Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Тема: Вероятностный подход к классификации

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем

План лекции

1. Вероятностная постановка задач машинного обучения
2. Оптимальный байесовский классификатор
3. Наивный байесовский классификатор
4. Логистическая регрессия
5. Перекрестная энтропия (cross entropy)

Определения в одномерном случае

- Пусть дана некоторая вероятностная мера P
- X — случайная величина
- $F(x) = F_X(x) := P(X < x)$ — функция распределения
- $p(x) = p_X(x) := \frac{d}{dx} F_X(x)$ — плотность распределения

Дискретный случай

$P(x_i) = p_i$

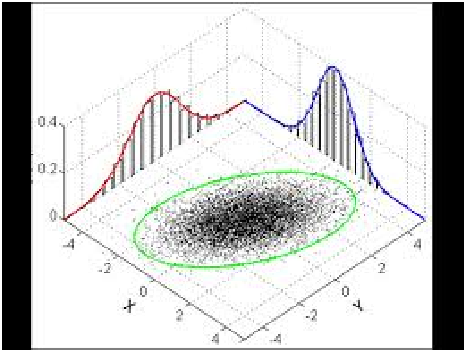
плотности не существует

Непрерывный случай

$P(x_i) = 0$, но если рассмотреть окрестность, то вероятность уже не нулевая

$p(x_i) \geq 0$

- Пусть дана некоторая вероятностная мера P
- $X = (X_1, \dots, X_n)$ — многомерная случайная величина
- $F(x_1, \dots, x_n) = F_X(x) := P(X_i < x_i$ для всех i) — функция распределения
- $p(x) = p_X(x) := \frac{\partial^n}{\partial x_1 \dots \partial x_n} F_X(x)$ — плотность распределения



Математическое ожидание (непрерывный случай)

Пусть $X \sim p(x)$. Тогда
$$EX := \int x dF(x) = \int x p(x) dx$$

Математическое ожидание

Математическое ожидание (непрерывный случай)

Пусть $X \sim p(x)$. Тогда

$$EX := \int xdF(x) = \int xp(x)dx$$

Математическое ожидание (дискретный случай)

Пусть $P(X = x_i) = p_i$. и $\sum\limits_{i=0}^{+\infty} p_i = 1$. Тогда

$$EX := \sum_{i=0}^{+\infty} p_i x_i$$

Дисперсия

Дисперсия

$$DX := E(X - EX)^2$$

Дисперсия

Дисперсия

$$DX := E(X - EX)^2$$

Среднеквадратическое отклонение

$$\sigma = \sqrt{DX}$$

Условная вероятность

Определение

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

$$p(x|y) := \frac{p(x, y)}{p(y)}$$

Условная вероятность

Определение

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

$$p(x|y) := \frac{p(x, y)}{p(y)}$$

Формула полной вероятности

$$p(x) = \int\limits_Y p(x|y)p(y)dy \text{ или } p(x) = \sum_{y \in Y} p(x|y)P(y)$$

Условная вероятность

Определение

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

$$p(x|y) := \frac{p(x, y)}{p(y)}$$

Формула полной вероятности

$$p(x) = \int\limits_Y p(x|y)p(y)dy \text{ или } p(x) = \sum_{y \in Y} p(x|y)P(y)$$

Теорема Байеса

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)} = \frac{p(y|x)p(x)}{\int\limits_X p(y|x)p(x)dx}$$

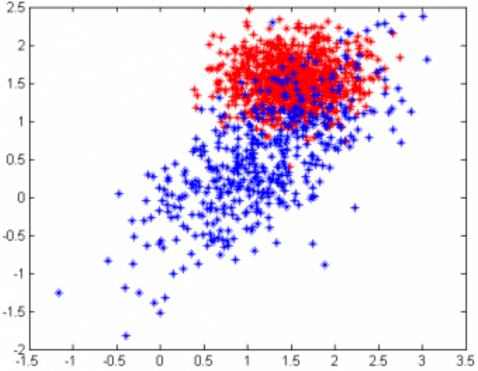
Предположение

Предположение

Пусть известно совместное распределение $p(x, y)$ на $X \times Y$.

Предположение

Пусть известно совместное распределение $p(x, y)$ на $X \times Y$.



Вероятностная постановка задач машинного обучения

Предположения

Пусть известно совместное распределение $p(x, y)$ на $X \times Y$
Пусть задана функция потерь $L(a(x), y)$

Определение

Средняя величина потерь для алгоритма $a(x)$

$$R(a) = \iint L(a(x), y) dP(x, y) = \iint L(a(x), y) p(x, y) dx dy$$

Задача

Найти такой $a^*(x)$, что $a^*(x) = \arg\min_a R(a)$.

Будем называть модель a^* оптимальной и R^* — значение оптимального среднего риска.

Вопрос

Каким образом задаётся совместное распределение $p(x, y)$?

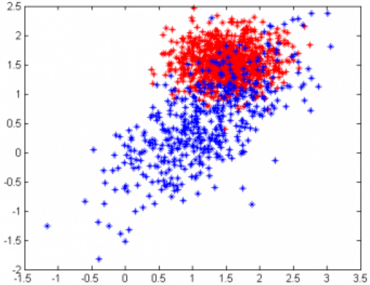
Классификация

Вопрос

Каким образом задаётся совместное распределение $p(x, y)$?

Вопрос

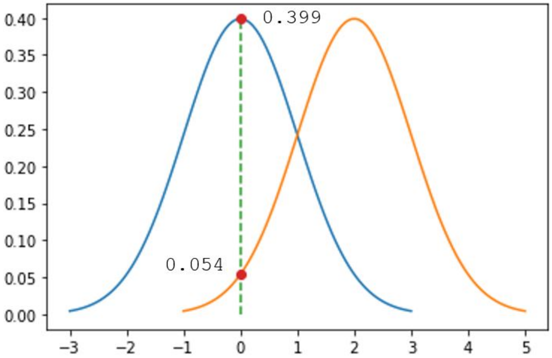
Как разделить объекты разных классов при известном совместном распределении $p(x, y)$?



Пример

Бинарная классификация

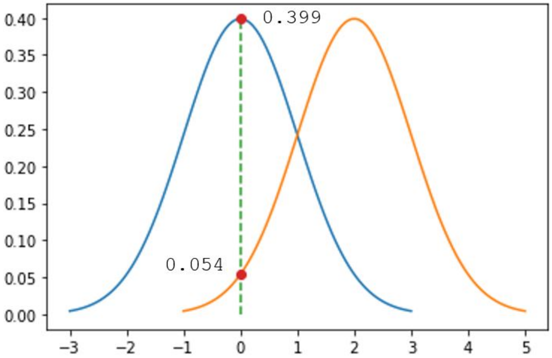
Дано: $p(x|y=-1) \sim N(\mu=0, \sigma=1)$, $p(x|y=1) \sim N(\mu=2, \sigma=1)$
К какому классу отнести объект $x = 0$?



Пример

Бинарная классификация

Дано: $p(x|y=-1) \sim N(\mu=0, \sigma=1)$, $p(x|y=1) \sim N(\mu=2, \sigma=1)$
К какому классу отнести объект $x=0$?



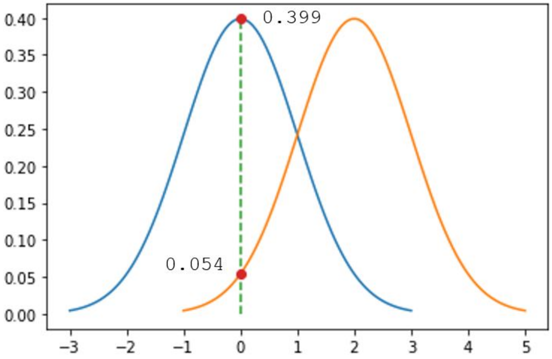
Выводы

- Для того, чтобы задать распределение $p(x, y)$ необходимо задать $P(y)$.

Пример

Бинарная классификация

Дано: $p(x|y=-1) \sim N(\mu=0, \sigma=1)$, $p(x|y=1) \sim N(\mu=2, \sigma=1)$
К какому классу отнести объект $x=0$?



Выводы

- Для того, чтобы задать распределение $p(x, y)$ необходимо задать $P(y)$.
- Функция потерь тоже может сильно влиять на решающее правило

Вывод

Рассмотрим простейшую функцию потерь индикатор ошибки $L(a(x), y) = [a(x) \neq y]$ и запишем средний риск

$$R(a) = \iint L(a(x), y)p(x, y)dxdy = \int\limits_X \sum_Y [a(x) \neq y]p(x|y)P(y)dx =$$

Оптимальный байесовский классификатор

Вывод

Рассмотрим простейшую функцию потерь индикатор ошибки $L(a(x), y) = [a(x) \neq y]$ и запишем средний риск

$$R(a) = \iint L(a(x), y)p(x, y)dxdy = \int\limits_X \sum_Y [a(x) \neq y]p(x|y)P(y)dx =$$

$$= \int\limits_X \sum_Y (1-[a(x) = y])p(x|y)P(y)dx = \int\limits_X \sum_Y p(x|y)P(y)dx - \int\limits_X \sum_Y [a(x) = y]p(x|y)P(y)dx$$

Оптимальный байесовский классификатор

Вывод

Рассмотрим простейшую функцию потерь индикатор ошибки $L(a(x), y) = [a(x) \neq y]$ и запишем средний риск

$$R(a) = \iint L(a(x), y) p(x, y) dx dy = \int\limits_X \sum\limits_Y [a(x) \neq y] p(x|y) P(y) dx =$$

$$= \int\limits_X \sum\limits_Y (1 - [a(x) = y]) p(x|y) P(y) dx = \int\limits_X \sum\limits_Y p(x|y) P(y) dx - \int\limits_X \sum\limits_Y [a(x) = y] p(x|y) P(y) dx$$

Откуда получаем, что

$$\arg\min_a R(a) = \arg\max_a \int\limits_X \sum\limits_Y [a(x) = y] p(x|y) P(y) dx = \arg\max_y p(x|y) P(y)$$

Оптимальный байесовский классификатор

Функция потерь

Если $L(a(x), y) = \lambda_y \geq 0$, если $a(x) \neq y$

Теорема

Минимум средних потерь при функции потерь $L(a(x), y)$ достигается байесовским классификатором

$$a(x) = \arg\max_y \lambda_y p(y|x) = \arg\max_y \lambda_y P(y) p(x|y)$$

Оптимальный байесовский классификатор

Функция потерь

Если $L(a(x), y) = \lambda_y \geq 0$, если $a(x) \neq y$

Теорема

Минимум средних потерь при функции потерь $L(a(x), y)$ достигается байесовским классификатором

$$a(x) = \arg\max_y \lambda_y p(y|x) = \arg\max_y \lambda_y P(y)p(x|y)$$

Следствие

Оптимальное правило классификации при одинаковых штрафах за ошибку максимизирует апостериорную вероятность класса

Оптимальный байесовский бинарный классификатор

Следствие

Для бинарного классификатора при $Y = \{-1, 1\}$ разделяющая поверхность может быть записана в следующем виде:

$$\lambda_+ P(y = +1|x) = \lambda_- P(y = -1|x),$$

а сам классификатор:

$$a(x) = \operatorname{sign}(\lambda_+ P(y = +1|x) - \lambda_- P(y = -1|x)) = \operatorname{sign}\left(\frac{P(y = +1|x)}{P(y = -1|x)} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)$$

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

- Распределения в реальной жизни никогда не известны

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

- Распределения в реальной жизни никогда не известны
- В реальной жизни у нас есть лишь обучающая выборка, то есть сэмплы распределений

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

- Распределения в реальной жизни никогда не известны
- В реальной жизни у нас есть лишь обучающая выборка, то есть сэмплы распределений

Основные подходы

- Восстановить плотность распределения по входным данным

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

- Распределения в реальной жизни никогда не известны
- В реальной жизни у нас есть лишь обучающая выборка, то есть сэмплы распределений

Основные подходы

- Восстановить плотность распределения по входным данным
- Сделать предположение о параметрическом семействе функции распределения и по данным настроить параметры

Недостатки байесовского подхода и методы их устранения

- Распределения в реальной жизни никогда не известны
- В реальной жизни у нас есть лишь обучающая выборка, то есть сэмплы распределений

Основные подходы

- Восстановить плотность распределения по входным данным
- Сделать предположение о параметрическом семействе функции распределения и по данным настроить параметры
- Уменьшать эмпирический риск в надежде, что средний риск тоже будет уменьшен

Время для вопросов

Классификация двух многомерных нормальных распределений

Распределения

Пусть $Y = \{0, 1\}$, $X = \mathbb{R}^n$ и

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

где μ_y — вектор математического ожидания в классе y, а Σ_y — ковариационная матрица распределения x в классе y

Разделяющая поверхность

$$0 = ln\frac{p(x|y=1)p(y=1)}{p(x|y=0)p(y=0)} = \ln\frac{p_1}{p_0} + \ln\frac{\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n det(\Sigma_1)}} exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^T \Sigma_1^{-1}(x-\mu_1)\right)}{\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n det(\Sigma_0)}} exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_0)^T \Sigma_0^{-1}(x-\mu_0)\right)} =$$

Классификация двух многомерных нормальных распределений

Распределения

Пусть $Y = \{0, 1\}$, $X = \mathbb{R}^n$ и

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

где μ_y — вектор математического ожидания в классе y, а Σ_y — ковариационная матрица распределения x в классе y

Разделяющая поверхность

$$0 = \ln\frac{p_1}{p_0} + \frac{1}{2}\ln\frac{detK_0}{detK_1} + \frac{1}{2}(x - \mu_0)^T \Sigma_0^{-1}(x - \mu_0) - \frac{1}{2}(x - \mu_1)^T \Sigma_1^{-1}(x - \mu_1)$$

Квадратичный дискриминант и линейный дискриминант

Разделяющая поверхность в общем случае

$$a(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + (w, x) - b = 0,$$

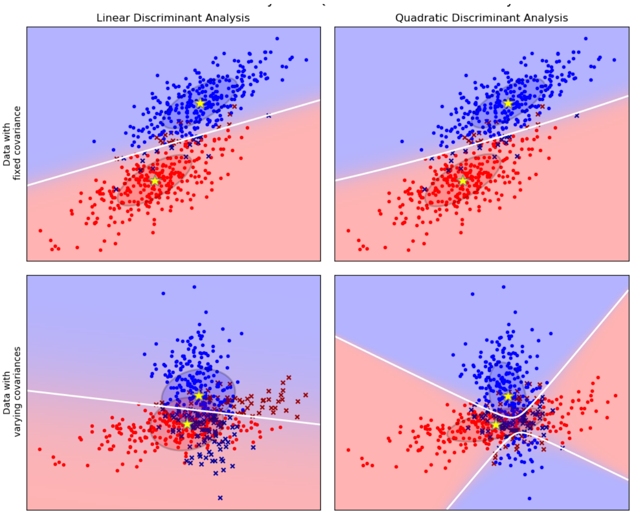
где $A = \Sigma_0^{-1} - \Sigma_1^{-1}$,
$w = \mu_1^T \Sigma_1^{-1} - \mu_0^T \Sigma_0^{-1}$,
$b = \ln \frac{p_1}{p_0} + \frac{1}{2} \ln \frac{det\Sigma_0}{det\Sigma_1} - \mu_1^T \Sigma_1^{-1} \mu_1 + \mu_0^T \Sigma_0^{-1} \mu_0$.

Разделяющая поверхность при $\Sigma_0 = \Sigma_1$

$$a(x) = (w, x) - b = 0,$$

где $w = (\mu_1 - \mu_0)^T \Sigma^{-1}$,
$b = \ln \frac{p_1}{p_0} - \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_0)^T \Sigma^{-1} (\mu_0 + \mu_1)$.

Квадратичный дискриминант и линейный дискриминант[1]



[1] https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/classification/plot_lda_qda.html

Наивный байесовский классификатор

Предположение

Все признаки являются независимыми случайными величинами $p(x|y) = \prod_i p_i(x_i|y)$

Наивный байеовский классификатор

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

Восстановление одномерной плотности гораздо более простая задача, чем восстановление многомерной.

Наивный байесовский гауссовский классификатор

Наивный байесовский классификатор

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

Дополнительное предположение

$$p_i(x_i|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} exp\left(\frac{(x_i - \mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

Наивный байесовский гауссовский классификатор

Наивный байесовский классификатор

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

Дополнительное предположение

$$p_i(x_i|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y}} exp\left(\frac{(x_i - \mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

Настройка параметров

$P(y)$ и параметры распределений μ и σ настраиваются по обучающему множеству

Другие реализации наивного байесовского классификатора в scikit-learn

- BernoulliNB
- CategoricalNB
- MultinomialNB

Мультиномиальное распределение

Определение

Пусть $X = (X_1, ..., X_m)$ и $n_1 + ... n_m = n$, а $p_1, ..., p_m \geq 0$ и $\sum p_i = 1$.

$$P(X_1 = x_1, ..., X_m = x_m) := \frac{n!}{x_1! ... x_m!} p_1^{x_1} ... p_m^{x_m}$$

Задача

Найдем оптимальный байесовский классификатор для двух классов в случае, когда $p(x|y) \sim Poly(n, p_1^y, ..., p_m^y)$

Мультиномиальное распределение

Найдем разделяющую поверхность:

$$p(y = +1|x) = p(y = -1|x)$$

Мультиномиальное распределение

Найдем разделяющую поверхность:

$$p(y = +1|x) = p(y = -1|x)$$

$$p(x|y = +1)p(y = +1) = p(x|y = -1)p(y = -1)$$

Мультиномиальное распределение

Найдем разделяющую поверхность:

$$p(y = +1|x) = p(y = -1|x)$$

$$p(x|y = +1)p(y = +1) = p(x|y = -1)p(y = -1)$$

$$\frac{n!}{x_1!\dots x_m!} p_{+1,1}^{x_1} \dots p_{+1,m}^{x_m} p(y = +1) = \frac{n!}{x_1!\dots x_m!} p_{-1,1}^{x_1} \dots p_{-1,m}^{x_m} p(y = -1)$$

Мультиномиальное распределение

Найдем разделяющую поверхность:

$$p(y=+1|x) = p(y=-1|x)$$

$$p(x|y=+1)p(y=+1) = p(x|y=-1)p(y=-1)$$

$$\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\ldots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1) = \frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\ldots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)$$

$$p_{+1,1}^{x_1}\ldots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1) = p_{-1,1}^{x_1}\ldots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)$$

Мультиномиальное распределение

Найдем разделяющую поверхность:

$$p(y=+1|x) = p(y=-1|x)$$

$$p(x|y=+1)p(y=+1) = p(x|y=-1)p(y=-1)$$

$$\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\ldots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1) = \frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\ldots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)$$

$$p_{+1,1}^{x_1}\ldots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1) = p_{-1,1}^{x_1}\ldots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)$$

$$x_1 \ln p_{+1,1} + \ldots + x_m \ln p_{+1,m} + \ln p(y=+1) = x_1 \ln p_{-1,1} + \ldots + x_m \ln p_{-1,m} + \ln p(y=-1)$$

Вывод 1

Разделяющая поверхность линейна

Мультиномиальное распределение

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!} p_{+1,1}^{x_1} \cdots p_{+1,m}^{x_m} p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!} p_{-1,1}^{x_1} \cdots p_{-1,m}^{x_m} p(y=-1)} =$$

Мультиномиальное распределение

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)}=\frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)}=\frac{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\cdots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\cdots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)}=$$

$$=\frac{p(y=+1)}{p(y=-1)}exp\left(x_1\ln p_{+1,1}+\ldots+x_m\ln p_{+1,m}-x_1\ln p_{-1,1}+\ldots+x_m\ln p_{-1,m}\right)=$$

Мультиномиальное распределение

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!\dots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\cdots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!\dots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\cdots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)} =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + \dots + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + \dots + x_m \ln p_{-1,m}\right) =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,m}}\right) = exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,i}} + \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)}\right) = e^{(w,x)},$$

где $x = (x_1, \dots, x_m, 1)$, $w = (\ln \frac{p_{+1,1}}{p_{-1,1}}, \dots, \ln \frac{p_{+1,m}}{p_{-1,m}}, \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)})$.

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\cdots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!\ldots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\cdots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)} =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + \ldots + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + \ldots + x_m \ln p_{-1,m}\right) =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,m}}\right) = exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,i}} + \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)}\right) = e^{(w,x)},$$

где $x = (x_1, \ldots, x_m, 1)$, $w = (\ln \frac{p_{+1,1}}{p_{-1,1}}, \ldots, \ln \frac{p_{+1,m}}{p_{-1,m}}, \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)})$.

Учитывая, что $p(y=+1|x) + p(y=-1|x) = 1$, получаем, что $\frac{p(y=+1|x)}{1-p(y=+1|x)} = e^{(w,x)}$.

Мультиномиальное распределение

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!\dots x_m!}p_{+1,1}^{x_1}\dots p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!\dots x_m!}p_{-1,1}^{x_1}\dots p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)} =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + \dots + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + \dots + x_m \ln p_{-1,m}\right) =$$

$$= \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,m}}\right) = exp\left(\sum_{i-1}^{m} x_i \ln \frac{p_{+1,i}}{p_{-1,i}} + \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)}\right) = e^{(w,x)},$$

где $x = (x_1, \dots, x_m, 1)$, $w = (\ln \frac{p_{+1,1}}{p_{-1,1}}, \dots, \ln \frac{p_{+1,m}}{p_{-1,m}}, \ln \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)})$.

Учитывая, что $p(y=+1|x) + p(y=-1|x) = 1$, получаем, что $\frac{p(y=+1|x)}{1-p(y=+1|x)} = e^{(w,x)}$. Откуда

$$p(y=+1|x) = \frac{1}{1+e^{-(w,x)}}$$

Мультиномиальное распределение

$$p(y=+1|x) = \frac{1}{1+e^{-(w,x)}}$$

Мультиномиальное распределение

$$p(y = +1|x) = \frac{1}{1 + e^{-(w,x)}}$$

$$p(y = -1|x) = 1 - p(y = +1|x) = \frac{1}{1 + e^{(w,x)}}$$

Мультиномиальное распределение

$$p(y = +1|x) = \frac{1}{1 + e^{-(w,x)}}$$

$$p(y = -1|x) = 1 - p(y = +1|x) = \frac{1}{1 + e^{(w,x)}}$$

Вывод 2

$$p(y|x) = \sigma((w,x)y),$$

где $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ — сигмоида

Вывод 1

Разделяющая поверхность линейна

Вывод 2

$$p(y|x) = \sigma((w, x)y),$$

где $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ — сигмоида

Мультиномиальное распределение: логистическая регрессия

Вывод 1

Разделяющая поверхность линейна

Вывод 2

$$p(y|x) = \sigma((w, x)y),$$

где $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ — сигмоида

Определение

Классификационная бинарная модель, в которой вероятность принадлежности к положительному классу задаётся сигмоидой от линейной функции по входу называется **логистической регрессией**

Экспонентное семейство распределений [2]

Определение

Будем говорить, что распределение принадлежит экспонентным семейству распределений, если плотность распределения может быть записана в следующем виде:

$$p(x|\theta) = h(x)g(\theta)exp(\eta(\theta)T(x))$$

Примеры экспонентных распределений: равномерное, нормальное, гипергеометрическое, пуассоновское, биноминальное, Г-распределение и др.

[2] https://en.wikipedia.org/wiki/Exponential_family

Линейность байесовского классификатора

Предположения

1. $T(x) = x$
2. $p(x|y) = h(x)g_y(\theta_y)exp(\eta_y(\theta_y)x)$

Линейность байесовского классификатора

Предположения

1. $T(x) = x$
2. $p(x|y) = h(x)g_y(\theta_y)exp(\eta_y(\theta_y)x)$

Теорема о линейности байесовского классификатора

Если для бинарной классификации плотности распределений имеют следующий вид

$$p(x|y) = h(x)g_y(\theta_y)exp(\eta_y(\theta_y)x)$$

и среди признаков есть константа, то выполнено:

1. Разделяющая поверхность линейна $(w, x) = \ln \frac{\lambda_-}{\lambda_+}$
2. $p(y|x) = \sigma(\langle w, x\rangle y)$, где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ – логистическая функция (сигмоид)

Доказательство теоремы о линейности байесовского классификатора

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=1)} = \frac{p(y=+1)h(x)g_{+}(\theta_{+})exp\left(\eta_{+}(\theta_{+})x\right)}{p(y=-1)h(x)g_{-}(\theta_{-})exp\left(\eta_{-}(\theta_{-})x\right)} =$$

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=1)} = \frac{p(y=+1)h(x)g_+(\theta_+)exp\left(\eta_+(\theta_+)x\right)}{p(y=-1)h(x)g_-(\theta_-)exp\left(\eta_-(\theta_-)x\right)} =$$

(выражение перед экспонентой можно внести в скалярное произведение, так как среди признаков есть константа)

$$= \frac{p(y=+1)g_+(\theta_+)}{p(y=-1)g_-(\theta_-)}exp\left(\eta_+(\theta_+)x - \eta_-(\theta_-)x\right) = e^{(w,x)}$$

Доказательство теоремы о линейности байесовского классификатора

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=1)} = \frac{p(y=+1)h(x)g_+(\theta_+)exp\left(\eta_+(\theta_+)x\right)}{p(y=-1)h(x)g_-(\theta_-)exp\left(\eta_-(\theta_-)x\right)} =$$

(выражение перед экспонентой можно внести в скалярное произведение, так как среди признаков есть константа)

$$= \frac{p(y=+1)g_+(\theta_+)}{p(y=-1)g_-(\theta_-)} exp\left(\eta_+(\theta_+)x - \eta_-(\theta_-)x\right) = e^{(w,x)}$$

Из полученного выражения и того, что $p(y=+1|x) + p(y=-1|x) = 1$ получаем, что $p(y|x) = \sigma(\langle w, x\rangle y)$, где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$.

Доказательство теоремы о линейности байесовского классификатора

$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=1)} = \frac{p(y=+1)h(x)g_+(\theta_+)exp\left(\eta_+(\theta_+)x\right)}{p(y=-1)h(x)g_-(\theta_-)exp\left(\eta_-(\theta_-)x\right)} =$$

(выражение перед экспонентой можно внести в скалярное произведение, так как среди признаков есть константа)

$$= \frac{p(y=+1)g_+(\theta_+)}{p(y=-1)g_-(\theta_-)} exp\left(\eta_+(\theta_+)x - \eta_-(\theta_-)x\right) = e^{(w,x)}$$

Из полученного выражения и того, что $p(y=+1|x) + p(y=-1|x) = 1$ получаем, что $p(y|x) = \sigma(\langle w, x\rangle y)$, где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$. Для бинарной классификации разделяющая поверхность оптимального байесовского классификатора имеет вид: $\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+} = e^{(w,x)} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+} = 0$, что и завершает доказательство.

Время для вопросов

Принцип максимума правдоподобия

Задача

Пусть $p(x) = p(x|\theta)$ — параметрическая модель распределения

Принцип максимума правдоподобия

Задача

Пусть $p(x) = p(x|\theta)$ — параметрическая модель распределения

Принцип максимума правдоподобия

$$L(\theta, X_{train}) = \prod_i p(x_i|\theta) \to \max_\theta$$

Принцип максимума правдоподобия

Задача

Пусть $p(x) = p(x|\theta)$ — параметрическая модель распределения

Принцип максимума правдоподобия

$$L(\theta, X_{train}) = \prod_i p(x_i|\theta) \to \max_\theta$$

Необходимое условие максимума

$$\frac{\partial}{\partial\theta} L(\theta, X_{train}) = 0$$

Логарифмическая функция потерь

$$L = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$$

Логарифмическая функция потерь

$$L = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$$

Подставим в формулу выражение для логистической регрессии $p(x, y) = p(y|x) \cdot p(x) = \sigma(\langle w, x \rangle) \cdot p(x)$:

$$L = \sum_{i=1}^{m} \log \sigma(\langle w, x_i \rangle y_i) + p(x_i) \to \max_w$$

Логарифмическая функция потерь

$$L = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$$

Подставим в формулу выражение для логистической регрессии $p(x, y) = p(y|x) \cdot p(x) = \sigma(\langle w, x \rangle) \cdot p(x)$:

$$L = \sum_{i=1}^{m} \log \sigma(\langle w, x_i \rangle y_i) + p(x_i) \to \max_w$$

Максимизация L эквивалентна следующей задаче минимизации:

$$R = \sum_{i=1}^{m} \log(1 + \exp(-\langle w, x_i \rangle y_i)) \to \min_w$$

Бинарная перекрестная энтропия

Бинарная кросс энтропия

Пусть $Y = \{0, 1\}$, $p_i = \sigma(\langle w, x_i \rangle)$. Тогда функция потерь логистической регрессии будет:

$$ce = -\sum_i (y_i log(p_i) + (1 - y_i) log(1 - p_i))$$

Бинарная перекрестная энтропия

Бинарная кросс энтропия

Пусть Y $= \{0, 1\}$, $p_i = \sigma(\langle w, x_i \rangle)$. Тогда функция потерь логистической регрессии будет:

$$ce = -\sum_i (y_i log(p_i) + (1 - y_i) log(1 - p_i))$$

Замечание

Однослойная нейронная сеть с функцией активации сигмоида и лосс-функцией кросс энтропия — логистическая регрессия.

Takeaways

- В некоторых случаях при известном распределении оптимальный классификатор может быть вычислен аналитически
- Для разделения двух гауссиан достаточно квадратичной модели, а иногда и линейной
- Наивный байесовский классификатор довольно простая модель, которая работает
- Принцип максимума правдоподобия — рабочий инструмент для подбора параметров, если плотность задана некоторым параметрическим семейством

Время для вопросов