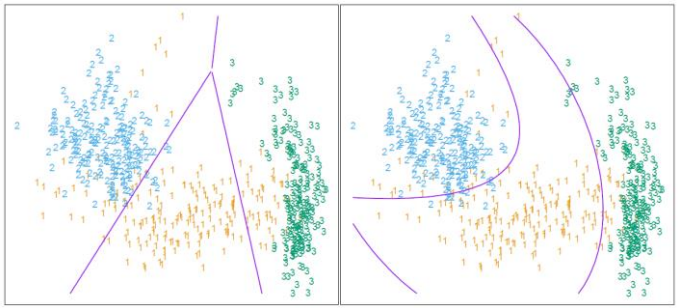
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y \frac{P(y)}{l_y} \sum_{x_i \in X_y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

- Замечание 1:
  - нормирующий множитель $V_h = \int K\left(\frac{\rho(x,x_i)}{h}\right) dx$ 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 $\rho(x, x')$.

Дискриминантный анализ

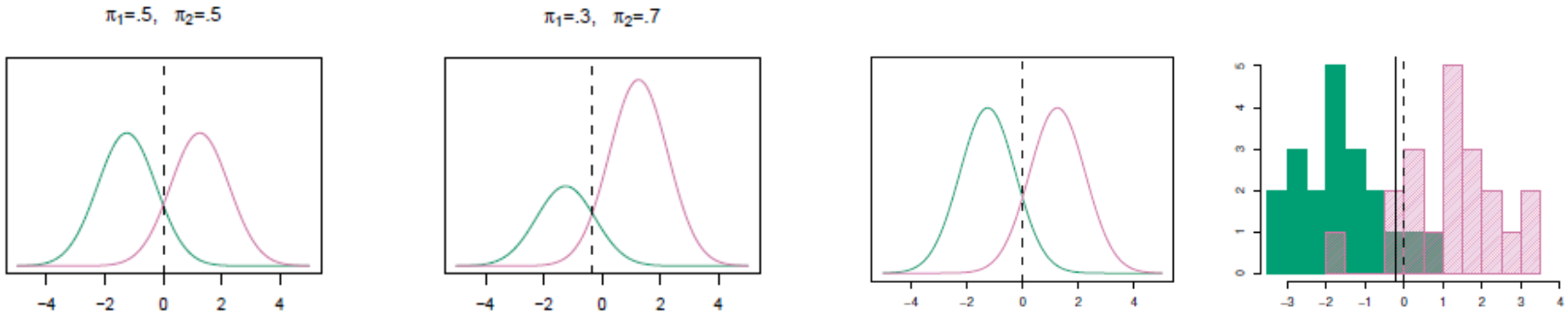
- Моделируем:
  - распределение в каждом из классов по отдельности
- Если используем **нормальные** распределения, это приводит к:
  - **линейному** (если считаем ковариационную матрицу одинаковой для всех классов) дискриминантному анализу
  - **квадратичному** (если матрицы разные) дискриминантному анализу
- Дискриминантная функция:
  - получаем логарифмируя оценку условной вероятности отклика и отбрасывая слагаемые, не зависящие от класса
  - для нескольких классов **softmax**

$$P(y = k|x) = \frac{e^{g_k(x)}}{\sum_{j=1}^{K} e^{g_j(x)}}$$



Дискриминантный анализ

- Используем *теорему Байеса:*
  - для получения **условных вероятностей откликов**
  - когда априорные вероятности различны, учитываем их
- Для классификации:
  - используем **правило Байеса** для апостериорных вероятностей
  - или для максимума дискриминантной функции
- Параметры распределений:
  - оцениваем по выборке



Линейный дискриминант Фишера (Fisher Linear Discriminant)

- Проблема: для малочисленных классов возможно $\det \hat{\Sigma}_y = 0$
- Пусть ковариационные матрицы классов равны: $\boldsymbol{\Sigma_y = \Sigma, y \in Y}$
- Оценка максимума правдоподобия для Σ:

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

- Линейный дискриминант – подстановочный алгоритм:

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

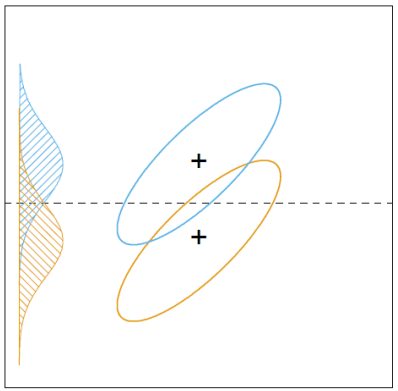
$$= \arg\max_{y \in Y}\left(\underbrace{\ln\left(\lambda_y \hat{P}(y)\right) - \frac{1}{2}\hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y}_{\beta_y} + x^T \underbrace{\hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y}_{\alpha_y}\right)$$

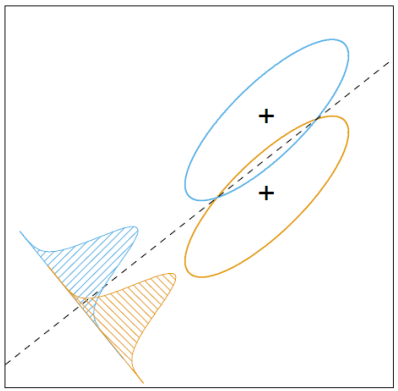
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y}\left(x^T \alpha_y + \beta_y\right)$$

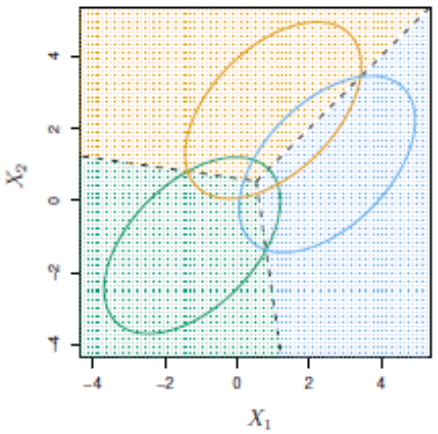
- В случае мультиколлинеарности – обращать матрицу $\hat{\Sigma} + \boldsymbol{\tau l_n}$.

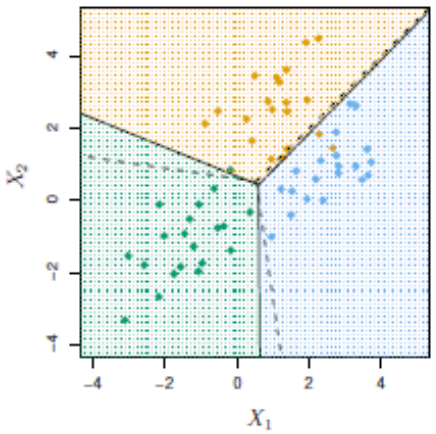
Геометрическая интерпретация линейного дискриминанта

- В одномерной проекции на направляющий вектор разделяющей гиперплоскости классы разделяются наилучшим образом, то есть с минимальной вероятностью ошибки.
- Пунктирные линии - границы решений Байеса. Если бы они были известны, они бы дали наименьшее число ошибочных классификаций среди всех возможных классификаторов.

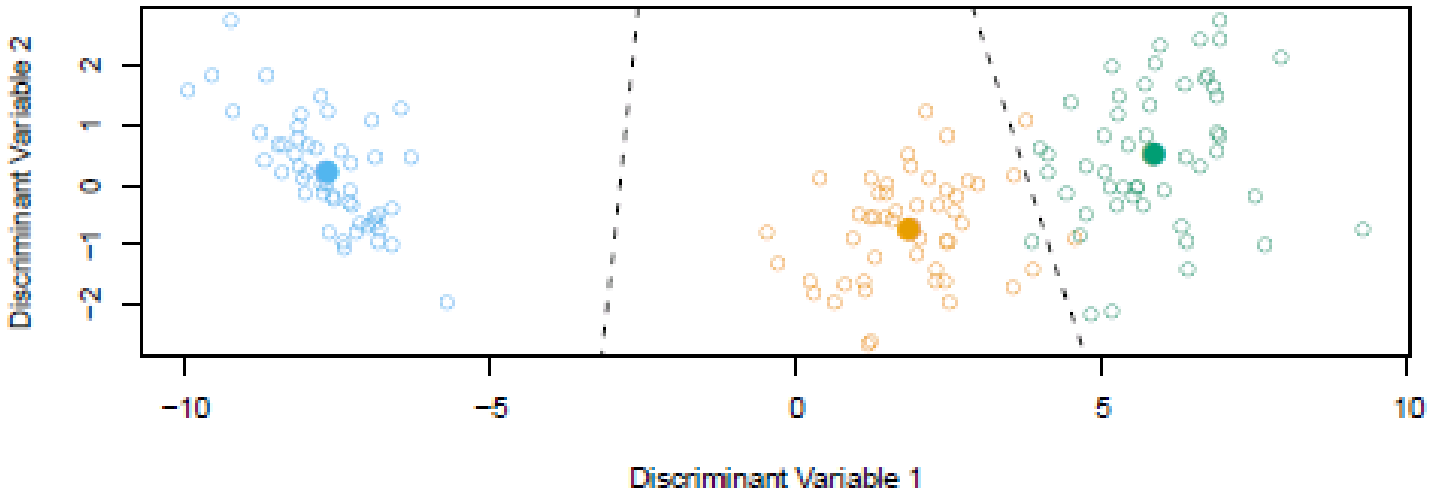








Дискриминантная диаграмма



- Как в PCA можно найти главные компоненты (они независимы) по направлениям, наилучшим образом отделяющие классы.
- Когда есть K классов, линейный дискриминантный анализ можно рассматривать в K-1-мерной проекции.
- Даже при K> 3 мы можем определить «лучшую» двумерную плоскость для визуализации дискриминантного правила.

Квадратичный дискриминант (Quadratic Discriminant Analysis)

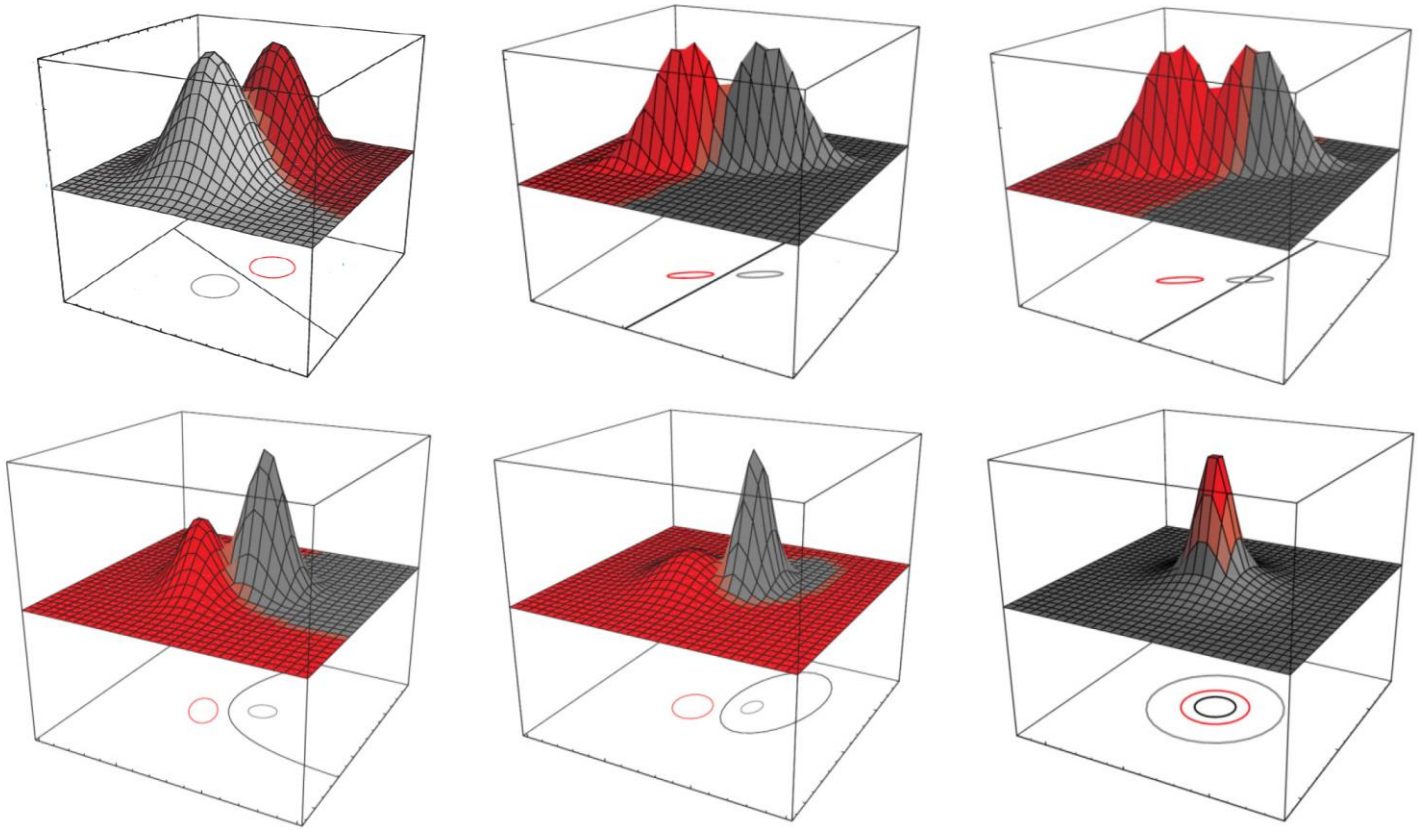
- Гипотеза: **каждый класс** $y \in Y$ имеет n-мерную гауссовскую плотность с центром μ_y и **ковариационной матрицей** $\boldsymbol{\Sigma_y}$:

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

- Теорема
  - Разделяющая поверхность, определяемая уравнением $\lambda_y P(y) p(x|y) = \lambda_s P(s) p(x|s)$, **квадратична** для всех пар $y, s \in Y$.
  - Если $\Sigma_y = \Sigma_s$, то поверхность **вырождается в линейную**.
- Квадратичный дискриминант – подстановочный алгоритм:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y P(y) - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}(\boldsymbol{x} - \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\boldsymbol{y}})^T \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\boldsymbol{y}}^{-\mathbf{1}}(\boldsymbol{x} - \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\boldsymbol{y}}) - \frac{1}{2}\ln\det\hat{\Sigma}_y\right)$$

Геометрический смысл квадратичного дискриминанта



Логистическая регрессия по сравнению с нормальным дискриминантным анализом

- Для задачи двух классов можно показать, что модели LDA и логистическая регрессия имеют одну и ту же **линейную форму**(лу)
- Разница заключается в том, как оцениваются параметры:
  - Логистическая регрессия использует условное правдоподобие, на основе условной вероятности отклика (*дискриминационное обучение*).
  - LDA использует правдоподобие, основанное на совместном распределении отклика и признаков (*генеративное обучение*).
  - Несмотря на эти различия, на практике результаты часто похожи.
- Замечание:
  - логистическая регрессия может также быть построена с квадратичными границами, такими как у QDA, путем явного включения квадратичных членов в модель.

Почему используется дискриминантный анализ?

- Когда классы **хорошо отделимы**:
  - оценки параметров модели логистической регрессии очень **неустойчивы**, а оценки линейного дискриминанта **устойчивы**
- Если число наблюдений **мало** и распределение предикторов **близко к нормальному** в каждом из классов:
  - линейная дискриминантная модель снова более устойчива, чем модель логистической регрессии.
- Дискриминантный анализ хорош для нескольких классов
  - Можно использовать функцию **softmax** от дискриминантной функции как и в логистической регрессии

LDA – Пример

```
from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
from sklearn.datasets import fetch_covtype
```

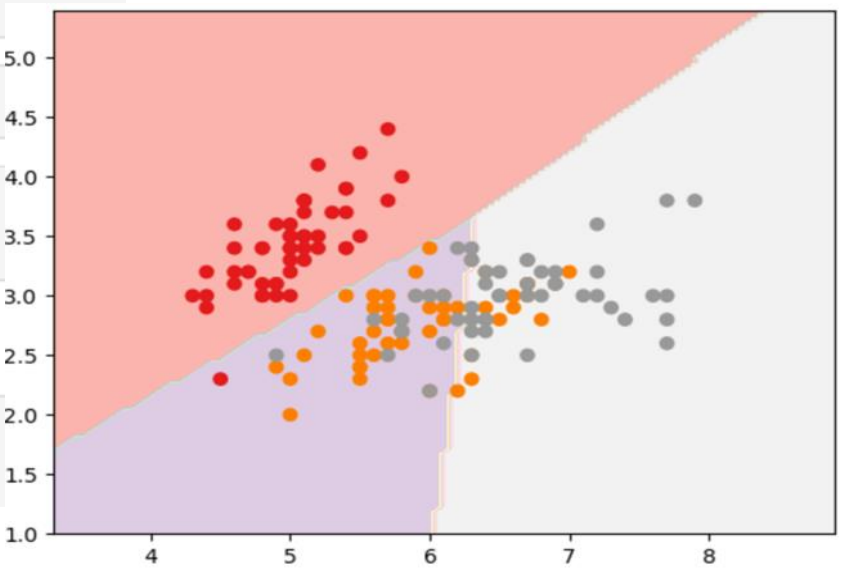
```
X, y = load_iris(return_X_y=True)
```

```
X = X[:, :2]
X.shape, y.shape, np.unique(y)
```

```
((150, 2), (150,), array([0, 1, 2]))
```

```
lda = LinearDiscriminantAnalysis(n_components=2)
lda.fit(X, y)
```

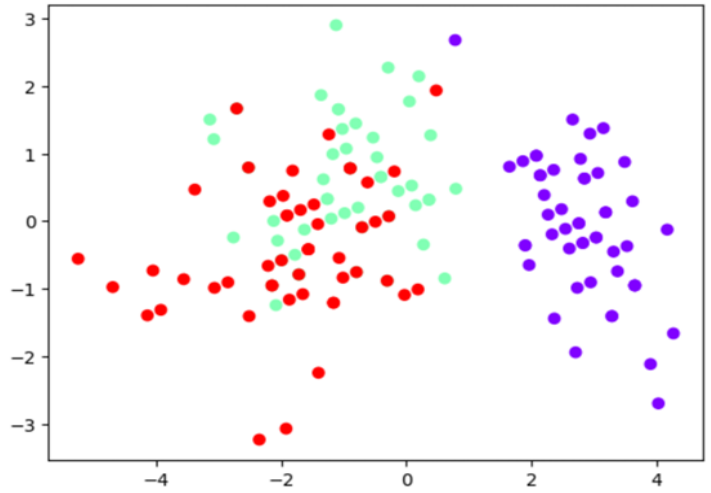
```
DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(lda, X, cmap="Pastel1")
plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```




```
transform = lda.transform(X)
transform.shape
```

```
(150, 2)
```

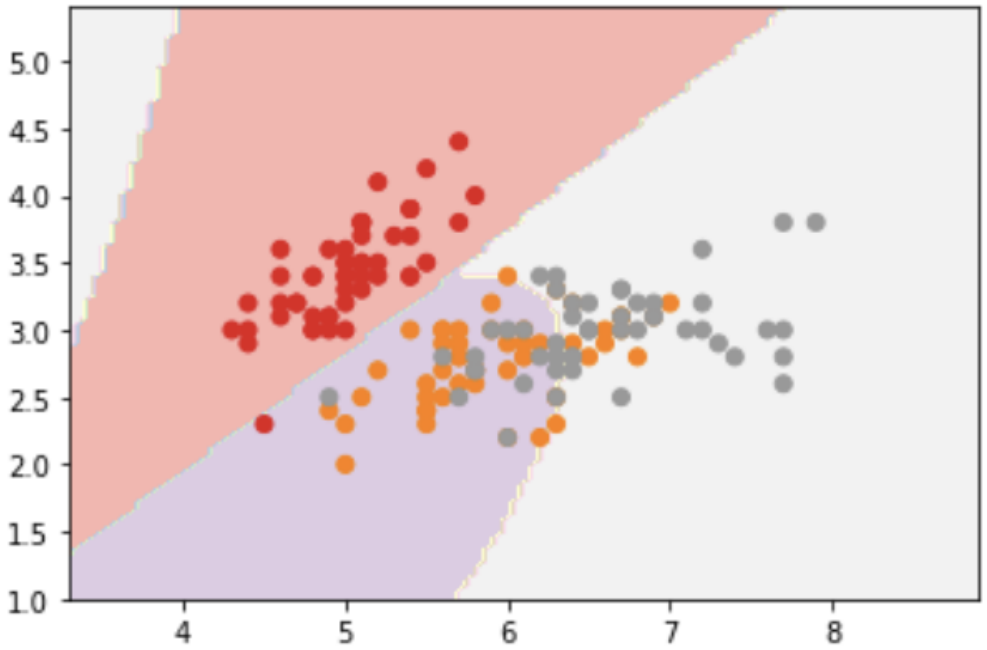
```
plt.scatter(*transform.T, c=y, cmap="rainbow")
```



QDA - Пример

```
from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis
qda = QuadraticDiscriminantAnalysis()
qda.fit(X, y)
DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(qda, X, cmap="Pastel1")
plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```

```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x167af6902e0>
```

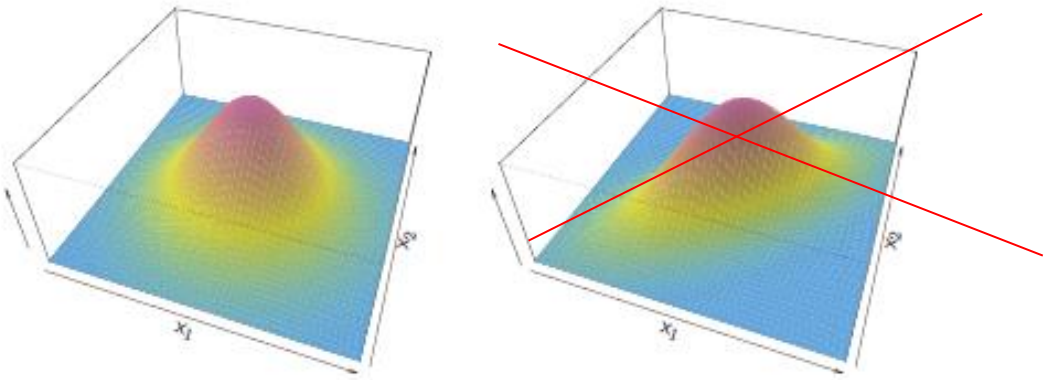


Гауссовская смесь с диагональными матрицами ковариации

- Гауссовская смесь GMM – Gaussian Mixture Model
- Допущения:
  - Функции правдоподобия классов $p(x|y)$ представимы в виде **смесей** k_y компонент, $y \in Y$.
  - Компоненты $j = 1, \ldots, k_y$ имеют ***n*-мерные гауссовские** плотности с **некоррелированными** признаками:

$$\mu_{yj} = (\mu_{yj1}, \ldots, \mu_{yjn}), \quad \Sigma_{yj} = diag\,(\sigma^2_{yj1}, \ldots, \sigma^2_{yjn}):$$

$$p(x|y) = \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x),\ p_{yj}(x) = N(x; \mu_{yj}, \Sigma_{yj}),\ \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} = 1, \quad w_{yj} \geq 0$$



EM-алгоритм. Эмпирические оценки средних и дисперсий

- Числовые признаки: $f_d\colon\ \ X \to \mathbb{R},\ \ d = 1, \ldots, n.$
  - E-шаг: для всех $y \in Y, j = 1, \ldots, k_y,\ \ d = 1, \ldots, n$:

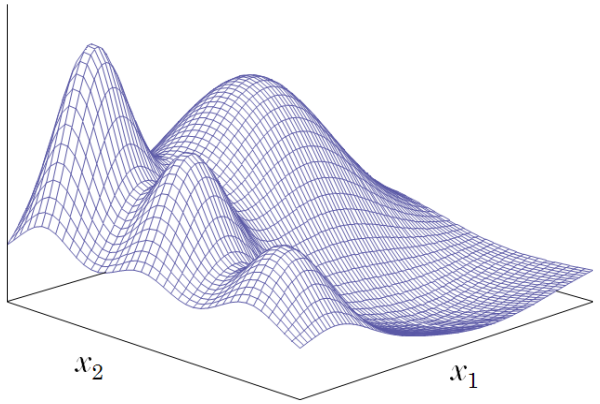
$$g_{yij} = \frac{w_{yj} N(x_i; \mu_{yj}, \Sigma_{yj})}{p(x_i|y)} \equiv P(j|x_i, y_i = y)$$

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

$$w_{yj} = \frac{1}{l_y} \sum_{i:\, y_i = y} g_{yij}$$

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

$$\hat{\sigma}^2_{yjd} = \frac{1}{l_y w_{yj}} \sum_{i:\, y_i = y} g_{yij} \left(f_d(x_i) - \hat{\mu}_{yjd}\right)^2$$



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

Байесовский классификатор

- Подставим гауссовскую смесь в байесовский классификатор:

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

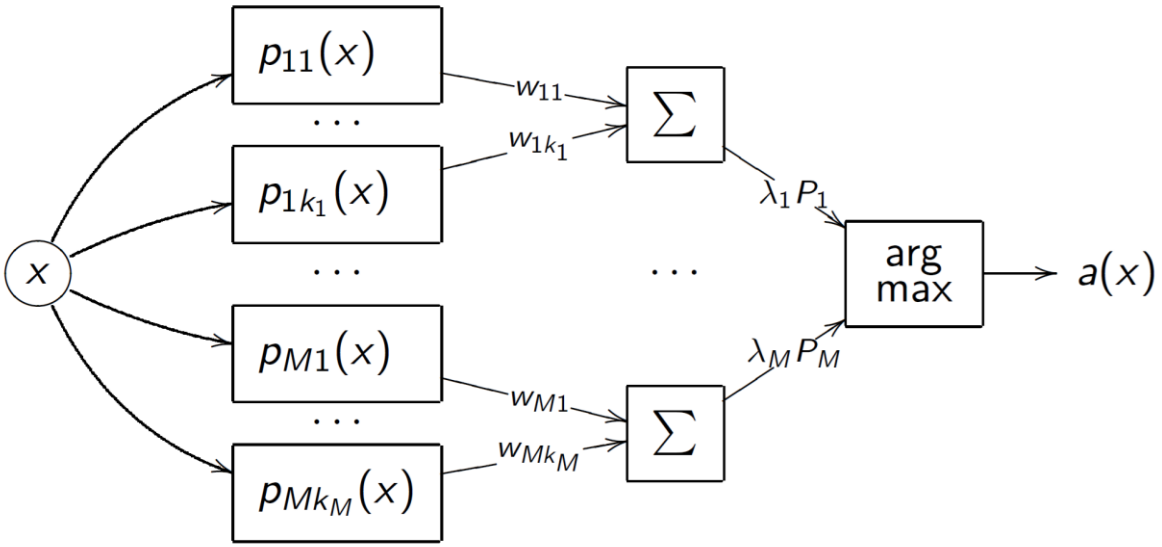
  - $N_{yj} = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}(\sigma_{yj1}, \dots, \sigma_{ijn})^{-1}$ – нормировочные множители;
  - $\rho_{yj}(x, \mu_{yj})$ – взвешенная евклидова метрика в $X = \mathbb{R}^n$:
  - $\rho_{yj}^2(x, \mu_{yj}) = \sum_{d=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{yjd}^2}(f_d(x) - \mu_{yjd})^2$.

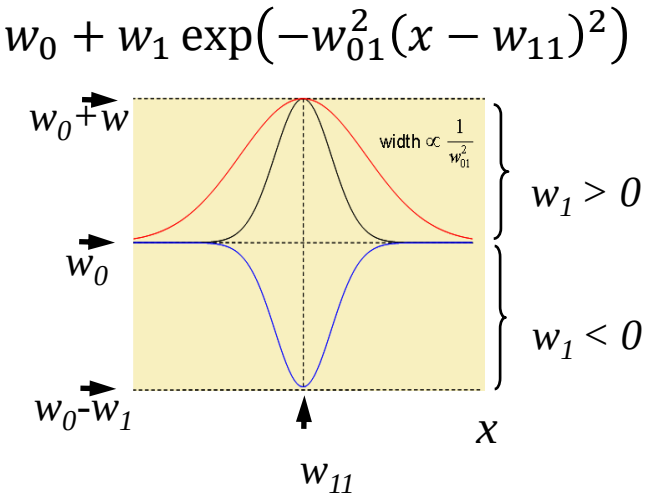
- Интерпретация – как у метрического классификатора:
  - $p_{yj}(x)$ – близость объекта x к j-ой компоненте класса y;
  - $\Gamma_y(x)$ – близость объекта x к классу y.

Сеть радиальных базисных функций (RBF)

- Трехслойная сеть RBF (Radial Basis Functions):

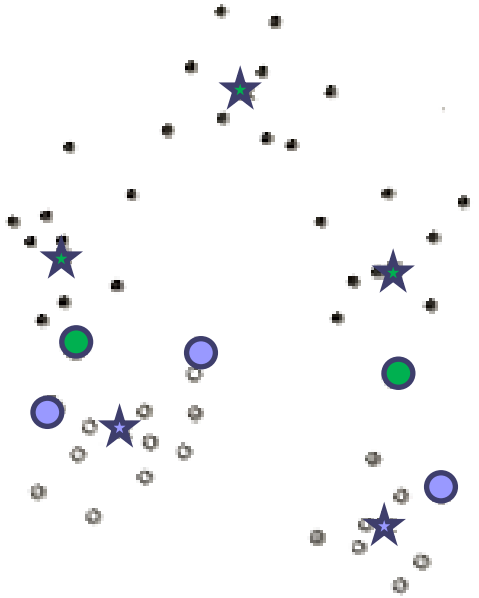
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y P_y \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x)$$





EM-алгоритм как метод обучения радиальных сетей

- Отличия **генеративного** RBF-EM от **дискриминативного** RBF-SVM:
  - 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** EM-алгоритма:
  - легко сделать устойчивым к шуму.
  - довольно быстро сходится.
- **Недостатки** EM-алгоритма:
  - чувствителен к начальному приближению.
  - определение числа компонент



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 всем пространстве;
  - требуют большего объема данных для обучения;
  - менее чувствительны к шумовым выбросам.
- Наивный байесовский классификатор:
  - основан на предположении о **независимости признаков**, для зависимых – **сети Байеса**;
  - неплохо работает в задачах **категоризации текстов**.
- Три подхода к восстановлению плотности $p(x|y)$ по выборке:
  - **Параметрический** подход: гауссовские классы => нормальный **дискриминантный** анализ
  - **Непараметрический** подход: задана функция расстояния => метод **парзеновского** окна
  - Разделение **смеси** распределений: классы описываются смесями гауссиан => **сеть RBF**