Курс «Введение в машинное обучение»

Вероятностные модели машинного обучения

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

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

МФТИ.ФПМИ.ИС.ИАД • 27 марта 2025

Содержание

Задача оценивания плотности — обучение без учителя

Дано: простая (i.i.d.) выборка $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\} \sim p(x)$

Найти параметрическую модель плотности распределения:

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

где w — вектор параметров, φ — фиксированная функция

Критерий — максимум (логарифма) правдоподобия выборки, MLE-оценивание параметра w (Maximum Likelihood Estimate):

$$L(w; X^\ell) = \ln \prod_{i=1}^{\ell} \varphi(x_i; w) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln \varphi(x_i; w) \to \max_w$$

Аналитическое решение: необходимое условие экстремума

$$\frac{\partial}{\partial w} L(w; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{\partial}{\partial w} \ln \varphi(x_i; w) = 0,$$

при условии достаточной гладкости функции $\varphi(x; w)$ по w

Частный случай: многомерная гауссовская плотность

Пусть объекты x описываются n признаками $f_j(x) \in \mathbb{R}$ и выборка порождена n-мерной гауссовской плотностью:

$$x_i \sim p(x) = \mathcal{N}(x; \mu, \Sigma) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^\top \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}}, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

$\mu \in \mathbb{R}^n$ — вектор математического ожидания, $\mu = \mathsf{E}x$

$\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}$ — ковариационная матрица, $\Sigma = \mathsf{E}(x-\mu)(x-\mu)^\top$ (симметричная, невырожденная, положительно определённая)

Выборочные оценки максимального правдоподобия:

$$\frac{\partial}{\partial\mu} \ln L(\mu, \Sigma; X^\ell) = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{\mu} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} x_i$$

$$\frac{\partial}{\partial\Sigma} \ln L(\mu, \Sigma; X^\ell) = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} (x_i - \hat{\mu})(x_i - \hat{\mu})^\top$$

Оценка дискретного распределения

Дано: выборка $x_i \in X$, $|X| < \infty$, порождаемая i.i.d. дискретным распределением $(p_x \colon x \in X)$, $\sum_x p_x = 1$, $p_x \geqslant 0$

Найти: параметры распределения $(p_x \colon x \in X)$

Критерий: максимум (логарифма) правдоподобия выборки

$$\ln \prod_{i=1}^{\ell} p_{x_i} = \sum_{x \in X} \underbrace{\textstyle\sum_{i=1}^{\ell}[x_i = x]}_{\ell_x} \ln p_x = \sum_{x \in X} \ell_x \ln p_x \to \max_{(p_x)}$$

Выборочная оценка максимального правдоподобия

$\hat{p}_x = \frac{\ell_x}{\ell}$ — частотные оценки вероятностей $p_x = P(x_i = x)$, оценка минимума кросс-энтропии, эмпирическая гистограмма

Доказательство из условий ККТ: $\frac{\partial}{\partial p_x}\Bigl(\sum\limits_{x \in X} \ell_x \ln p_x + \mu\Bigl(1 - \sum\limits_{x \in X} p_x\Bigr)\Bigr) = 0$

Задача разделения смеси распределений

Дано: выборка $\{x_1, \dots, x_\ell\}$, порождаемая i.i.d. из $p(x)$

Найти: модель вероятностной смеси k распределений:

$$p(x) = \sum_{j=1}^{k} w_j \varphi(x, \theta_j), \qquad \sum_{j=1}^{k} w_j = 1, \qquad w_j \geqslant 0,$$

описывающую двухуровневый процесс порождения данных:

1. $j \sim P(j) \equiv w_j$ — дискретное *априорное распределение*
2. $x \sim p(x|j) \equiv \varphi(x, \theta_j)$ — плотность j-й компоненты

Критерий максимума log-правдоподобия:

$$\begin{cases} \ln \prod_{i=1}^{\ell} p(x_i) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln \sum_{j=1}^{k} w_j \varphi(x_i, \theta_j) \to \max\limits_{w,\theta} \\ \sum_{j=1}^{k} w_j = 1, \quad w_j \geqslant 0 \end{cases}$$

EM-алгоритм для разделения смеси распределений

Теорема (необходимые условия экстремума)

Точка $(w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ локального экстремума $L(w, \theta)$ удовлетворяет системе уравнений относительно параметров модели w_j, θ_j и вспомогательных переменных g_{ij}:

$$\text{Е-шаг:}\quad g_{ij} = \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i, \theta_s)}, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad j = 1, \dots, k;$$

$$\text{М-шаг:}\quad \theta_j = \arg\max_\theta \sum_{i=1}^{\ell} g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta), \quad j = 1, \dots, k;$$

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

EM-алгоритм — метод простых итераций для решения системы

Вероятностная интерпретация шагов EM-алгоритма

E-шаг — это формула Байеса:

$$g_{ij} = \mathsf{P}(j|x_i) = \frac{P(j)p(x_i|j)}{p(x_i)} = \frac{w_j\varphi(x_i,\theta_j)}{p(x_i)} = \frac{w_j\varphi(x_i,\theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s\varphi(x_i,\theta_s)}$$

Нормировка условных вероятностей: $\sum\limits_{j=1}^{k} g_{ij} = 1$

M-шаг — это максимизация взвешенного log-правдоподобия, с весами объектов g_{ij} для j-й компоненты смеси:

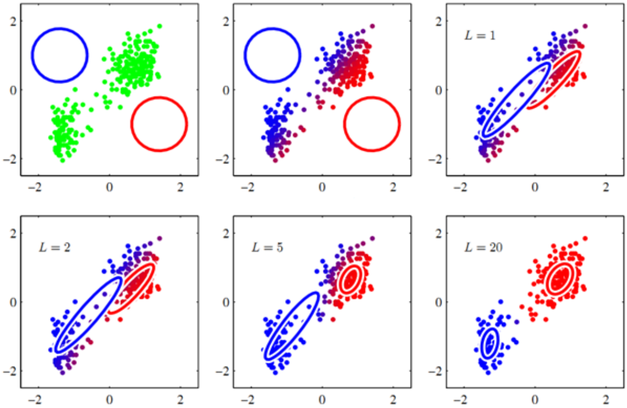
$$\theta_j = \arg\max_{\theta} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ij} \ln \varphi(x_i,\theta),$$

вес компоненты определяется как средний вес её объектов:

$$w_j = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} g_{ij}$$

Пример: разделение гауссовской смеси

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



Вероятностная постановка задачи регрессии

Дано: выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$, $x_i \in \mathbb{R}^n$, $y_i \in \mathbb{R}$

Найти: параметр w модели регрессии с гауссовским шумом:

$$y_i = a(x_i, w) + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_i^2), \quad i = 1, \dots, \ell.$$

Эквивалентная запись: $y_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$, $\mu_i = \mathsf{E} y_i = a(x_i, w)$.

Критерий максимума правдоподобия эквивалентен МНК:

$$p(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_\ell | w) = \prod_{i=1}^{\ell} \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_i^2} \varepsilon_i^2\right) \to \max_w$$

$$-\ln p(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_\ell | w) = \mathrm{const} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{1}{\sigma_i^2} \bigl(a(x_i, w) - y_i\bigr)^2 \to \min_w$$

Что использовать вместо метода наименьших квадратов, если y_i не гауссовские, в частности, если y_i дискретнозначные?

Обобщённая линейная модель (Generalized Linear Model, GLM)

Нормальная линейная модель для математического ожидания:

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2), \qquad \mu_i = \langle x_i, w \rangle = \mathsf{E} y_i$$

Обобщённая линейная модель для математического ожидания:

$$y_i \sim \mathrm{Exp}(\theta_i, \varphi_i), \qquad \theta_i = \langle x_i, w \rangle = g(\mathsf{E} y_i)$$

Exp — *экспоненциальное семейство распределений* с параметрами θ_i, φ_i и параметрами-функциями $c(\theta)$, $h(y, \varphi)$:

$$p(y_i | \theta_i, \varphi_i) = \exp\left(\frac{y_i \theta_i - c(\theta_i)}{\varphi_i} + h(y_i, \varphi_i) \right)$$

Математическое ожидание и дисперсия с.в. $y_i \sim \mathrm{Exp}(\theta_i, \varphi_i)$:

$$\mu_i = \mathsf{E} y_i = c'(\theta_i) \quad \Rightarrow \quad \theta_i = [c']^{-1}(\mu_i) = g(\mathsf{E} y_i)$$
$$\mathsf{D} y_i = \varphi_i c''(\theta_i)$$

$g(\mu) = [c']^{-1}(\mu)$ — монотонная *функция связи* (link function)

Примеры распределений из экспоненциального семейства

Нормальное (гауссовское) распределение, $y_i \in \mathbb{R}$:

$$p(y_i|\mu_i, \sigma_i^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_i^2}(y_i - \mu_i)^2\right) =$$

$$= \exp\left(\frac{y_i\mu_i - \frac{1}{2}\mu_i^2}{\sigma_i^2} - \frac{y_i^2}{2\sigma_i^2} - \frac{1}{2}\ln(2\pi\sigma_i^2)\right);$$

$$\theta_i = g(\mu_i) = \mu_i, \qquad c(\theta_i) = \tfrac{1}{2}\mu_i^2 = \tfrac{1}{2}\theta_i^2, \qquad \varphi_i = \sigma_i^2.$$

Распределение Бернулли, $y_i \in \{0, 1\}$:

$$p(y_i|\mu_i) = \mu_i^{y_i}(1 - \mu_i)^{1-y_i} = \exp\left(y_i \ln \tfrac{\mu_i}{1-\mu_i} + \ln(1 - \mu_i)\right);$$

$$\theta_i = g(\mu_i) = \ln \tfrac{\mu_i}{1-\mu_i}, \qquad c(\theta_i) = -\ln(1 - \mu_i) = \ln(1 + e^{\theta_i}).$$

Примеры распределений из экспоненциального семейства

Биномиальное распределение, $y_i \in \{0, 1, \dots, n_i\}$:

$$p(y_i|\mu_i, n_i) = C_{n_i}^{y_i} \bigl(\tfrac{\mu_i}{n_i}\bigr)^{y_i} \bigl(1 - \tfrac{\mu_i}{n_i}\bigr)^{n_i - y_i} =$$

$$= \exp\Bigl(y_i \ln \tfrac{\mu_i}{n_i - \mu_i} + n_i \ln(n_i - \mu_i) + \ln C_{n_i}^{y_i} - n_i \ln n_i\Bigr);$$

$$\theta_i = g(\mu_i) = \ln \tfrac{\mu_i}{n_i - \mu_i}, \qquad c(\theta_i) = -n_i \ln(n_i - \mu_i) = n_i \ln \tfrac{1 + e^{\theta_i}}{n_i}.$$

Пуассоновское распределение, $y_i \in \{0, 1, 2, \dots\}$:

$$p(y_i|\mu_i) = \frac{e^{-\mu_i} \mu_i^{y_i}}{y_i!} = \exp\left(\frac{y_i \ln(\mu_i) - \mu_i}{1} - \ln y_i!\right);$$

$$\theta_i = g(\mu_i) = \ln(\mu_i), \qquad c(\theta_i) = \mu_i = e^{\theta_i}, \qquad \varphi_i = 1.$$

Примеры распределений из экспоненциального семейства

- нормальное (гауссовское)
- распределение Пуассона
- биномиальное и мультиномиальное
- геометрическое
- χ^2-распределение
- бета-распределение
- гамма-распределение
- распределение Дирихле
- распределение Лапласа с фиксированным матожиданием

Контр-примеры не экспоненциальных распределений:

- t-распределение Стьюдента, Коши, гипергеометрическое

Двухклассовая логистическая регрессия

Распределение Бернулли, $y_i \in \{0,1\}$: $p(y_i|\mu_i) = \mu_i^{y_i}(1-\mu_i)^{1-y_i}$

$\theta_i = g(\mu_i) = \ln\frac{\mu_i}{1-\mu_i}$ $\quad$ $\mathsf{E}y_i = \mu_i = g^{-1}(\theta_i) = \frac{1}{1+\exp(-\theta_i)} \equiv \sigma(\theta_i)$

Дано: выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$, $x_i \in \mathbb{R}^n$, $y_i \in \{0,1\} \sim p(y_i|\mu_i)$

Найти: линейную модель $g(\mathsf{E}y_i) = \langle x_i, w\rangle$

Критерий: максимум log-правдоподобия (log-loss)

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln p(y_i|\mu_i, x_i) = \sum_{i=1}^{\ell} y_i \ln \mu_i + (1-y_i)\ln(1-\mu_i) \;\to\; \max_w$$

Удобная перекодировка: $y_i \in \{0,1\} \;\to\; \tilde{y}_i = 2y_i - 1 \in \{-1,1\}$

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln\bigl(1+\exp(-\langle w, x_i\rangle \tilde{y}_i)\bigr) \;\to\; \min_w$$

Логистическая регрессия как частный случай GLM

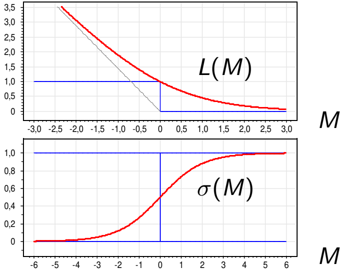
Всего лишь из двух предположений:

- y_i — бернуллиевские случайные величины с $\mathsf{E}y_i = \mu_i$
- μ_i связано с линейной моделью $g(\mu_i) = \langle x_i, w\rangle$

следуют все основные свойства логистической регрессии:

- логарифмическая функция потерь $\ln\bigl(1 + \exp(-\langle x_i, w\rangle\tilde{y}_i)\bigr)$;
- сигмоидная функция связи $\mathsf{P}(y_i|x_i) = \sigma(\langle x_i, w\rangle\tilde{y}_i)$;
- связь линейной модели с *отношением шансов* (odds ratio):

$$\langle x_i, w\rangle = \ln\frac{\mu_i}{1-\mu_i} = \ln\frac{\mathsf{P}(y_i=1|x_i)}{\mathsf{P}(y_i=0|x_i)}$$



Многоклассовая логистическая регрессия

Линейный классификатор при произвольном числе классов $|Y|$:

$$a(x) = \arg\max_{y\in Y} \langle w_y, x\rangle, \quad x, w_y \in \mathbb{R}^n$$

Вероятность того, что объект x относится к классу y:

$$P(y|x,w) = \frac{\exp\langle w_y, x\rangle}{\sum\limits_{z\in Y} \exp\langle w_z, x\rangle} = \mathop{\mathrm{SoftMax}}_{y\in Y}\langle w_y, x\rangle,$$

функция SoftMax: $\mathbb{R}^Y \to \mathbb{R}^Y$ переводит произвольный вектор в нормированный вектор дискретного распределения.

Максимизация правдоподобия (log-loss):

$$Q(w) = -\sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) \to \min_w$$

Калибровка Платта (classifier with probabilistic output)

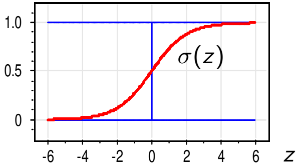
Пусть для простоты классов два, $Y = \{-1, +1\}$.

Задача. Для классификатора вида $a(x) = \mathrm{sign}\, g(x, w)$ построить функцию оценки условной вероятности $\mathsf{P}(y|x)$.

Модель условной вероятности:

$$\pi(x; a, b) = \mathsf{P}(y{=}1|x) = \sigma\bigl(a g(x, w) + b\bigr)$$

где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ — сигмоидная функция



Калибровка коэффициентов a, b по *контрольной* выборке методом максимума правдоподобия (снова log-loss):

$$\sum_{y_i=-1} \log\bigl(1 - \pi(x_i; a, b)\bigr) + \sum_{y_i=+1} \log \pi(x_i; a, b) \to \max_{a,b}$$

Вероятностные дискриминативные модели классификации

Дано: простая (i.i.d.) выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell} \sim p(x, y)$, порождаемая в.п. $X \times Y$ с неизвестной плотностью $p(x, y)$

Найти: модель плотности $p(x, y; w) = P(y|x, w)p(x)$, где
$P(y|x, w)$ — модель условной вероятности класса с параметром w
$p(x)$ — неизвестное и непараметризуемое распределение на X

Критерий: максимум правдоподобия, т.е. max плотности совместного распределения всей выборки данных:

$$\prod_{i=1}^{\ell} p(x_i, y_i; w) = \prod_{i=1}^{\ell} P(y_i|x_i, w)\cancel{p(x_i)} \to \max_w$$

Логарифм правдоподобия (log-likelihood, log-loss):

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln P(y_i|x_i, w) \to \max_w$$

Связь правдоподобия и аппроксимации эмпирического риска

Максимизация логарифма правдоподобия,
$P(y|x,w)$ — модель *условной вероятности класса*:

$$-\sum_{i=1}^{\ell} \ln P(y_i|x_i,w) \to \min_w$$

Минимизация аппроксимированного эмпирического риска,
$g(x,w)$ — модель *разделяющей поверхности*, $Y = \{\pm 1\}$:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\bigl(y_i g(x_i,w)\bigr) \to \min_w;$$

Эти два принципа эквивалентны, если положить

$$-\ln P(y_i|x_i,w) = \mathscr{L}\bigl(y_i g(x_i,w)\bigr).$$

$$\boxed{\text{модель } P(y|x,w)} \rightleftarrows \boxed{\text{модель } g(x,w) \text{ и } \mathscr{L}(M)}.$$

Вероятностный смысл регуляризации

$P(y|x,w)$ — вероятностная модель данных;
$p(w;\gamma)$ — априорное распределение параметров модели;
γ — вектор *гиперпараметров*;

Теперь не только появление выборки X^ℓ,
но и появление модели w также полагается стохастическим.

Совместное правдоподобие данных и модели:

$$p(X^\ell, w) = p(X^\ell|w)\, p(w;\gamma).$$

Принцип максимума апостериорной вероятности
(Maximum a Posteriori Probability, MAP):

$$Q_{\text{MAP}}(w) = \ln p(X^\ell, w) = \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \ln P(y_i|x_i, w)}_{Q_{\text{MLE}}(w)} + \underbrace{\ln p(w;\gamma)}_{\text{регуляризатор}} \to \max_w$$

Примеры: априорные распределения Гаусса и Лапласа

Пусть веса w_j независимы, $\mathsf{E}w_j = 0$, $\mathsf{D}w_j = C$.

Распределение Гаусса и квадратичный (L_2) регуляризатор:

$$p(w; C) = \frac{1}{(2\pi C)^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|w\|^2}{2C}\right), \quad \|w\|^2 = \sum_{j=1}^{n} w_j^2,$$

$$-\ln p(w; C) = \frac{1}{2C}\|w\|^2 + \cancel{\text{const}}$$

Распределение Лапласа и абсолютный (L_1) регуляризатор:

$$p(w; C) = \frac{1}{(2C)^n} \exp\left(-\frac{\|w\|}{C}\right), \quad \|w\| = \sum_{j=1}^{n} |w_j|,$$

$$-\ln p(w; C) = \frac{1}{C}\|w\| + \cancel{\text{const}}$$

C — гиперпараметр, $\tau = \frac{1}{C}$ — коэффициент регуляризации.

Вероятностные генеративные модели классификации

X — объекты, Y — классы, $X \times Y$ — в.п. с плотностью $p(x, y)$
Дано: $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \sim p(x, y)$ — простая выборка (i.i.d.)
Найти: $a\colon X \to Y$ с минимальной вероятностью ошибки

Пусть известна совместная плотность

$$p(x, y) = p(x)\,\mathsf{P}(y|x) = \mathsf{P}(y)p(x|y)$$

$\mathsf{P}(y)$ — *априорная вероятность* класса y
$p(x|y)$ — *функция правдоподобия* класса y
$\mathsf{P}(y|x)$ — *апостериорная вероятность* класса y

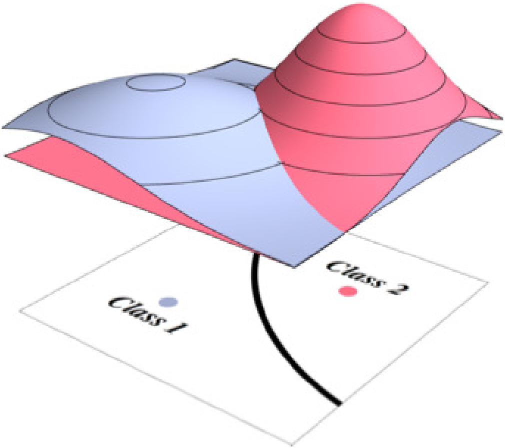
По формуле Байеса: $\mathsf{P}(y|x) = \frac{P(y)p(x|y)}{p(x)}$

Байесовский классификатор:

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

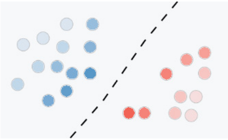
Классификация по максимуму функции правдоподобия

Частный случай: $a(x) = \arg\max_{y \in Y} p(x|y)$ при равных $P(y)$

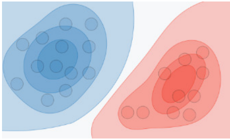


Два подхода к обучению классификации

1. **Дискриминативный** (discriminative):
   x — неслучайные векторы
   $P(y|x,w)$ — модель классификации
   Примеры: LR, GLM, SVM, RBF



2. **Генеративный** (generative):
   $x \sim p(x|y)$ — случайные векторы
   $p(x|y,\theta)$ — модель генерации данных
   Примеры: NB, PW, FLD, RBF



Байесовские модели классификации — генеративные:

- моделируют форму классов не только вдоль границы, но и на всём пространстве, что избыточно для классификации
- требуют больше данных для обучения
- более устойчивы к шумовым выбросам

Оптимальность байесовского классификатора

Теорема

Пусть $\mathsf{P}(y)$ *и* $p(x|y)$ *известны,* $\lambda_y \geqslant 0$ *— потеря от ошибки на объекте класса* $y \in Y$*. Тогда минимум среднего риска*

$$R(a) = \sum_{y \in Y} \lambda_y \int [a(x) \neq y]\, p(x,y) dx$$

достигается оптимальным байесовским классификатором

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

Замечание 1: после подстановки эмпирических оценок $\hat{P}(y)$ и $\hat{p}(x|y)$ байесовский классификатор уже не оптимален

Замечание 2: задача оценивания плотности распределения — более сложная, чем задача классификации

Наивный байесовский классификатор (Naïve Bayes)

Наивное предположение:
признаки $f_j\colon X \to D_j$ — независимые случайные величины с плотностями распределения, $p_j(\xi|y)$, $y \in Y$, $j = 1, \ldots, n$

Тогда функции правдоподобия классов представимы в виде произведения одномерных плотностей по признакам, $x^j \equiv f_j(x)$:

$$p(x|y) = p_1(x^1|y) \cdots p_n(x^n|y), \quad x = (x^1, \ldots, x^n), \quad y \in Y$$

Прологарифмировав под argmax, получим классификатор

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \left(\ln \lambda_y \hat{P}(y) + \sum_{j=1}^{n} \ln \hat{p}_j(x^j|y) \right)$$

Восстановление n одномерных плотностей
— намного более простая задача, чем одной n-мерной

Квадратичный дискриминант (Quadratic Discriminant Analysis)

Гипотеза: каждый класс $y \in Y$ имеет n-мерную гауссовскую плотность с центром μ_y и ковариационной матрицей Σ_y:

$$p(x|y) = \mathcal{N}(x; \mu_y, \Sigma_y) = \frac{\exp\bigl(-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^{\mathsf{T}}\Sigma_y^{-1}(x-\mu_y)\bigr)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma_y}}$$

Теорема

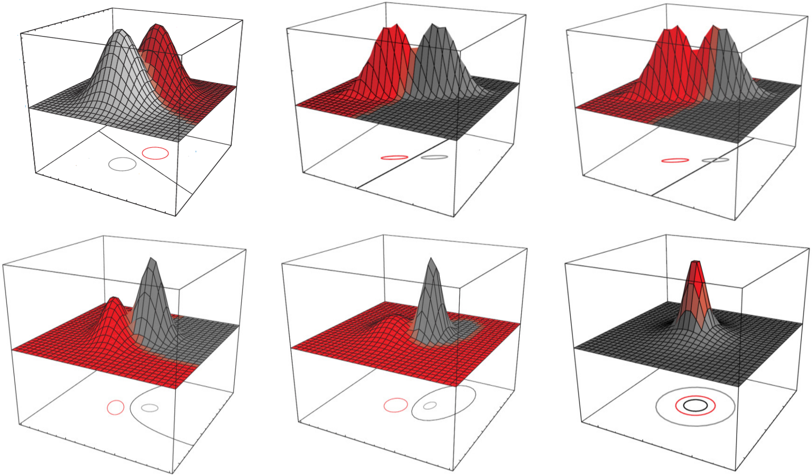
1. Разделяющая поверхность, определяемая уравнением $\lambda_y P(y) p(x|y) = \lambda_s P(s) p(x|s)$, квадратична для всех $y, s \in Y$.

2. Если $\Sigma_y = \Sigma_s$, то поверхность вырождается в линейную.

Квадратичный дискриминант — подстановочный алгоритм:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Bigl(\ln \lambda_y P(y) - \tfrac{1}{2}(x-\hat{\mu}_y)^{\mathsf{T}}\hat{\Sigma}_y^{-1}(x-\hat{\mu}_y) - \tfrac{1}{2}\ln\det\hat{\Sigma}_y\Bigr)$$

Геометрический смысл квадратичного дискриминанта



Линейный дискриминант Фишера (Fisher Linear Discriminant)

Проблема: для малочисленных классов возможно $\det \hat{\Sigma}_y = 0$.

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

Оценка максимума правдоподобия для Σ:

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

Линейный дискриминант — подстановочный алгоритм:

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

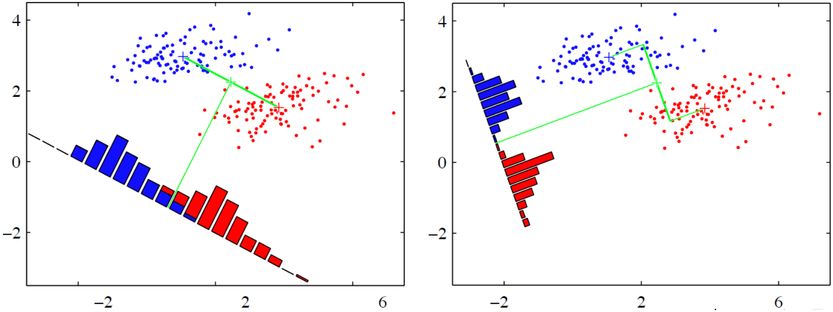
$$= \arg\max_{y \in Y} \bigl(\underbrace{\ln(\lambda_y \hat{P}(y)) - \tfrac{1}{2} \hat{\mu}_y^\mathsf{T} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y}_{\beta_y} + x^\mathsf{T} \underbrace{\hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y}_{w_y}\bigr);$$

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \bigl(x^\mathsf{T} w_y + \beta_y\bigr).$$

В случае мультиколлинеарности — обращать матрицу $\hat{\Sigma} + \tau I_n$.

Геометрическая интерпретация линейного дискриминанта

В одномерной проекции на направляющий вектор разделяющей гиперплоскости классы разделяются наилучшим образом, то есть с минимальной вероятностью ошибки:



Ось проекции перпендикулярна общей касательной эллипсоидов рассеяния

Fisher R. A. The use of multiple measurements in taxonomic problems. 1936.

Гауссовская смесь с диагональными матрицами ковариации

Гауссовская смесь GMM — Gaussian Mixture Model

Допущения:

1. Функции правдоподобия классов $p(x|y)$ представимы в виде смесей k_y компонент, для каждого класса $y \in Y$
2. Компоненты $j = 1, \dots, k_y$ имеют n-мерные гауссовские плотности с некоррелированными признаками: $\mu_{yj} = (\mu_{yj1}, \dots, \mu_{yjn})$, $\Sigma_{yj} = \mathrm{diag}(\sigma^2_{yj1}, \dots, \sigma^2_{yjn})$:

$$p(x|y) = \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x), \quad p_{yj}(x) = \mathcal{N}(x; \mu_{yj}, \Sigma_{yj})$$

$$\sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} = 1, \quad w_{yj} \geqslant 0$$

ЕМ-алгоритм. Эмпирические оценки средних и дисперсий

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

Е-шаг: для всех $y \in Y$, $j = 1, \dots, k_y$, $d = 1, \dots, n$:

$$g_{yij} = \frac{w_{yj}\mathcal{N}(x_i; \mu_{yj}, \Sigma_{yj})}{p(x_i|y)} \equiv \mathsf{P}(j|x_i, y_i = y)$$

М-шаг: для всех $y \in Y$, $j = 1, \dots, k_y$, $d = 1, \dots, n$

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

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

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

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

Байесовский классификатор

Подставим гауссовскую смесь в байесовский классификатор:

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

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

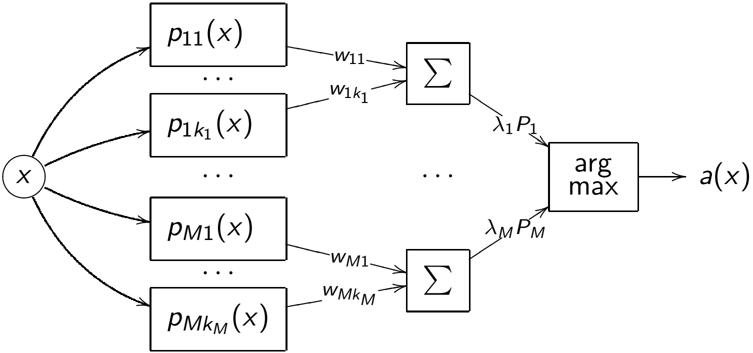
$$\rho_{yj}^2(x,\mu_{yj}) = \sum_{d=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{yjd}^2}\bigl(f_d(x)-\mu_{yjd}\bigr)^2.$$

Интерпретация: это метрический классификатор, в котором
$p_{yj}(x)$ — близость объекта x к j-й компоненте класса y;
$\Gamma_y(x)$ — близость объекта x к классу y.

Сеть радиальных базисных функций (RBF)

Трёхслойная сеть RBF (Radial Basis Functions):

$$a(x) = \arg\max_{y\in Y} \lambda_y P_y \sum_{j=1}^{k_y} w_{yj} p_{yj}(x)$$



Резюме в конце лекции

- Обучение вероятностных порождающих (генеративных) моделей — *методом максимума правдоподобия*
  — восстановление плотности по данным (без учителя)
  — обучение регрессии (с учителем)
  — обучение классификации (с учителем)
- Вероятностный смысл *регуляризации* — априорное распределение в пространстве параметров модели
- *Логистическая регрессия* — метод классификации, оценивающий условные вероятности классов $P(y|x)$
- Два подхода к обучению классификации:
  — *дискриминативный*: модель вероятности классов $P(y|x, w)$
  — *генеративный*: модель плотности классов $p(x|y, w)$
- Байесовские методы классификации — генеративные, основаны на оценивании плотностей классов