Bayesian Decision Theory

Jeonghun Yoon

Terms

Random variable

Bayes rule

Classification

Decision Theory

Bayes classifier

Conditional independence

Naive Bayes Classifier

Laplacian smoothing

MLE / Likehood / Prior

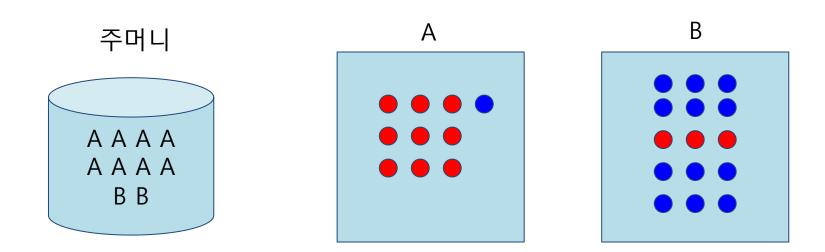
Random Variable

주사위를 던졌을 때 3이 나올 확률은 % 이다. 이것을 수학적으로 표현해보자.

주사위를 던졌을 때 3이 나오는 사건을 c라고 하자. 사건을 실수에 대응시키는 함수를 X라고 하자. 여기서 X(c) = 3이다. 만약 주사위를 던졌을 때 6이 나오는 사건을 d라고 하면 X(d) = 6이다.

여기서 X를 랜덤변수라고 한다. 즉 **사건을 실수에 대응시켜주는 함수**가 **랜덤변수**이다.

따라서 주사위를 던졌을 때 3일 나올 확률을 수학적으로 표현해보면 P(X(c=3)) = % 이다. 이것을 간단히 표현하면 P(X=3) = % 또는 P(3) = % 이라고 표현할 수 있다.



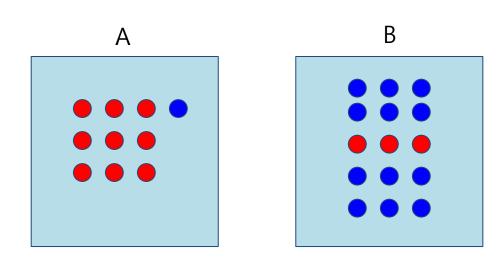
질문: 파란 공을 뽑았다. 이 파란 공은 A에서 나왔을까? B에서 나왔을까?

대답 1)

B에서 나왔을 것 같다. B에 들어있는 파랑 공이 훨씬 더 많기 때문이다.

이것을 수학적으로 표현하면, 상자 A에서 파란 공을 뽑을 확률 $P(\text{파랑}|A) = \frac{1}{10}$ 보다 상자 B에서 파랑 공을 뽑을 확률 $P(\text{파랑}|B) = \frac{12}{15}$ 가 더 크다 라고 할 수 있다.

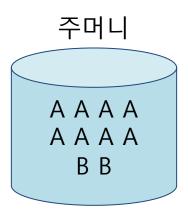
이 조건부 확률을 우도(Likelihood) 또는 우도 함수라고 한다.



대답 2)

주머니 속을 보면 상자 A 제비가 8개 상자 B 제비가 2개이다. 따라서 파랑 공은 A에서 나왔을 것이다. 이것을 수학적으로 표현하면, 상자 A를 선택할 확률 $P(A) = \frac{8}{10}$ 이 상자 B를 선택할 확률 $P(B) = \frac{2}{10}$ 보다 높다라고할 수 있다.

이 확률은 사전 확률(prior probability)이라고 한다.



다음 질문들은 동치다.

- 파란 공을 뽑았다. 이 파란 공은 A에서 나왔을까? B에서 나왔을까?
- 파랑 공이 관찰 된 조건하에, 파랑 공이 A에서 나왔을 확률이 높을까? B에서 나왔을 확률이 높을까?
- P(A|파랑) > P(B|파랑) 인가? 또는 P(A|파랑) < P(B|파랑) 인가?

이 조건부 확률을 사후 확률(Posterior probability)이라 부른다.

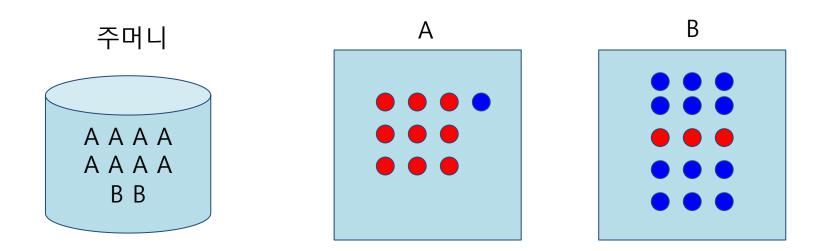
Bayes rule를 수학적으로 유도해보자.

$$P(X,Y) = P(Y,X)$$

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

$$\Leftrightarrow P(X|Y) = \frac{P(Y|X)P(X)}{P(Y)}$$

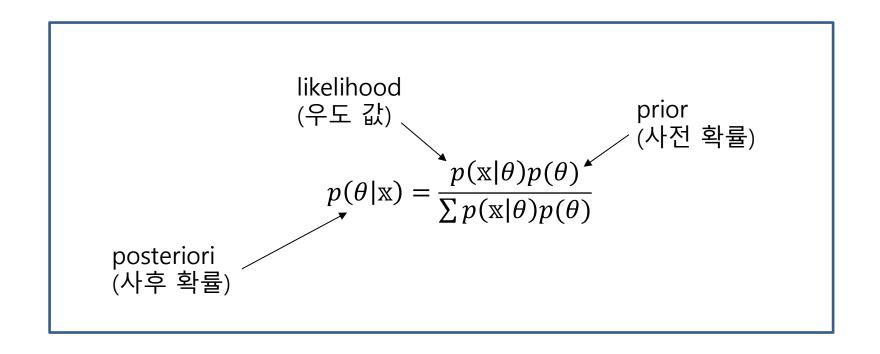
$$(P(Y) = \sum_{X} P(Y|X)P(X))$$



$$P(A|blue) = \frac{P(blue|A)P(A)}{P(blue)} = \frac{\left(\frac{1}{10}\right) \times \left(\frac{8}{10}\right)}{\frac{24}{100}} = \frac{1}{3}$$

$$P(B|blue) = \frac{P(blue|B)P(B)}{P(blue)} = \frac{\left(\frac{12}{15}\right) \times \left(\frac{2}{10}\right)}{\frac{24}{100}} = \frac{2}{3}$$

(사후확률) 신뢰도 0.66으로 파랑 공은 B에서 나왔다.

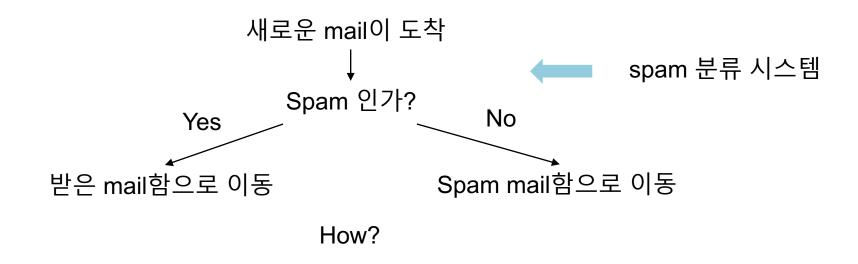


- 사후 확률 : 관찰 값들이 관찰 된 후에 모수(parameter)의 발생 확률을 구한다.
- 사전 확률 : 관찰 값들이 관찰 되기 전에 모수의 발생 확률을 구한다.
- 우도 값 : 모수의 값이 주어졌을 때 관찰 값들을 관찰 할 수 있는 함수 값

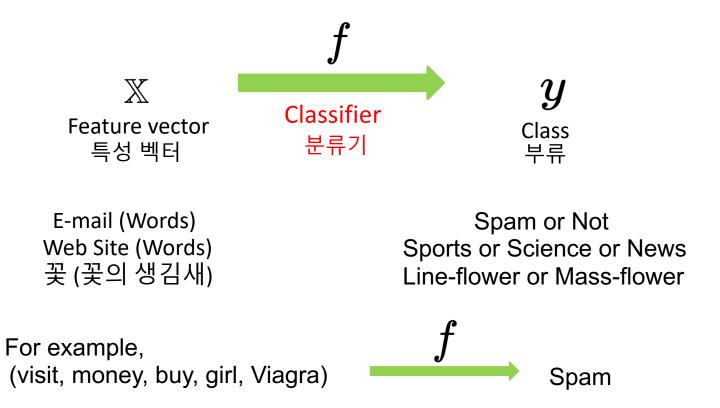
Spam 메일 분류

Mailbox 에서 spam설정을 한 적이 없다. (물론 수동으로 조건을 입력하면 더 잘 작동한다.)

그런데 어떻게 아래와 같은 알고리즘이 작동하는 걸까?

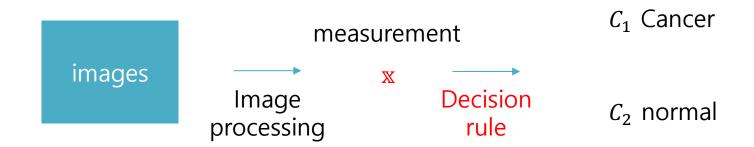


Classification



Decision Theory

이미지 분류(처리)에서 decision thoery를 적용했을 때 processing 과정



가정:

- 이미지를 measurements(x) 로 만들고, 그것을 이용하여 암인지 아닌지를 분류하는 것
- Measuremetns와 그것이 속하는 부류(class)의 결합확률분포를 이용 $p(\mathbf{x}, C_i) = p(\mathbf{x}|C_i)p(C_i)$

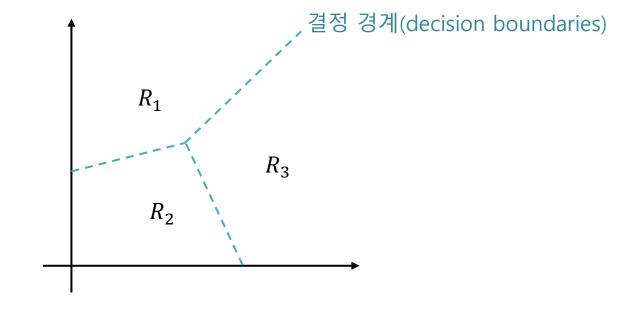
목표:

Make the "Best" how to define? decision.

Classification using decision theory

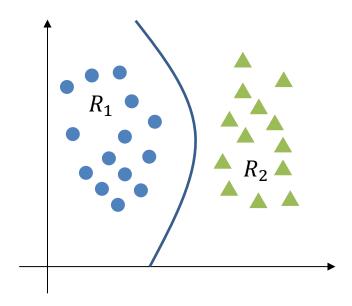
Decision rule은 결정 경계_{decision boundaries}를 이용하여 입력 공간_{input space}을 결정 구역_{decision regions}으로 나눈다.

- 입력 공간 : measurement가 존재하는 공간 (그림에서는 1사분면 전체)
- 결정 구역 : 결정 경계를 기준으로 나눠진 공간. 결정 구역에 속한 measurement는 해당 구역으로 할당(classify)된다.
- 결정 경계: 각 class를 구분짓는 경계



Classification using decision theory

예제) 2차원 vector measurement의 2 부류_{class} 결정 경계



Decision boundary

결국 우리가 해결해야하는 것은 결정 경계를 찾는 것이다.

Decision theory의 가정에서 언급했던 것처럼 measurement(feature)와 class의 결합확률밀도 P(x,C)를 이용할 것이다.

그러면 결합확률밀도 함수를 이용하여 decision boundary를 어떻게 찾을까?

강의 처음에 언급했던 Bayes rule을 이용할 것이다.

Bayes classifier

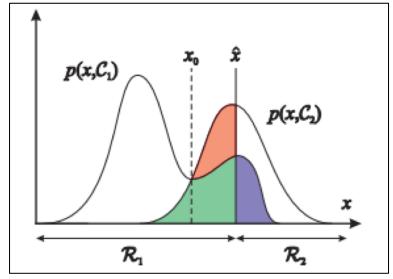
Bayes rule을 이용하여 결정 경계를 찾고 그것을 기준으로 measurement(feature)를 각 class로 분류하는 분류기를 Bayes classifier라고 한다.

Bayes classifier의 2가지 기준

- 오분류 비율의 최소화
- 기대 손실의 최소화

Decision Boundary for average error

2 class decision (x는 1차원)



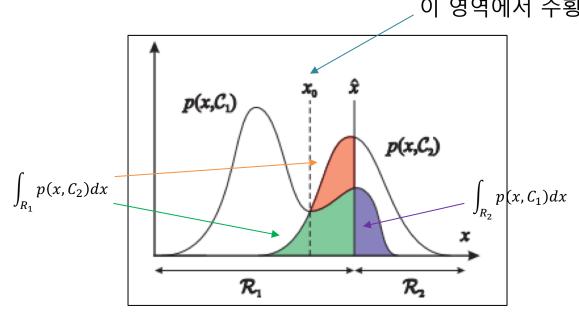
그림출처 : PRML 책

- $P(x, C_1)$: x와 C_i 의 결합확률. x가 C_i 와 함께 존재하는 확률 또는 x가 C_i 에 실제로 존재하는 확률로 해석하면 된다.
- 결정경계가 정해지고 난 이후에,
 - R_1 에 속하면 C_1 으로 분류
 - R_2 에 속하면 C_2 으로 분류

Decision Boundary for average error

2 class decision (x는 1차원)

 x_0 는 misclassifications(오분류)이 최소가 되는 지점. 이 영역에서 주황색영역이 사라지고 녹색만 남는다.



 \hat{x} 을 기준으로 분류할 경우, 오분류 영역을 살펴보자.

- C_1 에 속하는데 R_2 으로 분류하는 경우 (보라색 영역) C_2 에 속하는데 R_1 으로 분류하는 경우 (연두색 + 주황색 영역)

$$p(error) = \int_{-\infty}^{\infty} p(error, x) dx = \int_{R_1} p(x, C_2) dx \int_{R_2} p(x, C_1) dx$$

Bayes Decision Rule (error)

결합 확률 분포 $p(x,C_i)$ 가 큰 C_i 에 x를 할당

- $p(x, C_1) > p(x, C_2)$ 이면, $x = C_1$ 에 할당
- $p(x, C_1) < p(x, C_2)$ 이면, $x = C_2$ 에 할당

$$p(x,C_i)=p(C_i|x)p(x)$$
 조건부 확률 (아직 bayes rule은 나오지 않았다.)

사후 확률 분포 $p(C_i|x)$ 가 큰 C_i 에 x를 할당

- $p(C_1|x) > p(C_2|x)$ 이면, $x = C_1$ 에 할당
- $p(C_1|x) < p(C_2|x)$ 이면, $x = C_2$ 에 할당

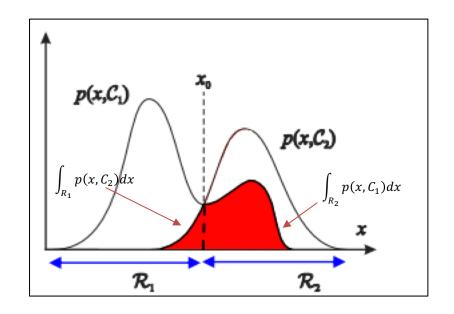
Bayes error

Bayes error는 오분류 확률을 나타낸다.

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p(error, x) dx$$

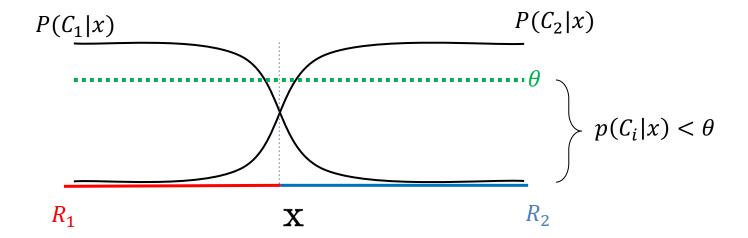
$$= \int_{R_1} p(x, C_2) dx \int_{R_2} p(x, C_1) dx$$

$$= \int_{R_1} p(C_2|x)p(x)dx \int_{R_2} p(C_1|x)p(x)dx$$



Reject option

확실하지 않은 영역에 대해서는 분류하지 않는다.



Bayes classifier (오분류 비율의 최소화 ver.)

사후 확률 분포 $p(C_i|x)$ 가 큰 C_i 에 x를 할당

- $p(C_1|x) > p(C_2|x)$ 이면, $x = C_1$ 에 할당
- $p(C_1|x) < p(C_2|x)$ 이면, $x = C_2$ 에 할당

$$f^*(x)$$
= $\arg \max_{Y} P(Y = y | X = x)$
= $\arg \max_{Y} P(X = x | Y = y) P(Y = y)$

- Class conditional density
- Likelihood

Gaussian class conditional densities (1-dim)

$$P(X = x | Y = y) = \frac{1}{\sqrt{s\pi\sigma_y^2}} \exp(-\frac{(x - \mu_y^2)}{s\sigma_y^2})$$

Loss matrix

비용 함수(cost function), 손실 함수(loss function)을 도입

Loss matrix : 오분류에 따른 손실을 행렬로 표현한 것

	암 (actual value) 정상 (actual v			
암 (prediction value)	0	1		
정상 (prediction value)	1000	0		

Bayes classifier (기대 손실의 최소화 ver.)

Bayes risk $R(a_i|x)$: True status는 j, 선택된 action은 i일때 발생하는 loss

$$R(a_i|x) = \sum_{j} L(a_i|C_j)p(C_j|x)$$
action measurement

Loss matrix

 H_0 is rejected.

 H_0 is not rejected.

rediction. n_1	(prediction value)	
Prediction : H_1	암 (prediction value)	

Prediction : H_0

	암 (actual value)	정상 (actual value)		
암 (prediction value)	0	1 (type 1 error)		
정상 (prediction value)	1000 (type 2 error)	0		

Bayes classifier (기대 손실의 최소화 ver.)

Input : x, output : $y(C_1, C_2)$ 인 경우 (2 class)

- C_1 으로 분류했을 때의 risk
 - $R(a_1|x) = L_{11}p(C_1|x) + L_{12}p(C_2|x) = L_{11}p(X = x|Y = C_1)p(Y = C_1) + L_{12}p(X = x|Y = C_2)P(Y = C_2)$
- C_2 로 분류했을 때의 risk
- Decision rule
 - $R(a_1|x) > R(a_2|x)$ 이면 C_2 로 분류
 - $R(a_1|x) < R(a_2|x)$ 이면 C_1 으로 분류

Bayes decision rule : **Bayes risk를 최소화**하는 action을 선택

$$\hat{a}_i = \arg\min_{a_i} R(a_i|x)$$

Naïve Bayes Classifer

Goal

● You love to buy viagra라는 문장이 주어졌을 때, 이 문장이 Spam 문장인지, Ham 문장인지 분류하자.

How

- 사후 확률(Posterior probability) 사용
- Bayes 정리 이용

But

● Likelihood(우도)를 직접 계산하는 방법은 쉽지 않다.

Conditional independence

X is conditionally independent of Y given Z :

Probability distribution governing X is independent of the value of Y, given the value of Z

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

Naïve Bayes

Conditional independence 가정에 의하여,

 $P(You\ love\ to\ buy\ viagra|Spam) = P(You|Spam) \times P(love|Spam) \times P(to|Spam) \times P(buy|Spam) \times P(viagra|Spam)$

이 성립한다. 특정한 조건이 주어지면 문장에서 각각의 단어가 나올 확률은 서로 독립이라는 것이다. 문장구조 안에서 각 단어는 의존성을 띄는데, 이것을 무시하는 것이다.

그러면 이 가정을 왜 사용하려고 하는가?
Bayesian probability를 계산하는 데 필요한 parameters 수를 줄이기 위해서이다.

Parameters in Naïve Bayes

번개가 치는 것을 예측해보자 (L). 아래의 두 조건은 conditionally independent 하다.

- 천둥(T)
- 비(R)

Conditionally independent 조건이 없을 때

• L이 주어졌을 때의 likelihood P(T,R|L) 를 계산하기 위한 parameter의 개수 : $(2^2-1)\times 2=6$

$$P(T = 0, R = 0 | L = 0)$$

$$P(T = 0, R = 1 | L = 0)$$

$$P(T = 1, R = 0 | L = 0)$$

$$P(T = 1, R = 0|L = 1)$$

 $P(T = 0, R = 1|L = 1)$
 $P(T = 1, R = 0|L = 1)$

Conditionally independent 조건이 있을 때

● P(T,R|L) = P(T|L)P(R|L)를 계산하기 위한 parameter의 개수 : $(2-1)\times 2 + (2-1)\times 2 = 4$ P(T=0,|L=0) P(R=0,|L=0)P(R=0,|L=1)

Parameters in Naïve Bayes

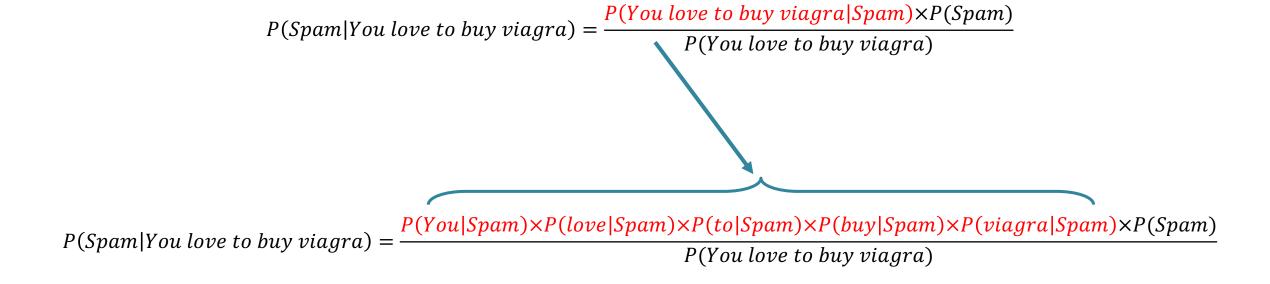
필요한 parameter수를 계산하자. $\mathbb{X} = (x_1, x_2, ..., x_d)$ 라고 하자. 전체 word의 크기를 d, class의 수를 k라고 하자.

$$P(\mathbf{x}|y)P(y) = P(x_1, x_2, ..., x_d|y)P(y)$$
 parameters $\boldsymbol{\uparrow}$:

$$(2^d-1)k+k-1=2^dk-1$$

$$P(x|y)P(y) = P(x_1, x_2, ..., x_d|y)P(y) = P(x_1|y)P(x_2|y) ... P(x_d|y)P(y) \stackrel{\bigcirc}{=} |$$
 parameters $\stackrel{\triangle}{+} : dk + k - 1$

Naive Bayes Classifier 분류 조건



Naive Bayes Classifier 분류 조건

Decision rule

- $x_1, x_2, ..., x_d$: d개의 word 즉 corpus의 크기를 의미하고, y는 target class를 의미한다.
- 각 클래스에서 d개의 단어가 동시에 발생하는 확률을 구하고, 발생 확률이 가장 높은 클래스를 선택한다.

$$f_{NB}(\mathbf{x}) = \arg\max_{y} P(x_1, \dots, x_d | y) P(y) = \arg\max_{y} \prod_{i=1}^{d} P(x_i | y) P(y)$$

- 만약 2개의 클래스(Spam/Ham)가 존재한다고 가정하자.
 - $\prod_{i=1}^d P(x_i|spam)P(spam) > \prod_{i=1}^d P(x_i|ham)P(ham)$ 이면 Spam으로 분류한다.
 - $\prod_{i=1}^d P(x_i|spam)P(spam) < \prod_{i=1}^d P(x_i|ham)P(ham)$ 이면 Ham으로 분류한다.

Naive Bayes Classifier 예제

복권 / 백만 / 수신 취소 3개의 단어를 이용하여 Ham / Spam을 분류하자.

예를들어, *복권이 수신 취소 되었습니다.* 라는 단어는 bag of words vector로 (1, 0, 1)로 표현된다.

총 100개의 메일이 있다고 할 때, 각 단어에 대한 likelihood를 표로 만들면 다음과 같다.

복권이라는 단어는 총 22개의 spam 메일 중 3개의 메일에서 존재했고, 19개의 메일에서는 존재하지 않았다.

수신 취소라는 단어는 총 78개의 일반 메일 중 21개의 메일에서 존재, 57개의 메일에서는 존재하지 않았다.

	복권		백만		수신 취소		
Likelihood	있음	없음	있음	없음	있음	없음	전체
Spam	3/22	19/22	11/22	11/22	13/22	9/22	22
Ham	2/78	76/78	15/78	63/78	21/78	57/78	78
전체	5/100	95/100	26/100	74/100	34/100	66/100	100

Naive Bayes Classifier 예제

복권이 수신 취소 되었습니다. 라는 문장에 대해서 Spam 여부를 판단하고자 한다.

$$\frac{P(복권 \cap \sim 백만 \cap 수신 취소|Spam) \times P(Spam)}{P(복권 \cap \sim 백만 \cap 수신 취소)} =$$

$$\frac{P(복권|Spam)\times P(\sim 백만|Spam)\times P(\bigtriangleup P(\Delta P\Delta Spam)\times P(Spam)}{P(복권_{0}\sim 4 P\Delta P\Delta Spam)}\approx \left(\frac{3}{22}\right)\times \left(\frac{11}{22}\right)\times \left(\frac{13}{22}\right)\times \left(\frac{22}{100}\right)=0.008864$$

	복권		백만		수신 취소		
Likelihood	있음	없음	있음	없음	있음	없음	전체
Spam	3/22	19/22	11/22	11/22	13/22	9/22	22
Ham	2/78	76/78	15/78	63/78	21/78	57/78	78
전체	5/100	95/100	26/100	74/100	34/100	66/100	100

Naive Bayes Classifier 예제

복권이 수신 취소 되었습니다. 라는 문장에 대해서 Ham 여부를 판단하고자 한다.

P(Ham |복권 $\cap \sim$ 백만 $\cap 수신 취소) =$

$$\frac{P(복권 \cap \sim 백만 \cap 수신 취소|Ham) \times P(Ham)}{P(복권 \cap \sim 백만 \cap 수신 취소)} =$$

0.008864 보다는 작다. 따라서 Spam 확률이 더 높다.

$$\frac{P(복권|Ham)\times P(\sim 백만|Ham)\times P(\bigtriangleup P(LHam)\times P(Ham))}{P(복권\cap\sim \Psi P\cap \diamondsuit P(LHam))} \approx \left(\frac{2}{78}\right) \times \left(\frac{63}{78}\right) \times \left(\frac{21}{78}\right) \times \left(\frac{78}{100}\right) = 0.004349$$

	복권		백만		수신 취소		
Likelihood	있음	없음	있음	없음	있음	없음	전체
Spam	3/22	19/22	11/22	11/22	13/22	9/22	22
Ham	2/78	76/78	15/78	63/78	21/78	57/78	78
전체	5/100	95/100	26/100	74/100	34/100	66/100	100

Weakness of Naïve Bayes

약점 1 – Naïve Bayes Assumption(가정)

- Naïve Bayes는, data에서 conditional independency 가정이 지켜지지 않더라도, 좋은 성능을 보인다.
- 사실, 특성들(features)은 아래와 같이 conditional independency를 가지고 있지 않음:

$$P(x_1, ..., x_d | Y) \neq \prod_i P(x_i | Y)$$

● 그럼에도 불구하고, Naive Bayes는 가장 많이 사용되어지는 classifier 중 하나임.

Weakness of Naïve Bayes

약점 2 – 불충분한 양의 training data

만약, y = b일 때, $x_1 = a$ 인 training sample를 본 적이 없다고 가정하자.

예를 들어, y= {b=Spam}, x_1 = {a='Earn'} 이라고 하고, Spam 클래스에서는 Earn 이라는 feature가 존재하지 않다고 하자.

$$\rightarrow P = (x_1 = a | y = b) = 0$$

따라서, 나머지 $x_2, ..., x_d$ 의 값에는 상관없이 항상

$$\rightarrow P = (x_1 = a, x_2, ..., x_d | y = b) = 0$$

$$P(x_1 = a, x_2, ..., x_n | y = b) = P(x_1 = a | y = b) \prod_{i=1}^d P(x_i | y = b)$$

이럴 때는 어떻게 해야 하는가? – Laplacian Smoothing

Multinomial random variable z라고 하자. z는 1부터 k까지의 값을 가질 수 있다.

m개의 독립인 sample $\{z^{(1)},...,z^{(m)}\}$ 이 주어졌고, 우리는 이것을 통해서 multinomial distrbution 을 구하고 싶다.

즉, p(z = 1), p(z = 2), ..., p(z = k)를 구하고 싶다.

추정 값(많은 경우 MLE를 사용한다.)은,

$$p(z = j) = \frac{\sum_{i=1}^{m} I\{z^{(i)} = j\}}{m}$$

이다. 여기서 [1.]는 지시 함수 이다. 관찰 값 내에서의 빈도수를 사용하여 추정한다.

예를 들어 {1, 2, 2, 1, 5, 2, 2, 2, 2, 1} 이면,

$$p(z = 1) = 0.3, p(z = 2) = 0.6, p(z = 5) = 0.10$$

한 가지 주의 할 것은, 우리가 추정하려는 값은 모집단(population)에서의 모수 p(z=i)라는 것이다. 추정하기 위하여 sample을 사용하는 것 뿐이다.

예를 들어, $z^{(i)} \neq 3$ for all i = 1, ..., m 이라면, p(z = 3) = 0 이 되는 것이다. 10개의 샘플에서 3을 보지 못했다고 해서, p(z = 3) = 0 라고 결론 내리는 것이 옳을까?

이것은, 통계적으로 볼 때, 좋지 않은 생각이다. 단지, 표본 집단에서 보이지 않는 다는 이유로 우리가 추정하고자 하는 모집단의 모수 값을 0으로 한다는 것은 통계적으로 좋지 않은 생각이다. (MLE의 약점)

이것을 극복하기 위해서는,

- ① 분자가 0이 되어서는 안 된다.
- ② 추정 값의 합이 1이 되어야 한다. $\sum_{z} p(z=j)=1$ (:: 확률의 합은 1이 되어야 함)

따라서,

$$p(z=j) = \frac{\sum_{i=1}^{m} I\{z^{(i)} = j\} + 1}{m+k}$$

이라고 하자.

①의 성립 : sample 내에 j의 값이 없어도, 해당 추정 값은 0이 되지 않는다.

②의 성립 : $z^{(i)} = j$ 인 data의 수를 n_j 라고 하자. $p(z=1) = \frac{n_1+1}{m+k}, \dots, p(z=k) = \frac{n_k+1}{m+k}$ 이다. 각 추정 값을 다 더하게 되면 1이 나온다.

이것이 바로 Laplacian smoothing이다.

z가 될 수 있는 값이 1부터 k까지 균등하게 나올 수 있다는 가정이 추가되었다고 직관적으로 알 수 있다.

Laplacian smooting in Naïve Bayes Classifier

Training data : $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$, $\mathbf{x}_i = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}\right)$

$$P(x = a | y = b) = \frac{(the \ number \ of \ j : a \in \mathbb{X}_j \ and \ y_j = b) + 1}{(the \ number \ of \ j : y_j = b) + K}$$
 $K: x_i$ 의 값이 될 수 있는 words의 수

$$P(y = b) = \frac{(the \ number \ of \ j : y_j = b) + 1}{(the \ total \ number \ of \ training \ data) + C}$$

 $C: Y$ 의 값이 될 수 있는 class의 수

Laplacian example

복권이 발신 취소 되었습니다. 라는 문장에 대해서 Spam 여부를 판단하고자 한다. 발신 취소는 데이터 셋에 아예 없는 단어이거나 spam dataset에 없던 단어이다.

$$\frac{P(\stackrel{!}{4} \partial_{\cap} \stackrel{!}{} \text{ "U}_{\cap} \stackrel{!}{b} \stackrel{!}{4} \stackrel{!}{4} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

$$\frac{P(복권|Spam)\times P(\sim 백만|Spam)\times P(\text{발신 취소}|Spam)\times P(Spam)}{P(복권\cap\sim 백만\cap \text{발신 취소})}\approx \left(\frac{3}{22}\right)\times \left(\frac{11}{22}\right)\times \left(\frac{0}{22}\right)\times \left(\frac{22}{100}\right)$$

$$\left(\frac{4}{25}\right) \times \left(\frac{12}{25}\right) \times \left(\frac{1}{25}\right) \times \left(\frac{23}{102}\right)$$