

Статистические (байесовские) методы классификации

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
<http://www.MachineLearning.ru/wiki>
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

февраль 2013

Содержание

- 1 Оптимальный байесовский классификатор**
 - Вероятностная постановка задачи классификации
 - Оптимальный байесовский классификатор
 - Задача восстановления плотности распределения
 - Наивный байесовский классификатор
- 2 Непараметрическое восстановление плотности**
 - Одномерный случай
 - Многомерный случай
 - Метод парзеновского окна
 - Выбор метрики, ядра, ширины окна
- 3 Параметрическое восстановление плотности**
 - Принцип максимума правдоподобия
 - Нормальный дискриминантный анализ
 - Геометрический смысл
 - Проблемы мультиколлинеарности и переобучения
- 4 Восстановление смеси распределений**
 - Модель смеси распределений
 - EM-алгоритм
 - Некоторые модификации EM-алгоритма
 - Сеть радиальных базисных функций

Постановка задачи

X — объекты, Y — ответы, $X \times Y$ — в.п. с плотностью $p(x, y)$;

Дано:

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — простая выборка;

Найти:

классификатор $a: X \rightarrow Y$ с минимальной вероятностью ошибки.

Временное допущение: пусть известна совместная плотность

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

$P(y) \equiv P_y$ — априорная вероятность класса y ;

$p(x|y) \equiv p_y(x)$ — функция правдоподобия класса y ;

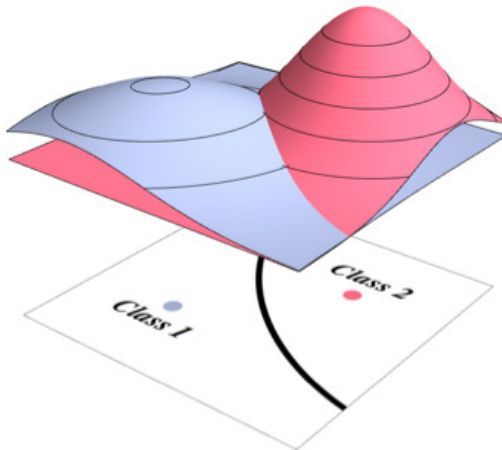
$P(y|x)$ — апостериорная вероятность класса y ;

Принцип максимума апостериорной вероятности:

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

Классификация по максимуму функции правдоподобия

Частный случай: $a(x) = \arg \max_{y \in Y} p_y(x)$ при $P_y = \text{const.}$



Функционал среднего риска

$a: X \rightarrow Y$ разбивает X на непересекающиеся области:

$$A_y = \{x \in X \mid a(x) = y\}, \quad y \in Y.$$

Ошибка: объект x класса y попадает в A_s , $s \neq y$.

Вероятность ошибки: $P(A_s, y) = \int_{A_s} p(x, y) dx$.

Потеря от ошибки: задана $\lambda_{ys} \geq 0$, для всех $(y, s) \in Y \times Y$.

Средний риск — мат.ожидание потери для классификатора a :

$$R(a) = \sum_{y \in Y} \sum_{s \in Y} \lambda_{ys} P(A_s, y),$$

Две теоремы об оптимальности байесовского классификатора

Теорема

Если известны $P_y = P(y)$ и $p_y(x) = p(x|y)$, то минимум среднего риска $R(a)$ достигается при

$$a(x) = \arg \min_{s \in Y} \sum_{y \in Y} \lambda_{ys} P_y p_y(x).$$

Теорема

Если к тому же $\lambda_{yy} = 0$ и $\lambda_{ys} \equiv \lambda_y$ для всех $y, s \in Y$, то минимум среднего риска $R(a)$ достигается при

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y P_y p_y(x).$$

При чём тут Байес?

Апостериорная вероятность по формуле Байеса:

$$P(y|x) = \frac{p(x, y)}{p(x)} = \frac{P_y p_y(x)}{\sum_{s \in Y} P_s p_s(x)}.$$

Если $\lambda_y = 1$, то получаем всё тот же

принцип максимума апостериорной вероятности:

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y P_y p_y(x) = \arg \max_{y \in Y} P(y|x).$$

Ожидаемая потеря на объекте x :

$$R(x) = \sum_{y \in Y} \lambda_y P(y|x).$$

Итак, есть две подзадачи, причём вторую мы уже решили!

1 Дано:

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка.

Найти:

эмпирические оценки \hat{P}_Y и $\hat{p}_Y(x)$, $y \in Y$

(восстановить плотность распределения по выборке).

2 Дано:

априорные вероятности P_Y ,

функции правдоподобия $p_Y(x)$, $y \in Y$.

Найти:

классификатор $a: X \times Y$, минимизирующий $R(a)$.

Ехидное замечание: Когда вместо P_Y и $p_Y(x)$ подставляются их эмпирические оценки, байесовский классификатор перестаёт быть оптимальным.

Задачи эмпирического оценивания

- Оценивание априорных вероятностей частотами

$$\hat{P}_y = \frac{\ell_y}{\ell}, \quad \ell_y = |X_y|, \quad X_y = \{x_i \in X: y_i = y\}, \quad y \in Y.$$

- Оценивание функций правдоподобия:

Дано:

$X^m = \{x_1, \dots, x_m\}$ — простая выборка (X_y без ответов y_i).

Найти:

эмпирическую оценку плотности $\hat{p}(x)$,

аппроксимирующую истинную плотность $p(x)$ на всём X :

$$\hat{p}(x) \rightarrow p(x) \text{ при } m \rightarrow \infty.$$

Анонс: три подхода к оцениванию плотностей

- 1 Параметрическое оценивание плотности:

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

- 2 Восстановление смеси распределений:

$$\hat{p}(x) = \sum_{j=1}^k w_j \varphi(x, \theta_j), \quad k \ll m.$$

- 3 Непараметрическое оценивание плотности:

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

Наивный байесовский классификатор

Допущение (наивное):

Признаки $f_j: X \rightarrow D_j$ — независимые случайные величины с плотностями распределения, $p_{y,j}(\xi)$, $y \in Y$, $j = 1, \dots, n$.

Тогда функции правдоподобия классов представимы в виде произведения одномерных плотностей по признакам:

$$p_y(x) = p_{y,1}(\xi_1) \cdots p_{y,n}(\xi_n), \quad x = (\xi_1, \dots, \xi_n), \quad y \in Y.$$

Прологарифмируем (для удобства). Получим классификатор

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y \hat{P}_y + \sum_{j=1}^n \ln \hat{p}_{yj}(\xi_j) \right).$$

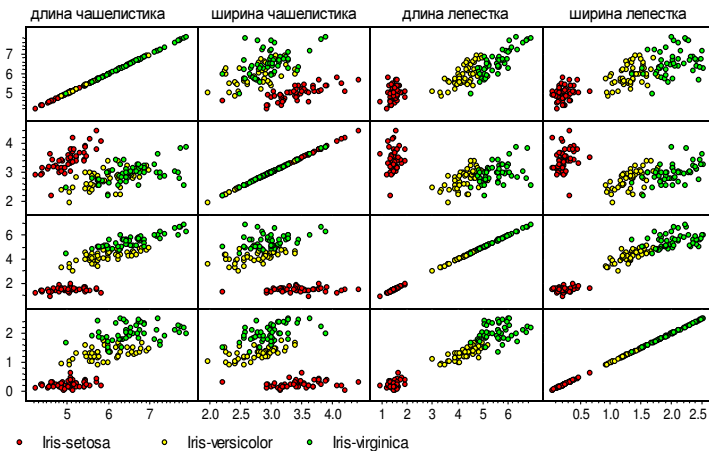
Восстановление n одномерных плотностей

— намного более простая задача, чем одной n -мерной.

Ирисы Фишера

$n = 4$ признака, $|Y| = 3$ класса, длина выборки $\ell = 150$.

Можно ли здесь применить наивный байесовский классификатор?



Начнём с определения плотности вероятности

Дискретный случай: $|X| \ll m$. Гистограмма значений x_i :

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

Одномерный непрерывный случай: $X = \mathbb{R}$. По определению плотности, если $P[a, b]$ — вероятностная мера отрезка $[a, b]$:

$$p(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{2h} P[x - h, x + h],$$

Эмпирическая оценка плотности по окну ширины h :

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

Локальная непараметрическая оценка Парзена-Розенблатта

Эмпирическая оценка плотности по окну ширины h :

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

Обобщение: оценка Парзена-Розенблатта по окну ширины h :

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

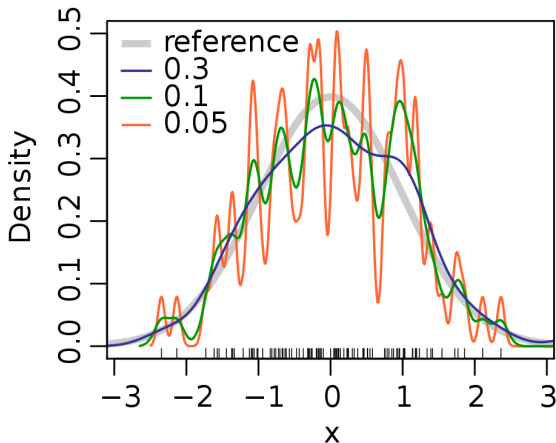
где $K(r)$ — ядро, удовлетворяющее требованиям:

- чётная функция;
- нормированная функция: $\int K(r) dr = 1$;
- (как правило) невозрастающая, неотрицательная функция.

В частности, при $K(r) = \frac{1}{2} [|r| < 1]$ имеем эмпирическую оценку.

Пример. Ядерные оценки плотности при разных h

Оценка $\hat{p}_h(x)$ существенно зависит от ширины окна h :



Обоснование оценки Парзена-Розенблатта

Теорема (одномерный случай, $X = \mathbb{R}$)

Пусть выполнены следующие условия:

- 1) X^m — простая выборка из распределения $p(x)$;
- 2) ядро $K(z)$ непрерывно и ограничено: $\int_X K^2(z) dz < \infty$;
- 3) последовательность h_m : $\lim_{m \rightarrow \infty} h_m = 0$ и $\lim_{m \rightarrow \infty} mh_m = \infty$.

Тогда:

- 1) $\hat{p}_{h_m}(x) \rightarrow p(x)$ при $m \rightarrow \infty$ для почти всех $x \in X$;
- 2) скорость сходимости имеет порядок $O(m^{-2/5})$.

А как быть в многомерном случае, когда $X = \mathbb{R}^n$?

Два варианта обобщения на многомерный случай

1. Если объекты описываются n числовыми признаками

$$f_j: X \rightarrow \mathbb{R}, \quad j = 1, \dots, n.$$

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \prod_{j=1}^n \frac{1}{h_j} K\left(\frac{f_j(x) - f_j(x_i)}{h_j}\right).$$

2. Если на X задана функция расстояния $\rho(x, x')$:

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

где $V(h) = \int_X K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right) dx$ — нормирующий множитель.

Замечание: $V(h)$ не должен зависеть от x_i (однородность $\langle X, \rho \rangle$).

Упражнение: Приведите примеры таких K и ρ , чтобы варианты 1 и 2 оказались эквивалентными.

Метод парзеновского окна

Парзеновская оценка плотности для каждого класса $y \in Y$:

$$\hat{p}_{y,h}(x) = \frac{1}{\ell_y V(h)} \sum_{i: y_i=y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right),$$

Метод парзеновского окна (Parzen window):

$$a(x; X^\ell, h) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y \frac{P_y}{\ell_y} \sum_{i: y_i=y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right).$$

Остаются вопросы:

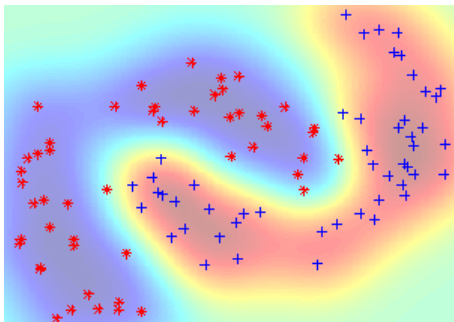
- 1) на что влияет ядро $K(r)$ и как его выбрать?
- 2) на что влияет ширина окна h и как её выбрать?
- 3) откуда взять функцию расстояния $\rho(x, x')$?

Пример. Визуализация парзеновского классификатора

Метод парзеновского окна (Parzen window):

$$a(x; X^\ell, h) = \arg \max_{y \in Y} \Gamma_y(x), \quad \Gamma_y(x) = \lambda_y \frac{P_y}{\ell_y} \sum_{i: y_i=y} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

Цветом передаётся значение разности $\Gamma_+(x) - \Gamma_*(x)$:



Выбор метрики (функция расстояния)

Один из возможных вариантов

— взвешенная метрика Минковского:

$$\rho(x, x') = \left(\sum_{j=1}^n w_j |f_j(x) - f_j(x')|^p \right)^{\frac{1}{p}},$$

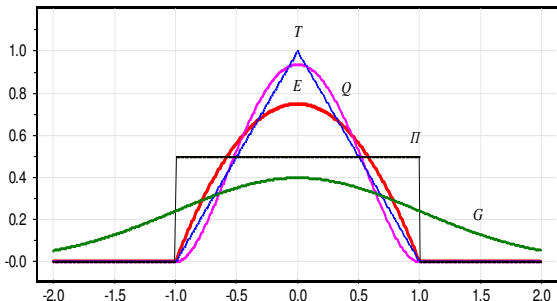
где w_j — неотрицательные веса признаков, $p > 0$.

В частности, если $w_j \equiv 1$ и $p = 2$, то имеем евклидову метрику.

Роль весов w_j :

- 1) нормировка признаков;
- 2) степень важности признаков;
- 3) отбор признаков (какие $w_j = 0$?)

Часто используемые ядра



$E(r) = \frac{3}{4}(1 - r^2) [|r| \leq 1]$ — оптимальное (Епанечникова);

$Q(r) = \frac{15}{16}(1 - r^2)^2 [|r| \leq 1]$ — кватрическое;

$T(r) = (1 - |r|) [|r| \leq 1]$ — треугольное;

$G(r) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}r^2)$ — гауссовское;

$\Pi(r) = \frac{1}{2} [|r| \leq 1]$ — прямоугольное.

Выбор ядра почти не влияет на качество восстановления

Функционал качества восстановления плотности:

$$J(K) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\hat{p}_h(x) - p(x))^2 dx.$$

ядро $K(r)$	степень гладкости	$J(K^*)/J(K)$
Епанечникова $K^*(r)$	\hat{p}'_h разрывна	1.000
Квартическое	\hat{p}''_h разрывна	0.995
Треугольное	\hat{p}'_h разрывна	0.989
Гауссовское	∞ дифференцируема	0.961
Прямоугольное	\hat{p}_h разрывна	0.943

Замечание: в таблице представлены асимптотические значения отношения $J(K^*)/J(K)$ при $m \rightarrow \infty$, причём это отношение не зависит от $p(x)$.

Выбор ширины окна

Скользящий контроль *Leave One Out*:

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

Типичный вид зависимости LOO от h :



Окна переменной ширины

Проблема:

при наличии локальных сгущений любая h не оптимальна.

Идея:

задавать не ширину окна h , а число соседей k .

$$h(x) = \rho(x, x^{(k+1)}),$$

где $x^{(i)}$ — i -й сосед объекта x при ранжировании выборки X^ℓ :

$$\rho(x, x^{(1)}) \leq \dots \leq \rho(x, x^{(\ell)})$$

Замечание 1:

нормировка $V(k)$ не должна зависеть от y , поэтому выборка ранжируется целиком, а не по классам X_y .

Замечание 2:

Оптимизация k по LOO аналогична оптимизации h .

Резюме в конце лекции

- $a(x) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y P_y p_y(x)$ — эту формулу надо помнить.
- Наивный байесовский классификатор основан на «драконовском» предположении о независимости признаков. Как ни странно, иногда это работает.
- Три основных подхода к восстановлению функций правдоподобия $p_y(x)$ по выборке: параметрический, непараметрический и смесь распределений.
- Непараметрический подход наиболее прост и приводит к методу парзеновского окна.
- Проблемы непараметрического подхода:
 - выбор ширины окна h или числа соседей k ;
 - выбор сглаживающего ядра K ;
 - выбор метрики.

Принцип максимума правдоподобия

Пусть известна параметрическая модель плотности

$$p(x) = \varphi(x; \theta),$$

где θ — параметр, φ — фиксированная функция.

Задача — найти оптимальное θ по простой выборке X^m .

Принцип максимума (взвешенного) правдоподобия:

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

где $G^m = (g_1, \dots, g_m)$ — вектор весов объектов.

Необходимое условие оптимума:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} L(\theta; X^m, G^m) = \sum_{i=1}^m g_i \frac{\partial}{\partial \theta} \ln \varphi(x_i; \theta) = 0,$$

где функция $\varphi(x; \theta)$ достаточно гладкая по параметру θ .

Многомерное нормальное распределение

Пусть $X = \mathbb{R}^n$ — объекты описываются n числовыми признаками.

Гипотеза: классы имеют n -мерные гауссовские плотности:

$$p_y(x) = \mathcal{N}(x; \mu_y, \Sigma_y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^T \Sigma_y^{-1}(x-\mu_y)}}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma_y}}, \quad y \in Y,$$

где $\mu_y \in \mathbb{R}^n$ — вектор матожидания (центр) класса $y \in Y$,

$\Sigma_y \in \mathbb{R}^{n \times n}$ — ковариационная матрица класса $y \in Y$

(симметричная, невырожденная, положительно определённая).

Теорема

1. Разделяющая поверхность $\{x \in X \mid \lambda_y P_y p_y(x) = \lambda_s P_s p_s(x)\}$ квадратична для всех $y, s \in Y$, $y \neq s$.
2. Если $\Sigma_y = \Sigma_s$, то она вырождается в линейную.

Квадратичный дискриминант

Теорема

Оценки максимума взвешенного правдоподобия, $y \in Y$:

$$\hat{\mu}_y = \frac{1}{G_y} \sum_{i: y_i=y} g_i x_i;$$

$$\hat{\Sigma}_y = \frac{1}{G_y} \sum_{i: y_i=y} g_i (x_i - \hat{\mu}_y)(x_i - \hat{\mu}_y)^T;$$

где $G_y = \sum_{i: y_i=y} g_i$.

Квадратичный дискриминант — подстановочный алгоритм:

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

Линейный дискриминант Фишера

Допущение:

ковариационные матрицы классов равны: $\Sigma_y = \Sigma$, $y \in Y$.

Оценка максимума правдоподобия для Σ :

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{G} \sum_{i=1}^{\ell} g_i (x_i - \hat{\mu}_{y_i})(x_i - \hat{\mu}_{y_i})^T, \quad G = \sum_{i=1}^{\ell} g_i$$

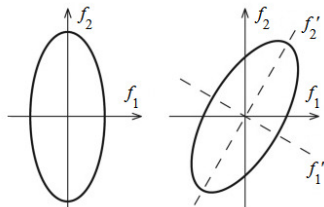
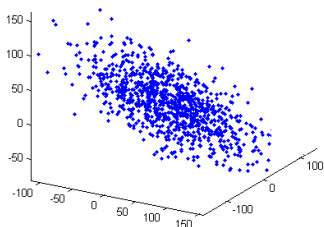
Линейный дискриминант — подстановочный алгоритм:

$$\begin{aligned} a(x) &= \arg \max_{y \in Y} \lambda_y \hat{P}_y \hat{p}_y(x) = \\ &= \arg \max_{y \in Y} \underbrace{(\ln(\lambda_y \hat{P}_y) - \frac{1}{2} \hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y)}_{\beta_y} + x^T \underbrace{\hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y}_{\alpha_y}; \end{aligned}$$

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

Геометрический смысл предположения о нормальности классов

Каждый класс — облако точек эллиптической формы:



Если $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$: оси эллипсоида параллельны ортам

В общем случае: $\Sigma = VSV^T$ — спектральное разложение,

$V = (v_1, \dots, v_n)$ — ортогональные собственные векторы Σ ,

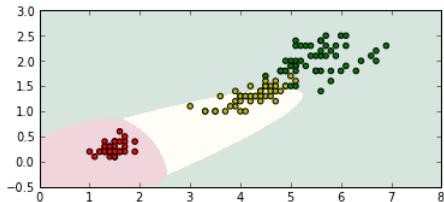
$S = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ — собственные значения

$$(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) = (x - \mu)^T V S^{-1} V^T (x - \mu) = (x' - \mu')^T S^{-1} (x' - \mu').$$

$x' = V^T x$ — декоррелирующее ортогональное преобразование

Геометрический смысл квадратичного дискриминанта

Пример. Ирисы Фишера: три класса по 50 объектов, разделяющие поверхности — квадратичные

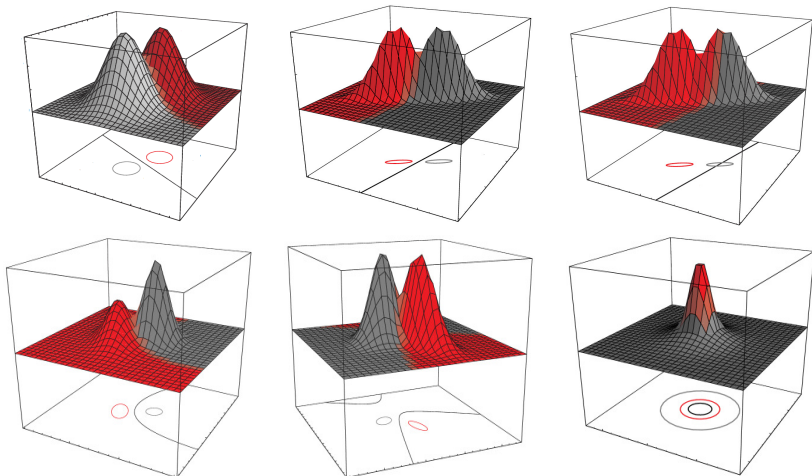


Если $\Sigma_s = \Sigma_t$, то разделяющая поверхность линейная:

$$(x - \mu_{st})^T \Sigma^{-1} (\mu_s - \mu_t) = \ln(\lambda_t P_t / \lambda_s P_s),$$

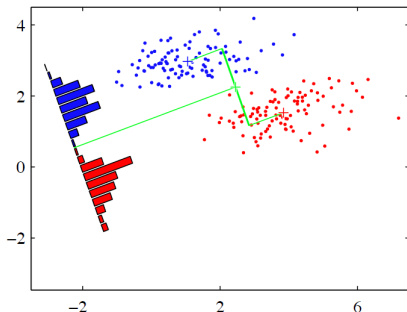
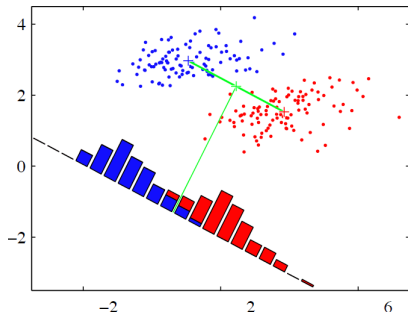
где $\mu_{st} = \frac{1}{2}(\mu_s + \mu_t)$ — середина между центрами классов.

Геометрический смысл квадратичного дискриминанта



Геометрический смысл линейного дискриминанта

В одномерной проекции на направляющий вектор разделяющей гиперплоскости классы разделяются наиболее чётко, то есть вероятность ошибки минимальна.



Квадратичный дискриминант

Недостатки квадратичного дискриминанта:

- Если $\ell_y < n$, то матрица $\hat{\Sigma}_y$ вырождена.
- Чем меньше ℓ_y , тем менее устойчива оценка $\hat{\Sigma}_y$.
- Оценки $\hat{\mu}_y$, $\hat{\Sigma}_y$ неустойчивы к выбросам.
- Если классы не нормальны, всё совсем плохо...

Линейный дискриминант:

- более устойчив,
- но хуже описывает классы различной формы.

Далее — меры по улучшению алгоритма:

- Регуляризация ковариационной матрицы
- Цензурирование выборки (отсев шума)
- Смеси нормальных распределений

Проблема мультиколлинеарности

Проявления мультиколлинеарности:

- матрица $\hat{\Sigma}$ (или $\hat{\Sigma}_y$) близка к вырожденной;
- есть (приближённые) линейные зависимости признаков;
- есть собственные значения $\hat{\Sigma}$, близкие к нулю;
- число обусловленности $\mu(\hat{\Sigma}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \gg 1$.

Последствия мультиколлинеарности:

- обратная матрица $\hat{\Sigma}^{-1}$ неустойчива;
- относительные погрешности растут:
если $v = \hat{\Sigma}^{-1}u$, то $\frac{\|\delta v\|}{\|v\|} \leq \mu(\hat{\Sigma}) \frac{\|\delta u\|}{\|u\|}$;
- векторы нормалей $\alpha_y = \hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y$ неустойчивы;
- переобучение: на X^ℓ всё хорошо, на X^k всё плохо.

Пути повышения качества классификации

- Улучшение обусловленности ковариационной матрицы:
 - регуляризация
 - обнуление недиагональных элементов
 - наивный байесовский классификатор
- Понижение размерности:
 - отбор признаков (features selection)
 - преобразование n признаков в $n' < n$ признаков (PCA)
 - редукция размерности по А.М.Шурыгину (частный случай отбора признаков)
- Цензурирование выборки (отсев шума)
- Усложнение модели (смесь нормальных распределений)

Регуляризация ковариационной матрицы

Идея:

преобразовать матрицу $\hat{\Sigma}$ так, чтобы все собственные векторы v остались, а все собственные значения λ увеличились на τ :

$$(\hat{\Sigma} + \tau I_n)v = \lambda v + \tau v = (\lambda + \tau)v.$$

Рецепт:

- 1) обращение $\hat{\Sigma} + \tau I_n$ вместо $\hat{\Sigma}$;
- 2) выбор параметра регуляризации τ по скользящему контролю.

Обнуление элементов ковариационной матрицы

$$\hat{\Sigma} = \|\sigma_{ij}\|_{n \times n}$$

Идея: обнулить статистически незначимые ковариации σ_{ij} .

Воплощение:

Для всех $i, j = 1, \dots, n$, $i < j$

1) вычисляется коэффициент корреляции $r_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}$;

2) статистика $T_{ij} = \frac{r_{ij}\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r_{ij}^2}}$ имеет

t -распределение Стьюдента с $n - 2$ степенями свободы;

3) если $|T_{ij}| \leq t_{1-\frac{\alpha}{2}}$ — квантиль распределения Стьюдента при заданном уровне значимости α , то полагается $\sigma_{ij} := \sigma_{ji} := 0$.

Диагонализация ковариационной матрицы

Идея: пусть признаки некоррелированы: $\sigma_{ij} = 0$, $i \neq j$.

Замечание: для нормального распределения
некоррелированность \iff независимость

Получаем наивный байесовский классификатор:

$$\hat{p}_{yj}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}_{yj}} \exp\left(-\frac{(\xi - \hat{\mu}_{yj})^2}{2\hat{\sigma}_{yj}^2}\right), \quad y \in Y, \quad j = 1, \dots, n;$$
$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y \hat{P}_y + \sum_{j=1}^n \ln \hat{p}_{yj}(\xi_j) \right), \quad x \equiv (\xi_1, \dots, \xi_n);$$

где $\hat{\mu}_{yj}$ и $\hat{\sigma}_{yj}$ — оценки среднего и дисперсии j -го признака, вычисленные по X_y — подвыборке класса y .

Редукция размерности по А. М. Шурыгину

Идея:

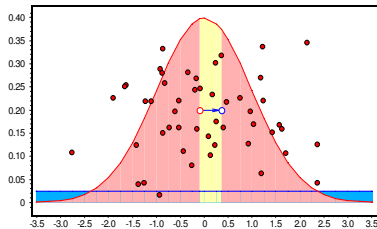
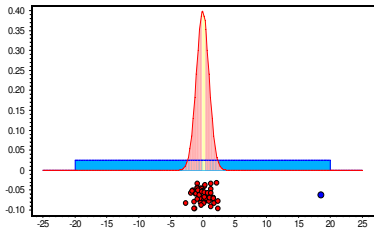
сведение n -мерной задачи к серии двумерных задач путём подключения признаков по одному.

Набросок алгоритма:

- 1) найти два признака, в подпространстве которых классы наилучшим образом разделимы;
- 2) новый признак: $\psi(x) = x^T \alpha_y$ — проекция на нормаль к разделяющей прямой в пространстве двух признаков;
- 3) выбрать из оставшихся признаков тот, который в паре с $\psi(x)$ даёт наилучшую разделимость;
- 4) если разделимость не улучшилась, прекратить;
- 5) иначе GOTO 2);

Проблема выбросов (outliers)

Эмпирическое среднее является оценкой матожидания, неустойчивой к редким большим выбросам.



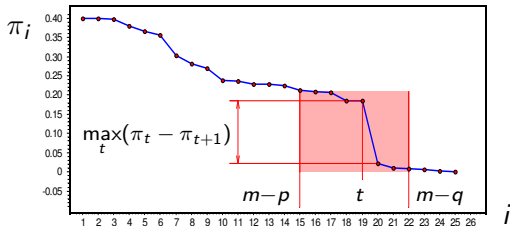
Пример. Одномерная нормальная плотность $\mathcal{N}(0, 1)$, загрязнённая равномерным на $[-20, +20]$ распределением, $\ell = 50$, смещение эмпирического среднего 0.359.

Цензурирование выборки (отсев выбросов)

Идея: задача решается дважды; после первого раза объекты с наибольшими ошибками исключаются из обучения.

Алгоритм (для задачи восстановления плотности)

- 1) оценить параметр $\hat{\theta}$ по всей выборке X^m ;
- 2) вычислить правдоподобия $\pi_i = \varphi(x_i; \hat{\theta})$ для всех $x_i \in X^m$;
- 3) отсортировать выборку по убыванию: $\pi_1 \geq \dots \geq \pi_m$;
- 4) удалить из X^m объекты, попавшие в конец ряда;
- 5) оценить параметр $\hat{\theta}$ по укороченной выборке X^m ;



Резюме в конце лекции

- Параметрический подход = модель плотности распределения + принцип максимума правдоподобия.
- Модель гауссовских плотностей приводит к квадратичному или линейному дискриминанту.
- Их основная проблема — неустойчивость обращения ковариационной матрицы. Некоторые решения:
 - регуляризация
 - диагонализация
 - обнуление незначимых ковариаций
 - жадное добавление признаков (метод Шурыгина)
 - отбор признаков (далее...)
 - преобразование признаков (далее...)

Модель смеси распределений

Модель плотности:

$$p(x) = \sum_{j=1}^k w_j p_j(x), \quad \sum_{j=1}^k w_j = 1, \quad w_j \geq 0,$$

$p_j(x) = \varphi(x; \theta_j)$ — функция правдоподобия j -й компоненты смеси;
 w_j — её априорная вероятность; k — число компонент смеси.

Задача 1: имея простую выборку $X^m \sim p(x)$,
зная число k и функцию φ , оценить вектор параметров
 $\Theta = (w_1, \dots, w_k, \theta_1, \dots, \theta_k)$.

Задача 2: оценить ещё и k .

Общая схема EM-алгоритма

Проблема:

попытка применить принцип максимума правдоподобия «в лоб» приводит к очень сложной многоэкстремальной задаче оптимизации

Идея: вводятся скрытые переменные G .

Итерационный алгоритм Expectation–Maximization:

- 1: начальное приближение вектора параметров Θ ;
- 2: **повторять**
- 3: $G := E\text{-шаг}(\Theta)$;
- 4: $\Theta := M\text{-шаг}(\Theta, G)$;
- 5: **пока** Θ и G не стабилизируются.

Задача E-шага

По формуле условной вероятности

$$p(x, \theta_j) = p(x) P(\theta_j | x) = w_j p_j(x).$$

Скрытые переменные $G = (g_{ij})_{m \times k} = (g_1, \dots, g_j)$:

$$g_{ij} \equiv P(\theta_j | x_i), \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, k.$$

Зная параметры компонент w_j, θ_j , по формуле Байеса легко вычислить g_{ij} , $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, k$:

$$g_{ij} = \frac{w_j p_j(x_i)}{p(x_i)} = \frac{w_j p_j(x_i)}{\sum_{s=1}^k w_s p_s(x_i)}.$$

Очевидно, выполнено условие нормировки: $\sum_{j=1}^k g_{ij} = 1$.

Задача M-шага

Задача: максимизировать логарифм правдоподобия

$$Q(\Theta) = \ln \prod_{i=1}^m p(x_i) = \sum_{i=1}^m \ln \sum_{j=1}^k w_j p_j(x_i) \rightarrow \max_{\Theta}.$$

при ограничениях $\sum_{j=1}^k w_j = 1$; $w_j \geq 0$.

Если скрытые переменные известны, то задача максимизации $Q(\Theta)$ распадается на k независимых подзадач:

$$\theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m g_{ij} \ln \varphi(x_i; \theta), \quad j = 1, \dots, k.$$

а оптимальные веса компонент вычисляются аналитически:

$$w_j := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_{ij}, \quad j = 1, \dots, k.$$

Вывод формул M-шага (основные шаги)

Лагранжиан оптимизационной задачи « $Q(\Theta) \rightarrow \max$ »:

$$L(\Theta; X^m) = \sum_{i=1}^m \ln \left(\underbrace{\sum_{j=1}^k w_j p_j(x_i)}_{p(x_i)} \right) - \lambda \left(\sum_{j=1}^k w_j - 1 \right).$$

Приравниваем нулю производные:

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = m; \quad w_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \underbrace{\frac{w_j p_j(x_i)}{p(x_i)}}_{g_{ij}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_{ij},$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_j} = \sum_{i=1}^m \underbrace{\frac{w_j p_j(x_i)}{p(x_i)}}_{g_{ij}} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \ln p_j(x_i) = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sum_{i=1}^m g_{ij} \ln p_j(x_i) = 0.$$

EM-алгоритм

Вход:

выборка $X^m = \{x_1, \dots, x_m\}$;

k — число компонент смеси;

$\Theta = (w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ — начальное приближение параметров;

δ — параметр критерия останова;

Выход:

$\Theta = (w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ — оптимизированный вектор параметров

для смеси $p(x) = \sum_{j=1}^k w_j \varphi(x, \theta_j)$, $\sum_{j=1}^k w_j = 1$.

Базовый вариант EM-алгоритма

1: **ПРОЦЕДУРА** EM (X^m, k, Θ, δ);

2: **повторять**

3: E-шаг (expectation):

для всех $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, k$

$$g_{ij}^0 := g_{ij}; \quad g_{ij} := \frac{w_j \varphi(x_i; \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i; \theta_s)};$$

4: M-шаг (maximization):

для всех $j = 1, \dots, k$

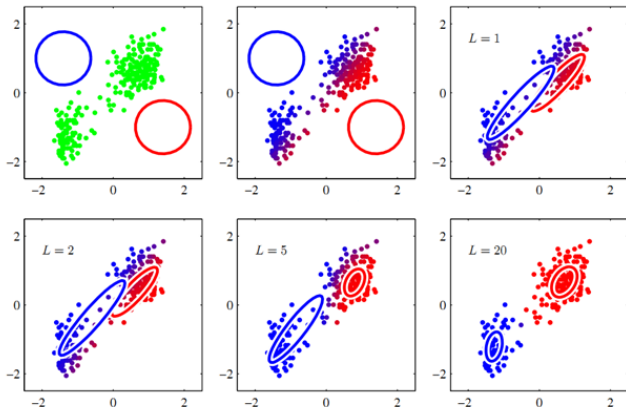
$$\theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m g_{ij} \ln \varphi(x_i; \theta); \quad w_j := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_{ij};$$

5: **пока** $\max_{i,j} |g_{ij} - g_{ij}^0| > \delta$;

6: **вернуть** $(w_j, \theta_j)_{j=1}^k$;

Пример

Две гауссовские компоненты $k = 2$ в пространстве $X = \mathbb{R}^2$.
Расположение компонент в зависимости от номера итерации L :



Проблемы базового варианта EM-алгоритма

- Как выбирать начальное приближение?
- Как определять число компонент?
- Как ускорить сходимость?

Решение сразу многих проблем:

EM-алгоритм с последовательным добавлением компонент

EM-алгоритм с последовательным добавлением компонент

Вход:

выборка $X^m = \{x_1, \dots, x_m\}$;

R — допустимый разброс правдоподобия объектов;

m_0 — минимальная длина выборки, по которой можно
восстанавливать плотность;

δ — параметр критерия останова;

Выход:

k — число компонент смеси;

$\Theta = (w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ — веса и параметры компонент;

EM-алгоритм с последовательным добавлением компонент

- 1: начальное приближение — одна компонента:

$$\theta_1 := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m \ln \varphi(x_i; \theta); \quad w_1 := 1; \quad k := 1;$$

- 2: **для всех** $k := 2, 3, \dots$

- 3: выделить объекты с низким правдоподобием:

$$U := \left\{ x_i \in X^m \mid p(x_i) < \frac{1}{R} \max_j p(x_j) \right\};$$

- 4: **если** $|U| < m_0$ **то**

- 5: **выход** из цикла по k ;

- 6: начальное приближение для k -й компоненты:

$$\theta_k := \arg \max_{\theta} \sum_{x_i \in U} \ln \varphi(x_i; \theta); \quad w_k := \frac{1}{m} |U|;$$

$$w_j := w_j (1 - w_k), \quad j = 1, \dots, k - 1;$$

- 7: выполнить EM (X^m, k, Θ, δ) ;

GEM — обобщённый EM-алгоритм

Идея:

Не обязательно добиваться высокой точности на M-шаге.
Достаточно лишь сместиться в направлении максимума,
сделав одну или несколько итераций, и затем выполнить E-шаг.

Преимущество:

уменьшение времени работы при сопоставимом качестве решения.

SEM — стохастический EM-алгоритм

Идея: на M-шаге вместо максимизации

$$\theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m g_{ij} \ln \varphi(x_i; \theta)$$

максимизируется обычное, невзвешенное, правдоподобие

$$\theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{x_i \in X_j} \ln \varphi(x_i; \theta),$$

выборки X_j строятся путём стохастического моделирования:
для каждого $i = 1, \dots, m$ генерируется $j \sim P(\theta_j | x_i) \equiv g_{ij}$
и объект x_i помещается в X_j .

Преимущества:

ускорение сходимости, предотвращение зацикливаний.

HEM — иерархический EM-алгоритм

Идея:

«Плохо описанные» компоненты расщепляются на две или более *дочерних* компонент.

Преимущество:

автоматически выявляется иерархическая структура каждого класса, которую затем можно интерпретировать содержательно.

Гауссовская смесь с диагональными матрицами ковариации

Допущения:

1. Функции правдоподобия классов $p_y(x)$ представимы в виде смесей k_y компонент, $y \in Y = \{1, \dots, M\}$.
2. Компоненты имеют n -мерные гауссовские плотности с некоррелированными признаками:

$$\mu_{yj} = (\mu_{yj1}, \dots, \mu_{yjn}), \quad \Sigma_{yj} = \text{diag}(\sigma_{yj1}^2, \dots, \sigma_{yjn}^2), \quad j = 1, \dots, k_y:$$

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

Эмпирические оценки средних и дисперсий

Числовые признаки: $f_d: X \rightarrow \mathbb{R}$, $d = 1, \dots, n$.

Решение задачи M-шага:

для всех классов $y \in Y$ и всех компонент $j = 1, \dots, k_y$,

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

для всех размерностей (признаков) $d = 1, \dots, n$

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

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

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

Алгоритм классификации

Подставим гауссовскую смесь в байесовский классификатор:

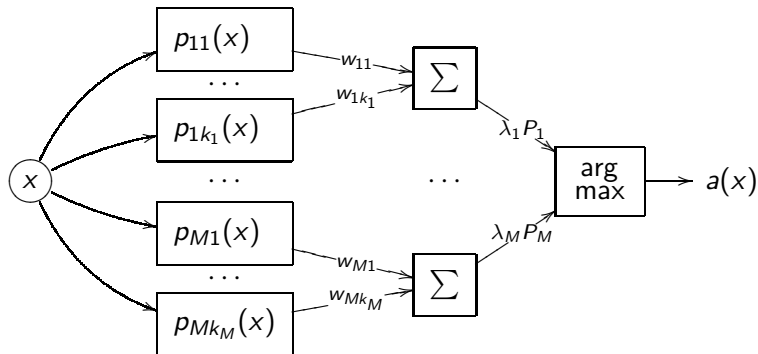
$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y P_y \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} \underbrace{\mathcal{N}_{yj} \exp\left(-\frac{1}{2} \rho_{yj}^2(x, \mu_{yj})\right)}_{\rho_{yj}(x)},$$

$\mathcal{N}_{yj} = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\sigma_{yj1} \cdots \sigma_{yjn})^{-1}$ — нормировочные множители;
 $\rho_{yj}(x, \mu_{yj})$ — взвешенная евклидова метрика в $X = \mathbb{R}^n$:

$$\rho_{yj}^2(x, \mu_{yj}) = \sum_{d=1}^n \frac{1}{\sigma_{yjd}^2} (f_d(x) - \mu_{yjd})^2.$$

Сеть радиальных базисных функций

Radial Basis Functions (RBF) — трёхуровневая суперпозиция:



Преимущества EM-RBF

EM — один из лучших алгоритмов обучения радиальных сетей.

Преимущества EM-алгоритма (перед SVM, ANN):

- 1 EM-алгоритм легко сделать устойчивым к шуму
- 2 EM-алгоритм довольно быстро сходится
- 3 автоматически строится *структурное описание* каждого класса в виде совокупности компонент — *кластеров*

Недостатки EM-алгоритма:

- 1 EM-алгоритм чувствителен к начальному приближению
- 2 Определение числа компонент — трудная задача (простые эвристики могут плохо работать)

Резюме в конце лекции

- Восстановление смеси — наиболее мощный подход к оцениванию плотности распределения по выборке.
- EM алгоритм сводит сложную многоэкстремальную задачу к серии стандартных подзадач максимизации правдоподобия для отдельных компонент смеси.
- EM алгоритм — очень мощная штука. Он применяется не только для восстановления смесей.
- У него есть масса обобщений: GEM, SEM, NEM, ...
- Предполагая, что компоненты смеси — гауссовские с диагональными матрицами ковариации, получили метод обучения радиальных базисных функций

Общее резюме по байесовским классификаторам

- Эту формулу надо помнить: $a(x) = \arg \max_{y \in Y} \lambda_y P_y p_y(x)$.
- Три основных подхода к восстановлению функций правдоподобия $p_y(x)$ по выборке: параметрический, непараметрический и смесь распределений.
- Наивный байесовский классификатор основан на «драконовском» предположении о независимости признаков. Как ни странно, иногда это работает.
- Непараметрический подход наиболее прост, но возникает проблема выбора метрики.
- Параметрический подход требует задания вида распределения. Для примера мы ограничились гауссовскими.
- Восстановление смеси — наиболее гибкий подход. В случае гауссовских распределений он приводит к сильному методу — RBF (радиальных базисных функций).