Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение Лекция 2. Вероятностный подход

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем





План лекции

- Вероятностная постановка задач машинного обучения
- Оптимальный байесовский классификатор
- Наивный байесовский классификатор
- Логистическая регрессия
- Перекрестная энтропия (cross entropy)





Определения в одномерном случае

- ullet Пусть дана некоторая вероятностная мера P
- Х случайная величина
- ullet $F(x) = F_X(x) := P(X < x)$ 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

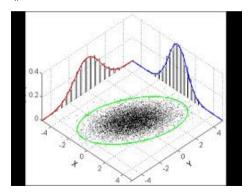
$$p(x_i) \geq 0$$





Определения в многомерном случае

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



Математическое ожидание

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

$$EX := \int x dF(x) = \int x p(x) dx$$

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

$$p(x) = \int\limits_{Y} p(x|y)p(y)dy$$
 или $p(x) = \sum\limits_{y \in Y} p(x|y)P(y)$



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

$$p(x) = \int\limits_{Y} p(x|y)p(y)dy$$
 или $p(x) = \sum\limits_{y \in Y} p(x|y)P(y)$

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

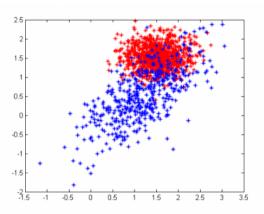
Предположение

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

Предположение

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)

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

Задача

Найти такой $a^*(x)$, что $a^*(x) = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} R(x)$.

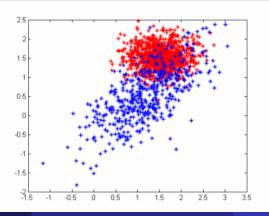
Будем называть модель a^* оптимальной и R^* — значение оптимального среднего риска.

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

Принцип максимума апостериорной вероятности

Вопрос

Как разделить объекты из этих двух плотностей при известном совместном распределении p(x,y)?



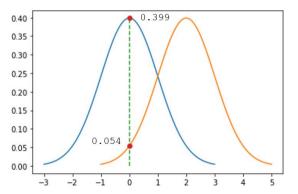


Пример

Бинарная классификация

Дано: $p(x|y=-1) \sim \mathcal{N}(\mu=0,\sigma=1)$, $p(x|y=1) \sim \mathcal{N}(\mu=2,\sigma=1)$

K какому классу отнести объект x=0?



Вывод

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

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

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. 12 / 36

Вывод

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

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

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

12 / 36

Вывод

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

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

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

Откуда получаем, что

$$\arg\min_{a} R(a) = \arg\max_{a} \int_{X} \sum_{Y} [a(x) = y] p(x|y) P(y) dx = \arg\max_{y} p(x|y) P(y)$$

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. 12 / 36

Функция потерь

Если $L(a(x),y)=\lambda_y[a(x)
eq y]$, где $\lambda_y\geq 0$

Теорема

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

$$a(x) = \underset{y}{\operatorname{arg\,max}} \lambda_y P(y|x) = \underset{y}{\operatorname{arg\,max}} \lambda_y P(y) p(x|y)$$





Функция потерь

Если $L(a(x),y)=\lambda_y[a(x)
eq y]$, где $\lambda_y \geq 0$

Теорема

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

$$a(x) = \underset{y}{\operatorname{arg\,max}} \lambda_y P(y|x) = \underset{y}{\operatorname{arg\,max}} \lambda_y P(y) p(x|y)$$

Следствие

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

4 D > 4 A > 4 B > 4 B > 9 Q C

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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:

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







• Распределения в реальной жизни никогда не известны





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



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. 15 / 36

- 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



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. 15 / 36

- 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



Бабин Д. Н., Иванов И.Е.

- 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



Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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

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

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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

$$0 = \ln \frac{p_1}{p_0} + \frac{1}{2} \ln \frac{\det K_0}{\det K_1} + \frac{1}{2} (x - \mu_0)^T \Sigma_0^{-1} (x - \mu_0) - \frac{1}{2} (x - \mu_1)^T \Sigma_1^{-1} (x - \mu_1)$$





Бабин Д. Н., Иванов И.Е.

Квадратичный дискриминант и линейный дискриминант

Разделяющая поверхность в общем случае

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

где
$$A = \Sigma_0^{-1} - \Sigma_1^{-1},$$
 $w = \mu_1^T \Sigma_1^{-1} - \mu_0^T \Sigma_0^{-1},$ $b = \ln \frac{\rho_1}{\rho_0} + \frac{1}{2} \ln \frac{\det \Sigma_0}{\det \Sigma_1} - \mu_1^T \Sigma_1^{-1} \mu_1 + \mu_0^T \Sigma_0^{-1} \mu_0.$

Разделяющая поверхность при $\Sigma_0 = \Sigma_1$

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

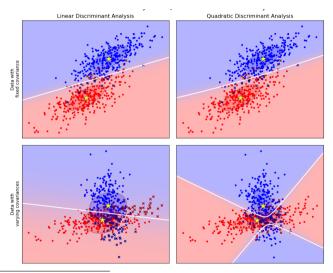
где
$$w = (\mu_1 - \mu_0)^T \Sigma^{-1},$$

 $b = \ln \frac{\rho_1}{\rho_0} - \frac{1}{2} (\mu_1 - \mu_0)^T \Sigma^{-1} (\mu_0 + \mu_1).$



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. 18/36

Квадратичный дискриминант и линейный дискриминант¹



¹https://scikit-learn.org/stable/auto examples/classification/plot Ida qda.html> < > > < ≥ > < ≥ > <

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

Наивный байесовский классификатор

Предположение

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

Наивный байесовский классификатор

$$a(x) = \argmax_{y \in Y} P(y) \prod_{i} p(x_i|y)$$

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





Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

Наивный байесовский гауссовский классификатор

Наивный байесовский классификатор

$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{arg max}} P(y) \prod_{i} p(x_i|y)$$

Дополнительное предположение

$$p_i(x_i|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{y,i}} exp\left(\frac{(x_i - \mu_{y,i})^2}{2\sigma_{y,i}^2}\right)$$





Наивный байесовский гауссовский классификатор

Наивный байесовский классификатор

$$a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{arg\,max}} P(y) \prod_{i} p(x_i|y)$$

Дополнительное предположение

$$p_i(x_i|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{y,i}} exp\left(\frac{(x_i - \mu_{y,i})^2}{2\sigma_{y,i}^2}\right)$$

Настройка параметров

P(y) и параметры распределений $\mu_{y,i}$ и $\sigma_{y,i}$ настраиваются по обучающему множеству





Другие реализации наивного байесовского классификатора в scikit-learn

- BernoulliNB
- CategoricalNB
- MultinomialNB



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 $p(x|y) \sim Poly(n, p_1^y, ..., p_m^y)$





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



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

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



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

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

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



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

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

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

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



Найдем разделяющую поверхность:

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

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

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

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

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

Вывод 1

Разделяющая поверхность линейна

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



$$\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} = \frac{p(x|y=+1)p(y=+1)}{p(x|y=-1)p(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!...x_m!}p_{+1,1}^{x_1}...p_{+1,m}^{x_m}p(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!...x_m!}p_{-1,1}^{x_1}...p_{-1,m}^{x_m}p(y=-1)} = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{+1,m} - x_1 \ln p_{-1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,m}\right) = \frac{p(y=+1)}{p(y=-1)} \exp\left(x_1 \ln p_{+1,1} + ... + x_m \ln p_{-1,1} + ... + x_m$$



$$\begin{split} \frac{\rho(y=+1|x)}{\rho(y=-1|x)} &= \frac{\rho(x|y=+1)\rho(y=+1)}{\rho(x|y=-1)\rho(y=-1)} = \frac{\frac{n!}{x_1!...x_m!}\rho_{+1,1}^{x_1}...\rho_{+1,m}^{x_m}\rho(y=+1)}{\frac{n!}{x_1!...x_m!}\rho_{-1,1}^{x_1}...\rho_{-1,m}^{x_m}\rho(y=-1)} = \\ &= \frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)} exp\left(x_1\ln\rho_{+1,1} + ... + x_m\ln\rho_{+1,m} - x_1\ln\rho_{-1,1} + ... + x_m\ln\rho_{-1,m}\right) = \\ &= \frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)} exp\left(\sum_{i=1}^m x_i\ln\frac{\rho_{+1,i}}{\rho_{-1,m}}\right) = exp\left(\sum_{i=1}^m x_i\ln\frac{\rho_{+1,i}}{\rho_{-1,i}} + \ln\frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}\right) = e^{(w,x)}, \end{split}$$
 где $x = (x_1, ..., x_m, 1), \ w = (\ln\frac{\rho_{+1,1}}{\rho_{-1,1}}, ..., \ln\frac{\rho_{+1,m}}{\rho_{-1,m}}, \ln\frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}). \end{split}$



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

$$= \frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}ex\rho\left(x_1\ln\rho_{+1,1}+\dots+x_m\ln\rho_{+1,m}-x_1\ln\rho_{-1,1}+\dots+x_m\ln\rho_{-1,m}\right) =$$

$$= \frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}ex\rho\left(\sum_{i=1}^m x_i\ln\frac{\rho_{+1,i}}{\rho_{-1,m}}\right) = ex\rho\left(\sum_{i=1}^m x_i\ln\frac{\rho_{+1,i}}{\rho_{-1,i}}+\ln\frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}\right) = e^{(w,x)},$$
где $x=(x_1,\dots,x_m,1),\ w=(\ln\frac{\rho_{+1,1}}{\rho_{-1,1}},\dots,\ln\frac{\rho_{+1,m}}{\rho_{-1,m}},\ln\frac{\rho(y=+1)}{\rho(y=-1)}).$
Учитывая, что $p(y=+1|x)+\rho(y=-1|x)=1$, получаем, что $\frac{\rho(y=+1|x)}{1-\rho(y=+1|x)}=e^{(w,x)}.$

Бабин Д.Н., Иванов И.Е 25 / 36

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

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

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

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





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



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

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



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

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

Вывод 2

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

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





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



Мультиномиальное распределение: логистическая регрессия

Вывод 1

Разделяющая поверхность линейна

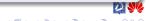
Вывод 2

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

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 экспонентныму 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.



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

Линейность байесовского классификатора

Предположения

$$T(x) = x$$



Линейность байесовского классификатора

Предположения

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

∢□▶ ∢圖▶ ∢團▶ ∢團▶

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





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

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

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



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

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

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

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 $\sigma(z)=\frac{1}{1+e^{-z}}$.



30 / 36



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

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

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

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.





Бабин Д.Н., Иванов И.E. 30 / 36

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

$$L = \prod_i p(x_i|\theta) o \max_{\theta}$$





Принцип максимума правдоподобия

Задача

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

Принцип максимума правдоподобия

$$L = \prod_i p(x_i| heta) o \max_{ heta}$$

Необходимое условие максимума

$$\frac{\partial}{\partial \theta}L = 0$$





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 минимизации аппроксимированного эмпирического риска R:

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





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
- Логистическая регрессия это однослойная нейронная сеть с активацией сигмоидой (или софтмакс) и функцией потерь перекрёстной энтропией.



Время для вопросов



