Методы восстановления плотности распределения

Евгений Борисов

$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} \lambda_{y} P(y) p(x|y)$$

Байесовский классификатор

 λ_y - потеря для объектов у

P(y) - априорная вероятность класса у (доля примеров класса у, пропорция классов должна соответствовать)

p(x|y) - ф-ция правдоподобия класса у (плотность)

подходы к оценке плотности распределения:

- параметрический
- непараметрический
- смеси распределений

подходы к оценке плотности распределения:

параметрический подход

$$\hat{p}(x) = \varphi(x, \theta)$$

НЕпараметрический подход

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{m V(h)} \sum_{j=1}^{m} K\left(\frac{\rho(x, x_j)}{h}\right)$$

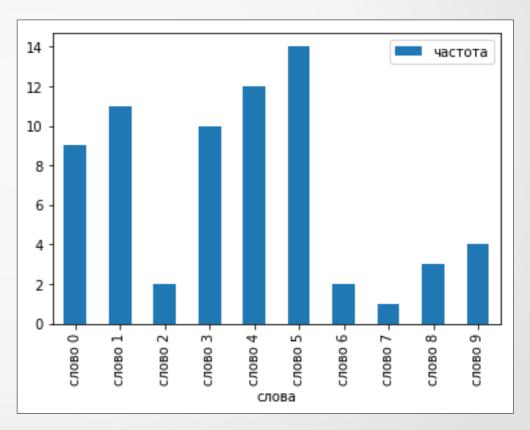
смеси распределений

$$\hat{p}(x) = \sum_{j=1}^{k} w_j \varphi_j(x, \theta_j)$$

НЕпараметрический подход

дискретный случай: гистограмма

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



пример: распределение повторов слов в тексте

непараметрические методы

непрерывный случай: доля объектов попавших в окно ширины h

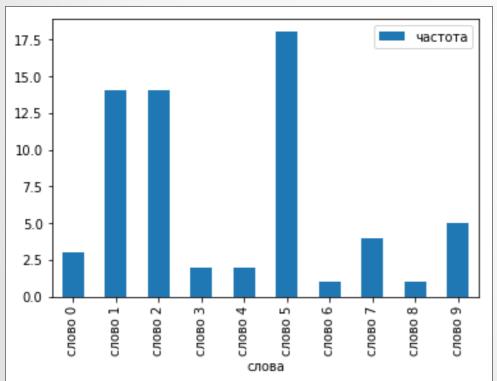
$$\hat{p}(x) = \frac{1}{mh} \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{2} \left[\frac{|x - x_i|}{h} < 1 \right]$$

непараметрические методы:

оценка плотности Парзена-Розенблата

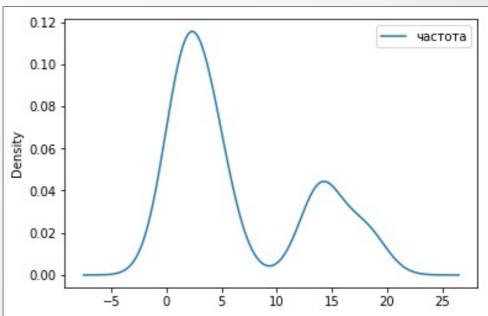
ядерное сглаживание (гистограммы)

KDE, Kernel Density Estimation



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

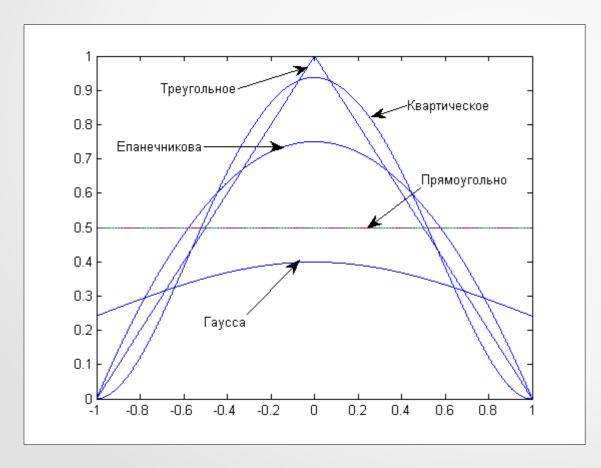
K(r) - ядро $\rho(x_1,x_2)$ - мера на X V(h) - нормирующий множитель



непараметрические методы:

функции ядра для сглаживания гистограммы

KDE, Kernel Density Estimation



ядро Епанечникова:

$$K(r) = \frac{3}{4}(1-r^2); |r| \le 1$$

Байесовский классификатор: метод парзеновского окна

$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} \lambda_{y} P(y) p(x|y)$$

$$a(x, X^{l}, h) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} \lambda_{y} P(y) \frac{1}{l_{y}} \sum_{i: y = y_{i}} K\left(\frac{\rho(x, x_{i})}{h}\right)$$

непараметрические методы:

выбор оптимального размера парзеновского окна **h**

методом скользящего контроля (Leave One Out, LOO)

$$LOO(h, X) = \sum_{i=1}^{l} \left[a(x_i, \{X \setminus x_i\}, h) \neq y_i \right] \rightarrow \min_{h}$$

параметр **h** выбираем перебором

для разных значений **h** проверяем суммарную ошибку на учебном множестве

при этом из учебного набора **X** удаляется текущий (проверяемый) пример

параметрический подход

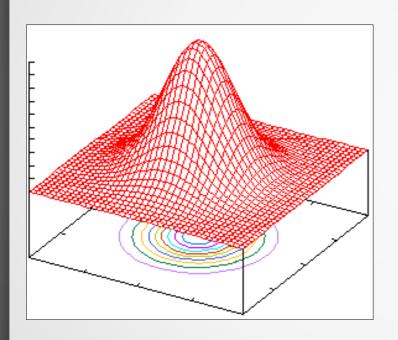
$$\hat{p}(x) = \varphi(x, \theta)$$

принцип максимума правдоподобия

$$L(\theta, X) = \sum_{i=1}^{m} \ln \varphi(x_i, \theta) \rightarrow \max_{\theta}$$

параметрический подход:

допустим - p(x) это нормальная *п-мерная* плотность



$$p(x) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}}$$

n-мерная гауссовская плотность

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

оценки параметров для максимального правдоподобия имеют следующий вид

мат.ожидание

$$\hat{\mu} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i$$

матрица ковариаций

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \hat{\mu}) (x_i - \hat{\mu})^T$$

Теорема: параметры оценки максимального правдоподобия для n-мерных гауссовских плотностей классов у имеют следующий вид

$$\hat{\mu}_{y} = \frac{1}{l_{y}} \sum_{i: y = y_{i}} x_{i} \qquad \hat{\Sigma}_{y} = \frac{1}{l_{y}} \sum_{i: y = y_{i}} (x_{i} - \hat{\mu}_{y}) (x_{i} - \hat{\mu}_{y})^{T}$$

Байесовский классификатор: квадратичный дискриминант

$$a(x) = \underset{y \in Y}{argmax} \left(\ln(\lambda_{y} P_{y}) - (x - \hat{\mu}_{y})^{T} \hat{\Sigma}_{y}^{-1} (x - \hat{\mu}_{y}) - \frac{1}{2} \ln(\det \hat{\Sigma}_{y}) \right)$$

Дополнение:

если матрицы ковариаций классов равны то параметры оценки плотности имеют следующий вид

$$\hat{\mu}_{y} = \frac{1}{l_{y}} \sum_{i:y=y_{i}} x_{i} \qquad \hat{\Sigma} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} (x_{i} - \hat{\mu}_{yi}) (x_{i} - \hat{\mu}_{yi})^{T}$$

Байесовский классификатор: линейный дискриминант Фишера

$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} \left(\ln(\lambda_{y} P_{y}) - \frac{1}{2} \hat{\mu}_{y}^{T} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_{y} + x^{T} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_{y} \right)$$

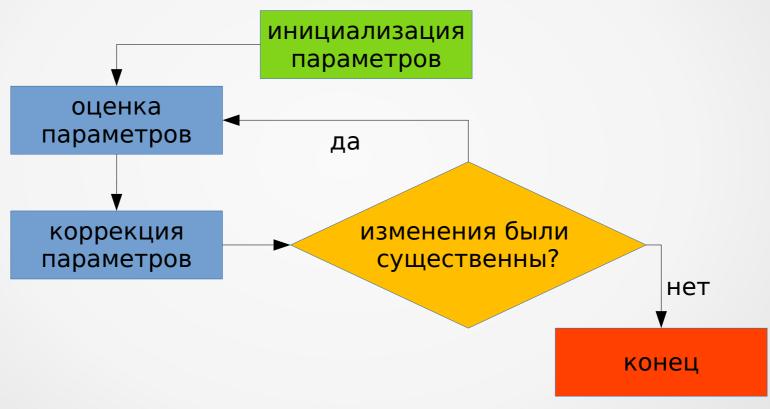
смеси распределений

$$\hat{p}(x) = \sum_{j=1}^{k} w_j \varphi_j(x, \theta_j);$$

$$\sum_{j=1}^{k} w_j = 1; \qquad w_j \ge 0$$

EM (expectation-maximization algorithm):

базовый вариант алгоритма



EM (expectation-maximization algorithm)

$$g_{ij} = \frac{w_j \varphi_j(x_i, \theta_j)}{\sum_{k=1}^s w_k \varphi_k(x_i, \theta_k)}$$

i=1...m

m - количество примеров X

s - количество компонент смеси

EM (expectation-maximization algorithm)

оценка

$$g_{ij} = \frac{w_j \varphi_j(x_i, \theta_j)}{\sum_{k=1}^s w_k \varphi_k(x_i, \theta_k)}$$

i=1...m m - количество примеров X s - количество компонент смеси

<u>коррекция</u>

$$w_{j} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$$

$$\theta_{j} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln \varphi_{j}(x_{i}, \theta)$$

EM (expectation-maximization algorithm)

оценка

$$g_{ij} = \frac{w_j \varphi_j(x_i, \theta_j)}{\sum_{k=1}^s w_k \varphi_k(x_i, \theta_k)}$$

i=1...m

m - количество примеров X

s - количество компонент смеси

<u>коррекция</u>

$$w_{j} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$$

$$\theta_{j} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln \varphi_{j}(x_{i}, \theta)$$

условие остановки: параметры не изменились

$$|g_{ij}(t-1)-g_{ij}(t)| < \delta; 0 < \delta < 1$$

ЕМ для нормальной плотности

$$p(x) = \sum_{k} w_{k} N(x; \Sigma_{k}, \mu_{k})$$

n-мерная гауссовская плотность

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

оценки параметров для максимального правдоподобия имеют следующий вид

мат.ожидание

$$\hat{\mu} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i$$

матрица ковариаций

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \hat{\mu}) (x_i - \hat{\mu})^T$$

ЕМ для нормальной плотности

$$p(x) = \sum_{k} w_{k} N(x; \Sigma_{k}, \mu_{k})$$

оценка:
$$g_{ij} = \frac{w_{j} N(x_{i}; \Sigma_{j}, \mu_{j})}{\sum_{k} w_{k} N(x_{i}; \Sigma_{k}, \mu_{k})}$$

$$P(x) = \sum_{k} w_{k} N(x; \Sigma_{k}, \mu_{k})$$

$$N(x; \Sigma, \mu) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^{T} \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^{n} \det \Sigma}}$$

$$\Sigma_{j}, \mu_{j} = \underset{\Sigma, \mu}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln N(x_{i}; \Sigma, \mu)$$

$$p(x) = \sum_{k} w_{k} N(x; \Sigma_{k}, \mu_{k})$$

оценка:
$$g_{ij} = \frac{w_j N(x_i; \Sigma_j, \mu_j)}{\sum_k w_k N(x_i; \Sigma_k, \mu_k)}$$

ЕМ для нормальной плотности
$$p(x) = \sum_{k} w_{k} N\left(x; \Sigma_{k}, \mu_{k}\right)$$
 оценка:
$$g_{ij} = \frac{w_{j} N\left(x_{i}; \Sigma_{j}, \mu_{j}\right)}{\sum_{k} w_{k} N\left(x_{i}; \Sigma_{k}, \mu_{k}\right)}$$

$$N(x; \Sigma, \mu) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^{T} \Sigma^{-1}(x - \mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^{n} \det \Sigma}}$$

задача:

$$\Sigma_{j}, \mu_{j} = \underset{\Sigma, \mu}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln N(x_{i}; \Sigma, \mu)$$

коррекция:

$$w_{j} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} N_{j}$$
 $N_{j} = \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$

$$N_{j} = \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$$

вес компоненты

ЕМ для нормальной плотности
$$p(x) = \sum_k w_k N(x; \Sigma_k, \mu_k)$$

оценка:
$$g_{ij} = \frac{w_j N(x_i; \Sigma_j, \mu_j)}{\sum_i w_k N(x_i; \Sigma_k, \mu_k)}$$

$$y_{ij} = \frac{\sum_{k} w_k N(x_i; \Sigma_k, \mu_k)}{\sum_{k} w_k N(x_i; \Sigma_k, \mu_k)}$$

$$N(x;\Sigma,\mu) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}}$$

задача:
$$\Sigma_{j}, \mu_{j} = \underset{\Sigma, \mu}{argmax} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln N(x_{i}; \Sigma, \mu)$$

коррекция:

$$w_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m N_j$$

$$N_{j} = \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$$

$$\mu_j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^m g_{ij} x_i$$

мат.ожидание компоненты

ЕМ для нормальной плотности

$$p(x) = \sum_{k} w_{k} N(x; \Sigma_{k}, \mu_{k})$$

оценка:
$$g_{ij} = \frac{w_j N(x_i; \Sigma_j, \mu_j)}{\sum w_k N(x_i; \Sigma_k, \mu_k)}$$

$$N(x; \Sigma, \mu) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}}$$

задача:

$$\Sigma_{j}, \mu_{j} = \underset{\Sigma, \mu}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln N(x_{i}; \Sigma, \mu)$$

коррекция:

$$w_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m N_j$$

$$N_{j} = \sum_{i=1}^{m} g_{ij}$$

$$\mu_j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^m g_{ij} x_i$$

вес компоненты

мат.ожидание компоненты

$$\Sigma_{j} = \frac{1}{c N_{j}} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} (x_{i} - \mu_{j})^{T} (x_{i} - \mu_{j}); 0 < c \le 1$$

матрица ковариаций компоненты

ЕМ с последовательным добавлением компонент



ЕМ последовательное добавление компонент (для нормальной плотности)

начальные значения параметров первой компоненты смеси

$$w_1 = 1$$

$$\Sigma_1 = cov(X)$$

$$\mu_1 = \frac{1}{|X|} \sum X$$

вес компоненты

матрица ковариаций компоненты

мат.ожидание компоненты

ЕМ последовательное добавление компонент (для нормальной плотности)

$$X_{low}$$
 \subset X - точки с правдоподобием (значением смеси) ниже порога

начальные значения параметров новой компоненты смеси

$$w_{k+1} = \frac{|X_{low}|}{|X|}$$
 $\Sigma_{k+1} = cov(X_{low})$ $\mu_{k+1} = w_{k+1} \frac{1}{|X_{low}|} \sum X_{low}$ вес компоненты матрица ковариаций компоненты компоненты

компоненты

ЕМ последовательное добавление компонент (для нормальной плотности)

 X_{low} \subset X - точки с правдоподобием (значением смеси) ниже порога

начальные значения параметров новой компоненты смеси

$$w_{k+1} = \frac{|X_{low}|}{|X|} \qquad \Sigma_{k+1} = cov(X_{low}) \qquad \mu_{k+1} = w_{k+1} \frac{1}{|X_{low}|} \sum X_{low}$$

вес компоненты

матрица ковариаций компоненты

мат.ожидание компоненты

коррекция весов старых компонент смеси

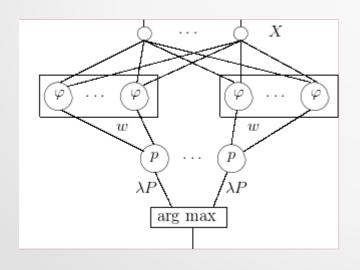
$$w_i := w_i (1 - w_{k+1})$$

после определения новых параметров смеси запускаем ЕМ

RBF - сеть радиальных базисных функций

Байесовский классификатор

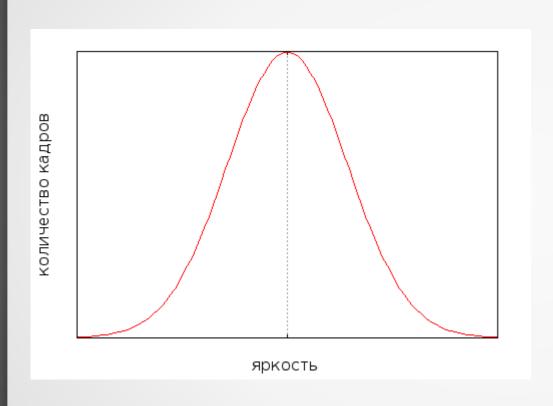
плотности классов - смеси нормальных распределений



$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} \lambda_{y} P(y) p(x|y)$$

$$p(x|y) = \sum_{k} w_{k}^{y} \varphi_{k}^{y}(x; \theta_{k}^{y}) = \sum_{k} w_{k}^{y} N(x; \Sigma_{k}^{y}, \mu_{k}^{y})$$

Пример: детектор новых объектов для неподвижных камер





Восстановление плотности: литература

git clone https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git

- К.В. Воронцов Байесовская теория классификации и методы восстановления плотности. Курс "Машинное обучение" ШАД Яндекс 2014
- Борисов Е.С. Байесовский классификатор. http://mechanoid.su/ml-bayes.html
- Борисов Е.С. Восстановление смеси плотностей распределений с помощью ЕМ-алгоритма. http://mechanoid.su/ml-em-base.html
- Борисов Е.С. Классификатор на основе RBF. http://mechanoid.su/ml-rbf.html
- Борисов Е.С. Детектор объектов для неподвижных камер. http://mechanoid.su/cv-backgr.html



Вопросы?