РЕГРЕССИЯ ПО-БАЙЕСОВСКИ, КЛАССИФИКАЦИЯ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

28 сентября 2024 г.

Random facts:

- 28 сентября 480 г. до н.э. «друг на друга корабли пошли. Сначала удавалось персам сдерживать напор. когда же в узком месте множество судов скопилось, никому никто помочь не мог, и клювы направляли медные свои в своих же, вёсла и гребцов круша».
- 28 сентября 1066 г. Вильгельм Бастард сделал по английской земле первый шаг к тому, чтобы называться заметно более славным именем
- 28 сентября 1864 г. в Лондоне собрался митинг в поддержку польского национально-освободительного восстания; рабочие разных стран решили, что, по словам присутствовавшего там Карла Маркса, «завоевание политической власти стало великой обязанностью рабочего класса», и учредили Первый интернационал
- 28 сентября 1928 г. Александр Флеминг заметил в лаборатории странную плесень
- 28 сентября 1972 г. канадцы забросили победную шайбу за 34 секунды до конца игры, выиграв серию игр 6:5; Николай Озеров сказал при этом: «Такой хоккей нам не нужен!»
- 28 сентября 1991 г. на рок-фестиваль «Монстры рока» (Monsters of Rock) в Москву приехали AC/DC и Metallica; пришли более 700 тысяч человек, пронос спиртных напитков не ограничивался, и концерт стал известен как «тушинское побоище»

Регуляризация по-байесовски

Байесовская регуляризация

- А теперь давайте посмотрим на регрессию с совсем байесовской стороны.
- Напомним основу байесовского подхода:
  1. найти апостериорное распределение на гипотезах/параметрах:

$$p(\theta \mid D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

     (и/или найти максимальную апостериорную гипотезу $\arg\max_\theta p(\theta \mid D)$);
  2. найти апостериорное распределение исходов дальнейших экспериментов:

$$p(x \mid D) \propto \int_{\theta \in \Theta} p(x \mid \theta)p(D|\theta)p(\theta)\mathrm{d}\theta.$$

Байесовская регуляризация

- В нашем рассмотрении пока не было никаких априорных распределений.
- Давайте какое-нибудь введём; например, нормальное (почему так – позже):

$$p(\mathbf{w}) = N(\mathbf{w} \mid \mu_0, \Sigma_0).$$

- Рассмотрим набор данных $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ со значениями $\mathbf{t} = \{t_1, \dots, t_N\}$. В этой модели мы предполагаем, что данные независимы и одинаково распределены:

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \mathbf{w}, \sigma^2) = \prod_{n=1}^{N} N\left(t_n \mid \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n), \sigma^2\right).$$

Байесовская регуляризация

- Тогда наша задача – посчитать

$$p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) \propto p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \mathbf{w}, \sigma^2) p(\mathbf{w})$$
$$= N(\mathbf{w} \mid \mu_0, \Sigma_0) \prod_{n=1}^{N} N\left(t_n \mid \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n), \sigma^2\right).$$

- Давайте подсчитаем.

Байесовская регуляризация

- Получится

$$p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) = N(\mathbf{w} \mid \mu_N, \Sigma_N),$$
$$\mu_N = \Sigma_N \left(\Sigma_0^{-1} \mu_0 + \frac{1}{\sigma^2} \Phi^\top \mathbf{t} \right),$$
$$\Sigma_N = \left(\Sigma_0^{-1} + \frac{1}{\sigma^2} \Phi^\top \Phi \right)^{-1}.$$

- Теперь давайте подсчитаем логарифм правдоподобия.

Байесовская регуляризация

- Если мы возьмём априорное распределение около нуля:

$$p(\mathbf{w}) = N(\mathbf{w} \mid 0, \frac{1}{\alpha}\mathbf{I}),$$

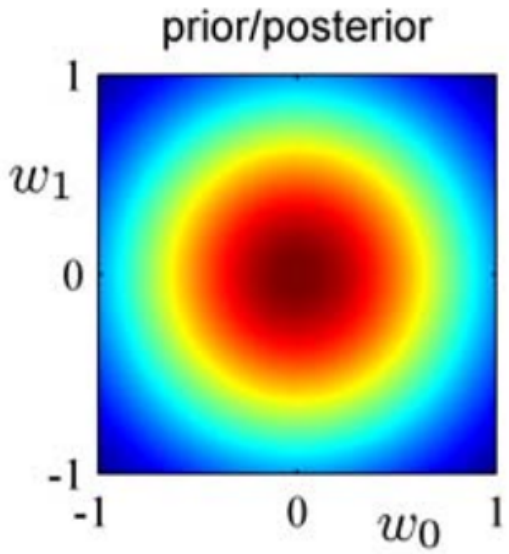
то логарифм правдоподобия получится

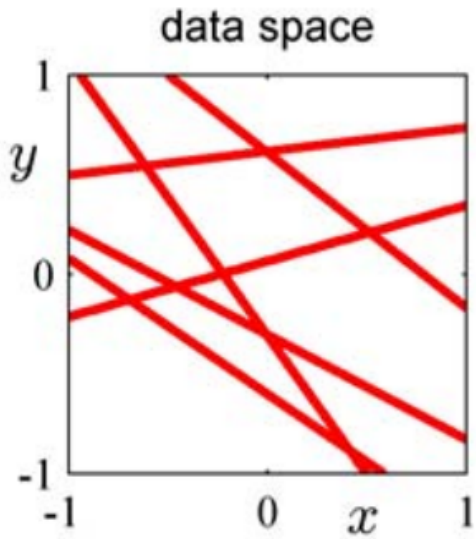
$$\ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) = -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{n=1}^{N}\left(t_n - \mathbf{w}^\top\phi(\mathbf{x}_n)\right)^2 - \frac{\alpha}{2}\mathbf{w}^\top\mathbf{w} + \text{const},$$

то есть в точности гребневая регрессия.

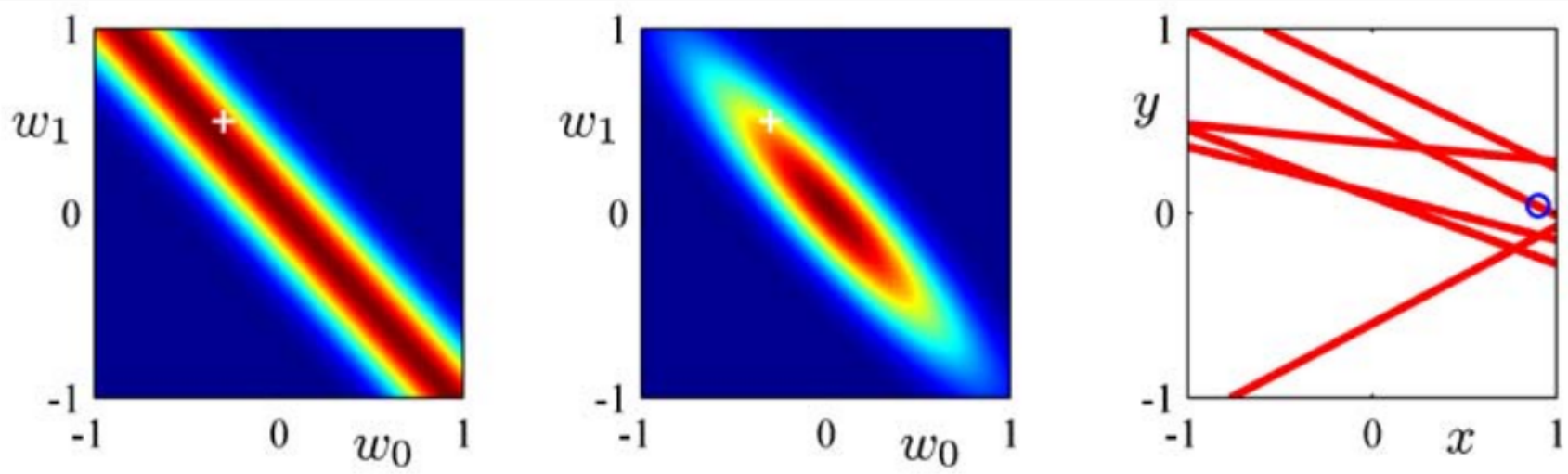
Пример

likelihood

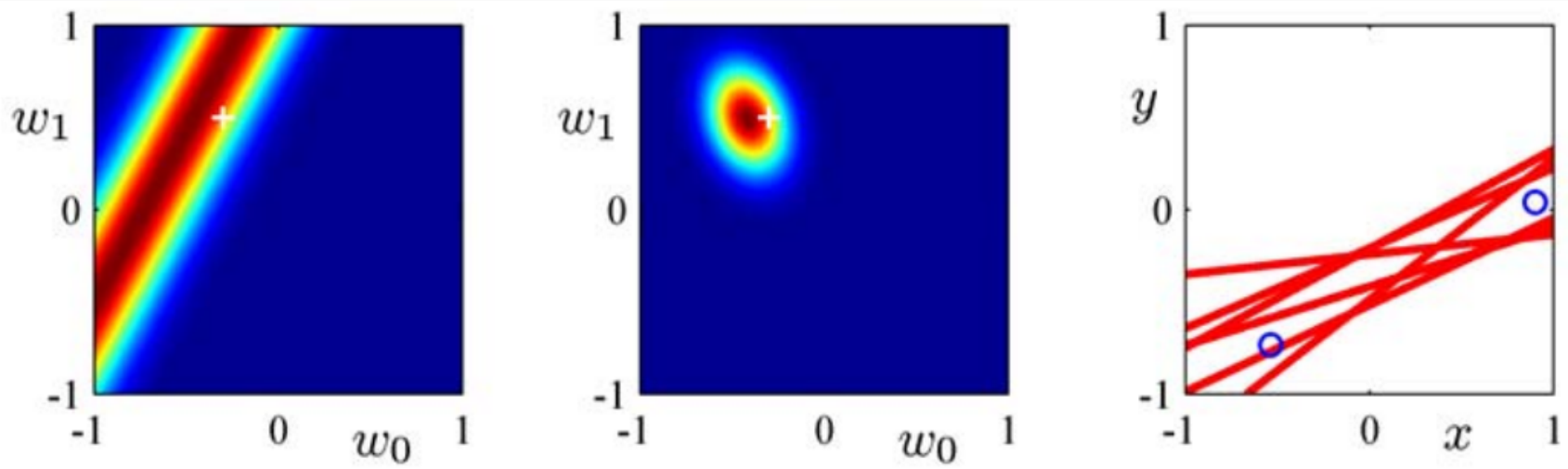




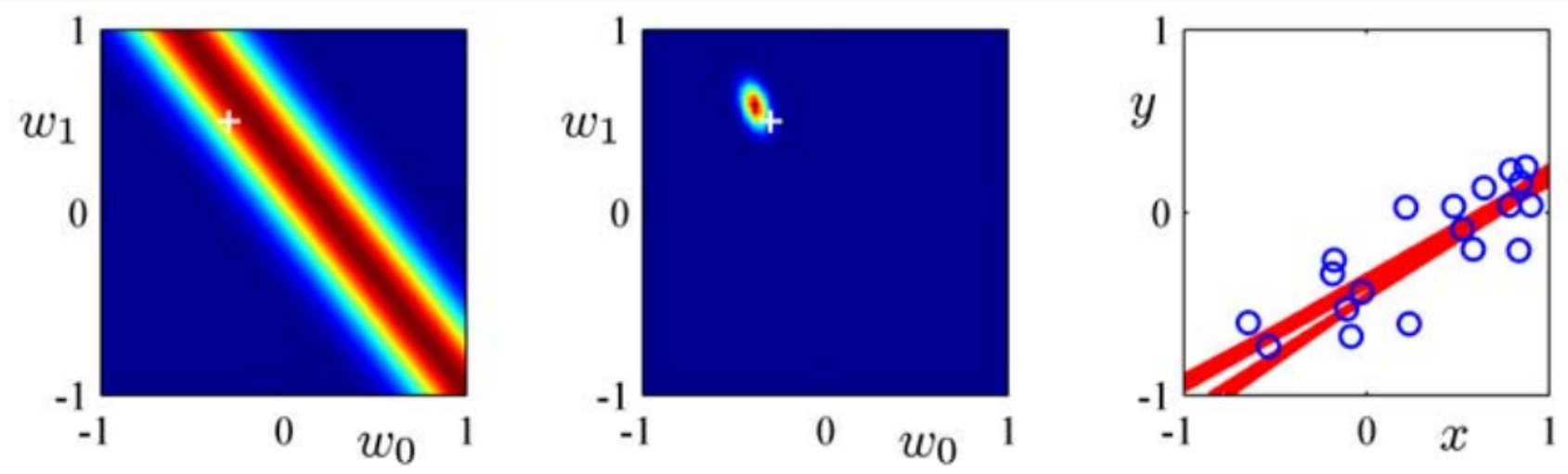
Пример



Пример



Пример



Обобщение

- Можно слегка обобщить – рассмотреть априорное распределение более общего вида

$$p(\mathbf{w} \mid \alpha) = \left[\frac{q}{2} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{1/q} \frac{1}{\Gamma(1/q)} \right]^M e^{-\frac{\alpha}{2} \sum_{j=1}^{M} |w_j|^q}.$$

Упражнение. Подсчитайте логарифм правдоподобия.

Лассо

- Теперь давайте рассмотрим лассо-регрессию:

$$L(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \lambda \sum_{j=0}^{p} |w_j|.$$

- Главное отличие – теперь форма ограничений (т.е. форма априорного распределения) такова, что весьма вероятно получить строго нулевые w_j.
- Кстати, что значит «форма ограничений»?

Лассо

- Мы можем переписать регрессию с регуляризатором по-другому:

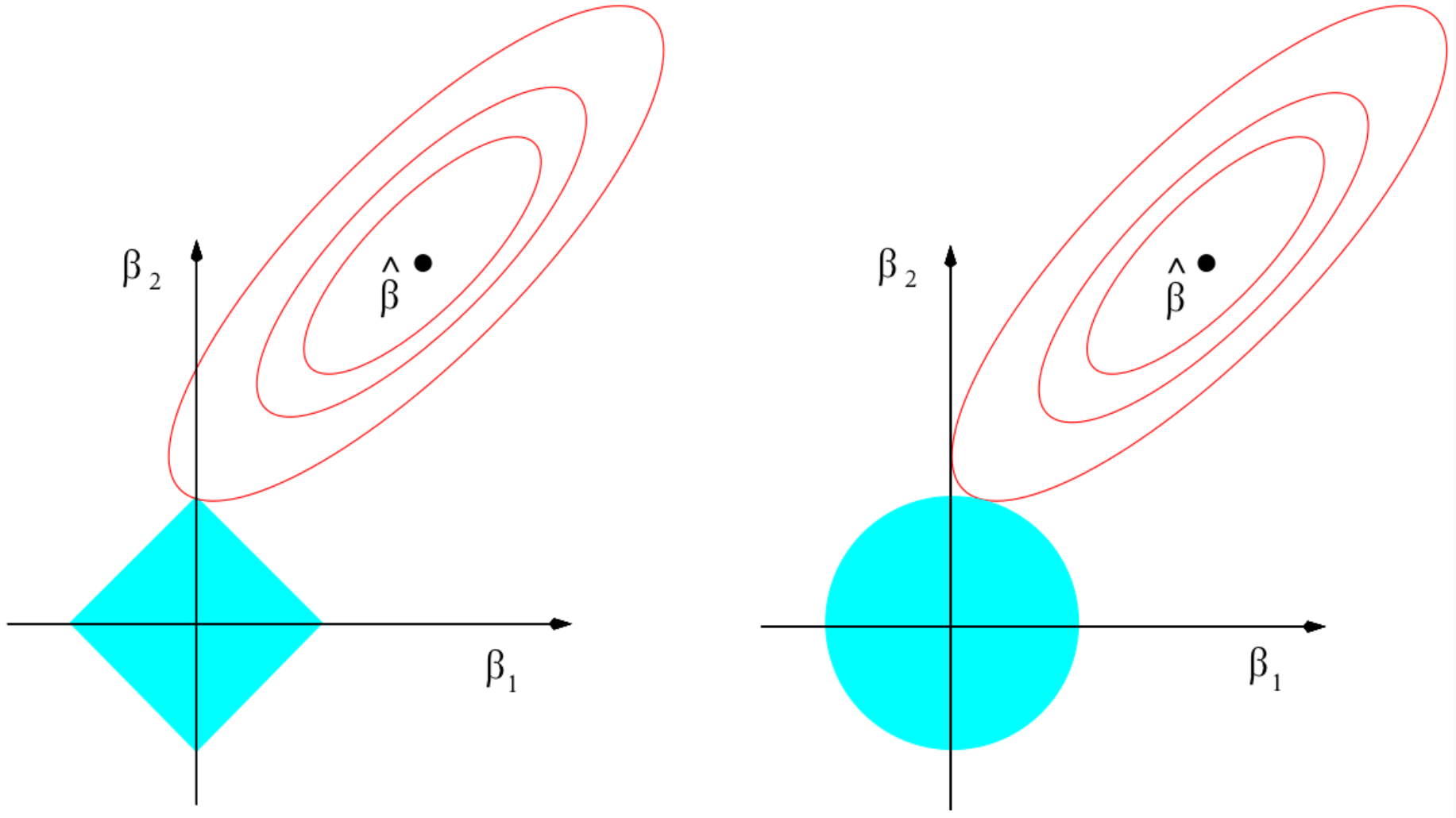
$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \lambda \sum_{j=0}^{p} |w_j| \right\},$$

эквивалентно

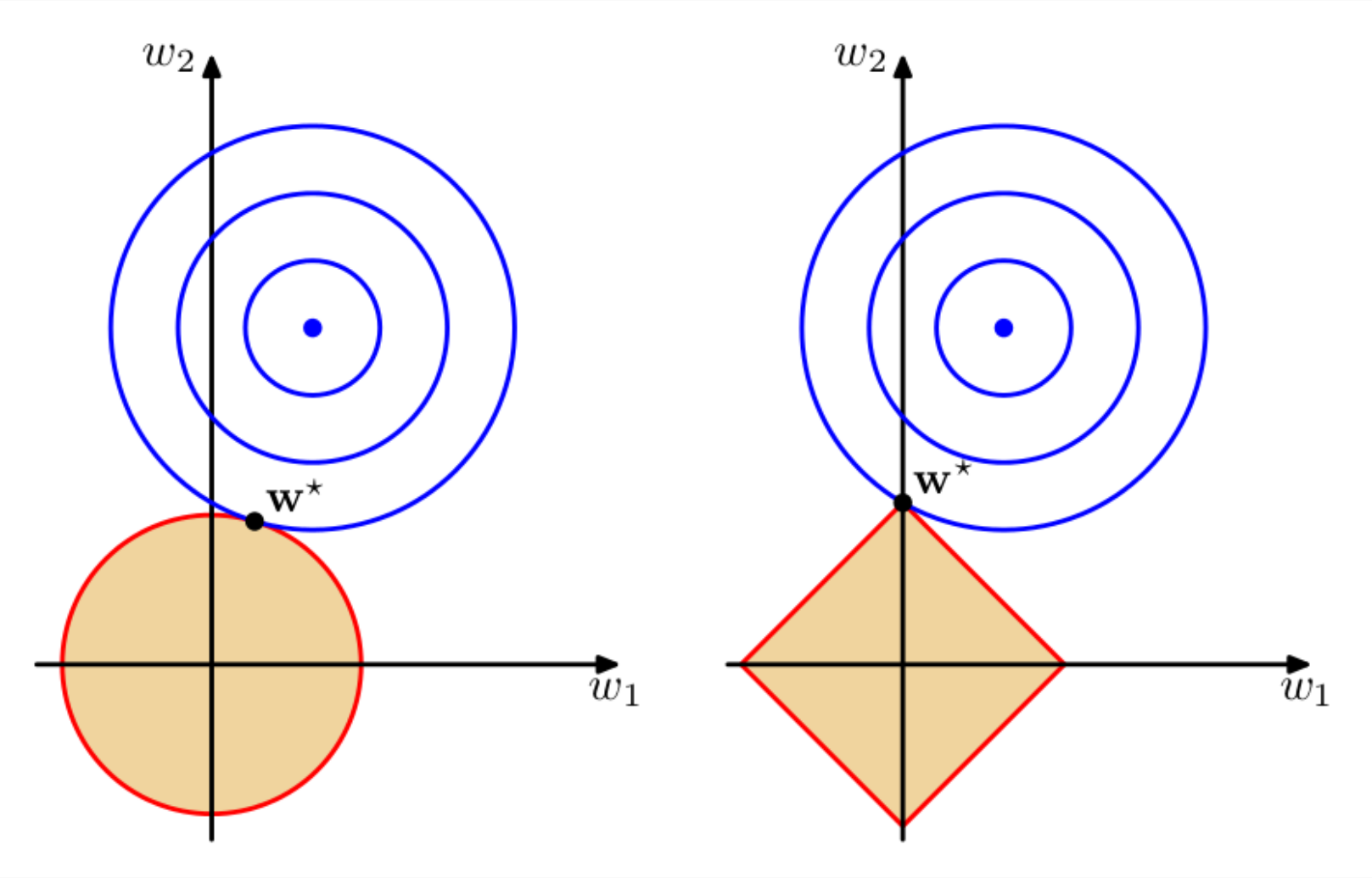
$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 \right\} \text{ при } \sum_{j=0}^{p} |w_j| \leq t.$$

Упражнение. Докажите это.

Гребень и лассо



Гребень и лассо



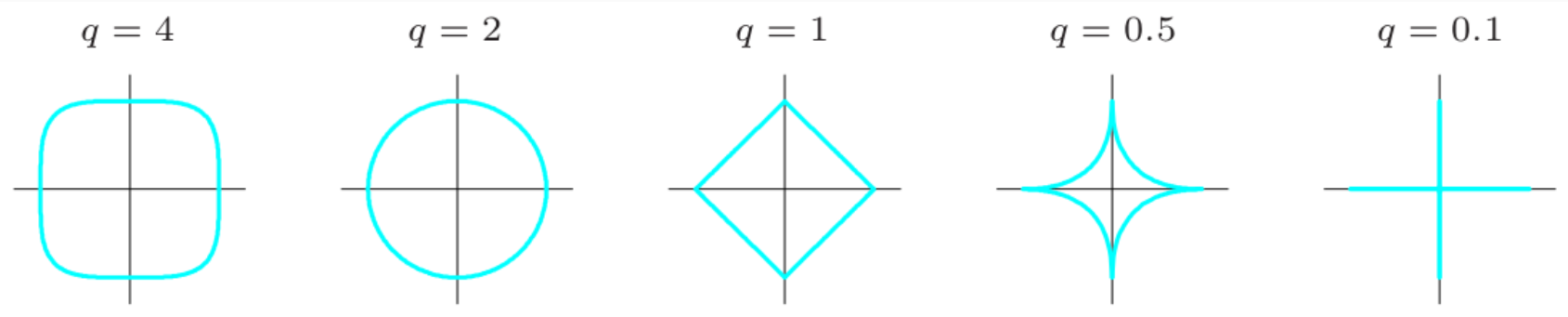
Обобщение

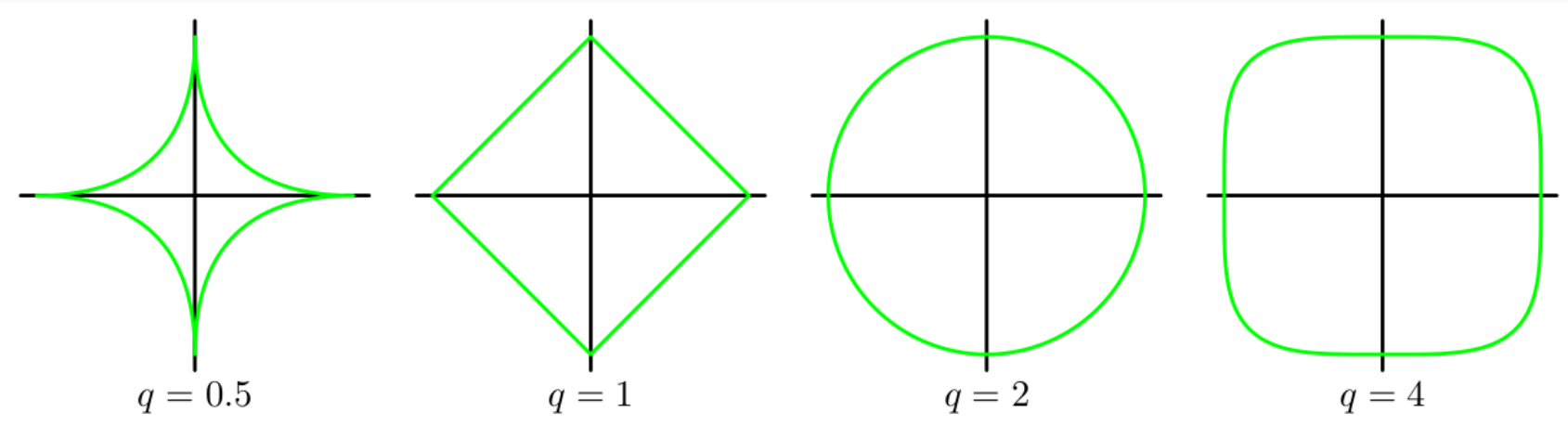
- Можно рассмотреть обобщение гребневой и лассо-регрессии:

$$L(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \lambda \sum_{j=0}^{p}(|w_j|)^q.$$

Упражнение. Какому априорному распределению на параметры $\mathbf{w}$ соответствует эта задача?

Разные q





Предсказания в линейной регрессии

Предсказание в линейной регрессии

- Теперь давайте вернёмся к байесовской постановке:
  1. найти апостериорное распределение на гипотезах/параметрах:

$$p(\theta \mid D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

     (и/или найти максимальную апостериорную гипотезу $\arg\max_\theta p(\theta \mid D)$);
  2. найти апостериорное распределение исходов дальнейших экспериментов:

$$p(x \mid D) \propto \int_{\theta \in \Theta} p(x \mid \theta)p(D|\theta)p(\theta)\mathrm{d}\theta.$$

Предсказание в линейной регрессии

- В прошлый раз мы нашли апостериорное распределение: для гауссовского априорного

$$p(\mathbf{w} \mid \alpha) = N(\mathbf{w} \mid 0, \frac{1}{\alpha}\mathbf{I})$$

мы нашли

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) &= N(\mathbf{w} \mid \mu_N, \Sigma_N), \\ \mu_N &= \Sigma_N \left(\Sigma_0^{-1}\mu_0 + \beta\Phi^\top \mathbf{t}\right), \\ \Sigma_N &= \left(\Sigma_0^{-1} + \beta\Phi^\top\Phi\right)^{-1}, \end{aligned}$$

где $\beta = \frac{1}{\sigma^2}$ (precision нормального распределения).

Предсказание в линейной регрессии

- Теперь сделаем следующий шаг – найдём апостериорное распределение наших предсказаний

$$p(t \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) = \int p(t \mid \mathbf{w}, \beta) p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) d\mathbf{w}.$$

- Это свёртка двух гауссианов, и получается...

Предсказание в линейной регрессии

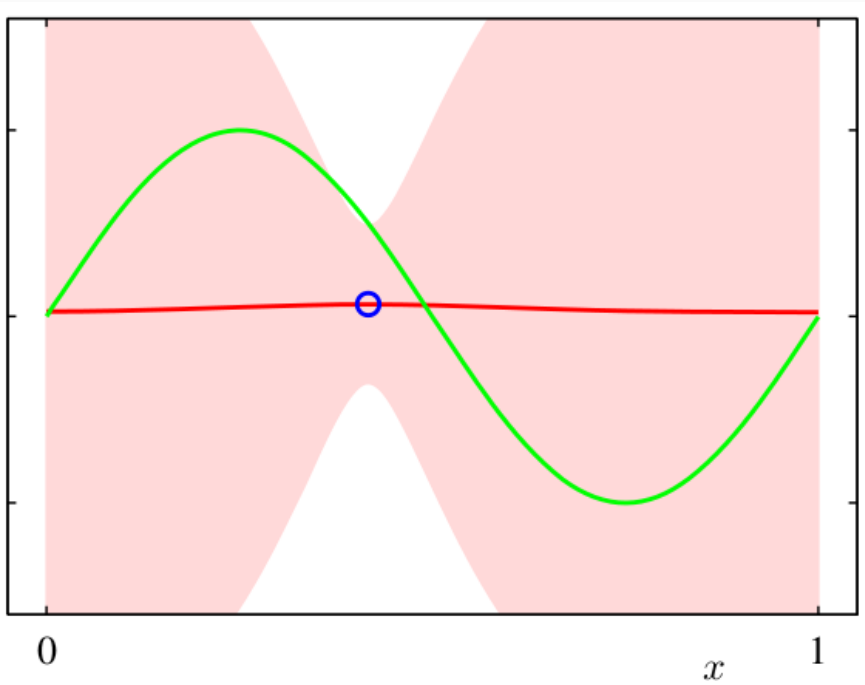
- ...тоже гауссиан:

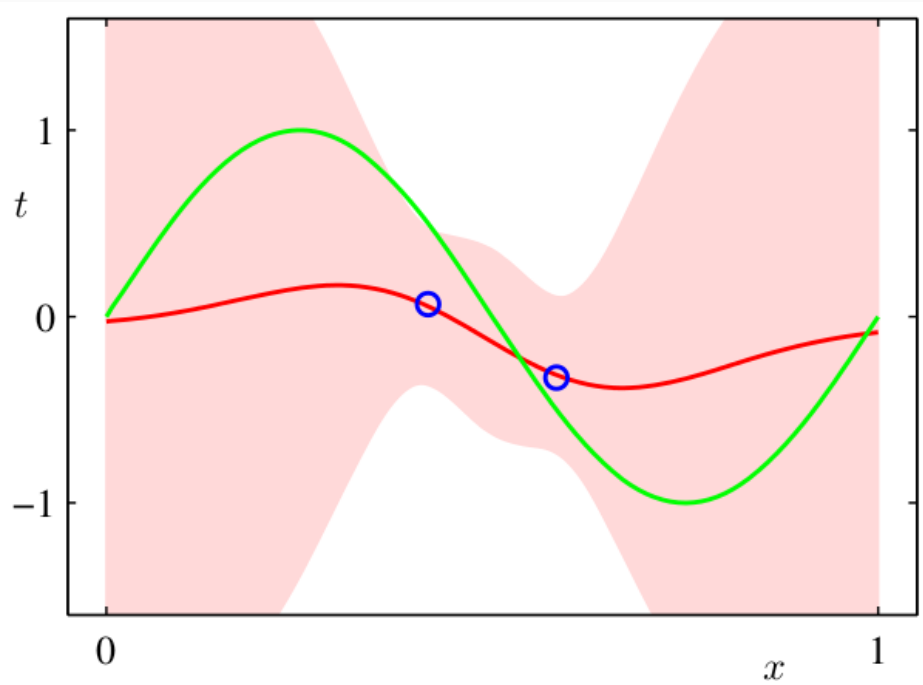
$$p(t \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) = N(t \mid \mu_N^\top \phi(\mathbf{x}), \sigma_N^2),$$
$$\text{где } \sigma_N^2 = \frac{1}{\beta} + \phi(\mathbf{x})^\top \Sigma_N \phi(\mathbf{x}).$$

- Т.е. дисперсия складывается из шума в данных β и дисперсии параметров $\mathbf{w}$; гауссианы независимы, и их дисперсии просто складываются.

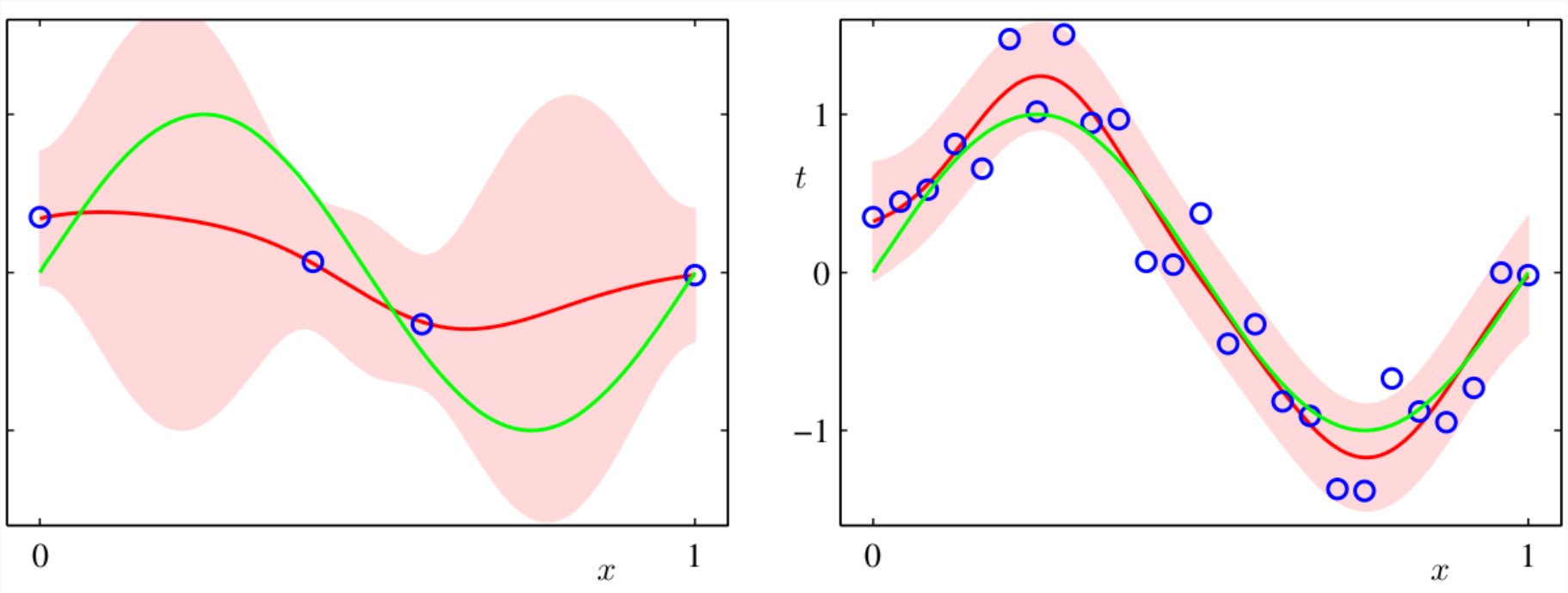
Упражнение. Оценка всё время уточняется: $\sigma_{N+1}^2 \leq \sigma_N^2$.

Предсказания

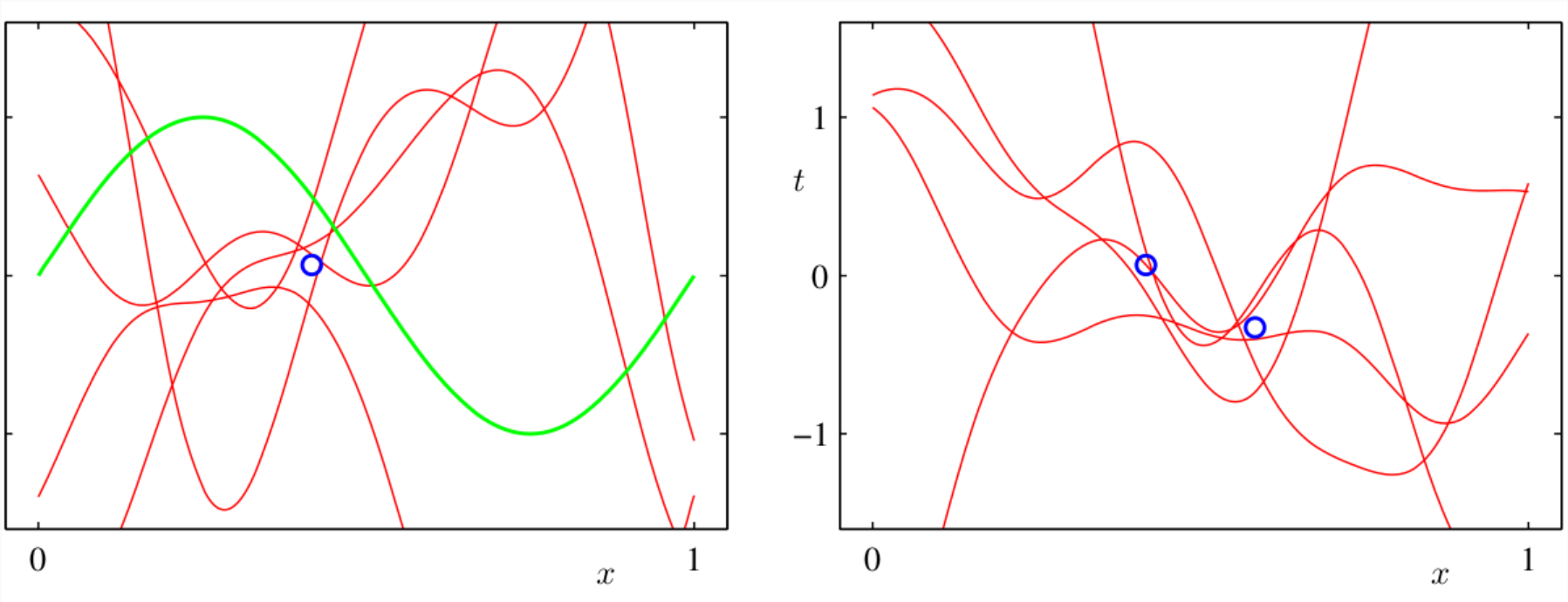




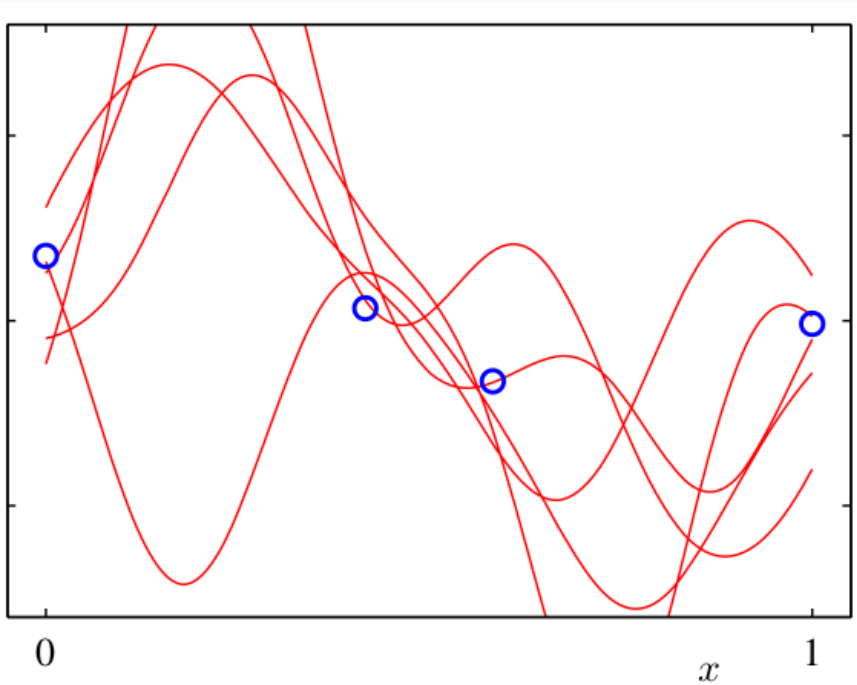
Предсказания

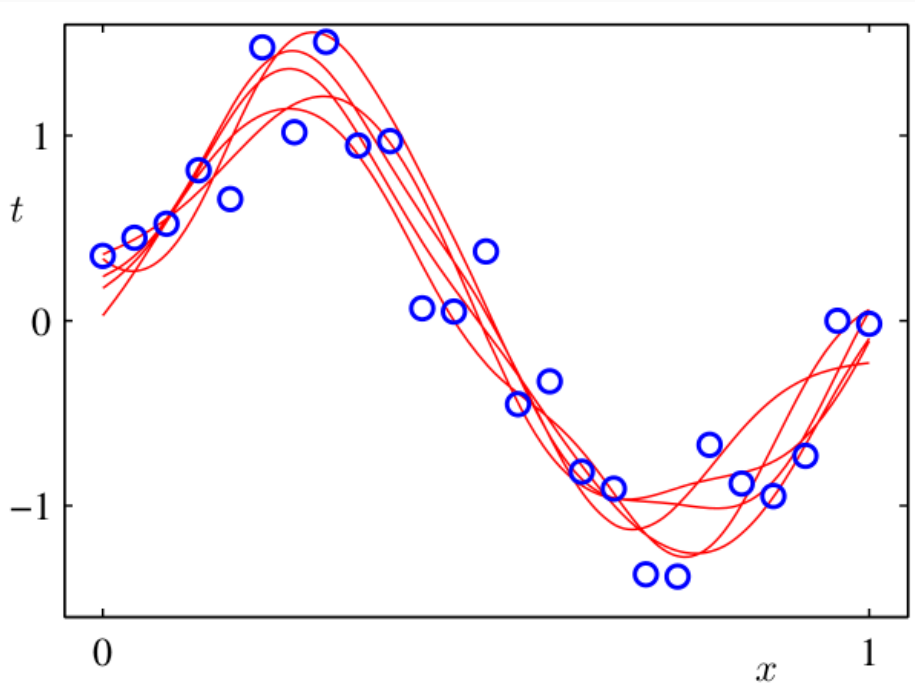


Предсказания



Предсказания





Введение в классификацию

Задача классификации

- Теперь классификация: определить вектор $\mathbf{x}$ в один из K классов C_k.
- В итоге у нас так или иначе всё пространство разобьётся на эти классы.
- Т.е. на самом деле мы ищем *разделяющую поверхность* (decision surface, decision boundary).

Задача классификации

- Как кодировать? Бинарная задача – очень естественно, переменная t, $t = 0$ соответствует C_1, $t = 1$ соответствует C_2.
- Оценку t можно интерпретировать как вероятность (по крайней мере, мы постараемся, чтобы было можно).
- Если несколько классов – удобно 1-of-K:

$$\mathbf{t} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots)^\top.$$

- Тоже можно интерпретировать как вероятности – или пропорционально им.

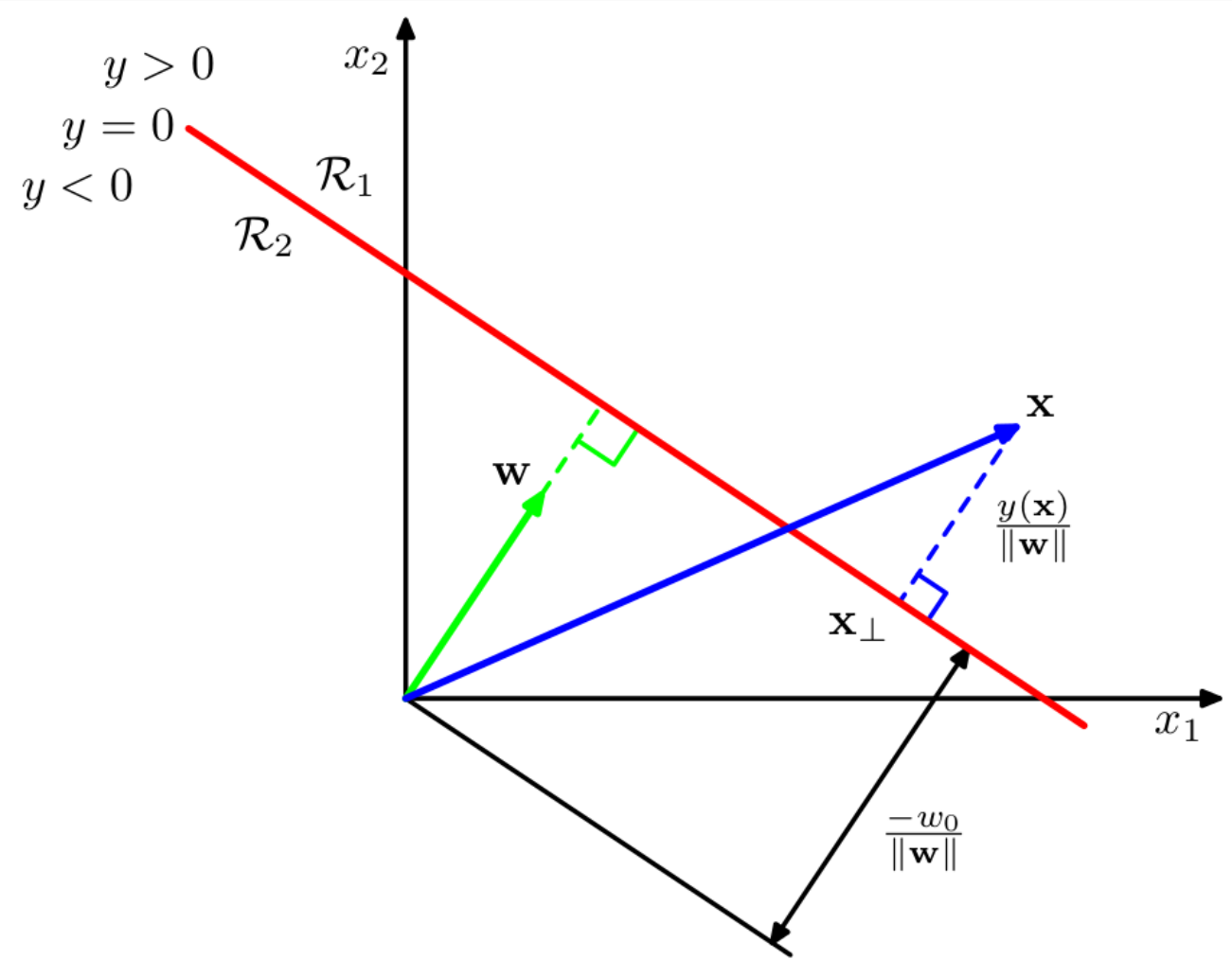
Разделяющая гиперплоскость

- Начнём с геометрии: рассмотрим линейную дискриминантную функцию

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0.$$

- Это гиперплоскость, и $\mathbf{w}$ – нормаль к ней.
- Расстояние от начала координат до гиперплоскости равно $\frac{-w_0}{\|\mathbf{w}\|}$.
- $y(\mathbf{x})$ связано с расстоянием до гиперплоскости: $d = \frac{y(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$.

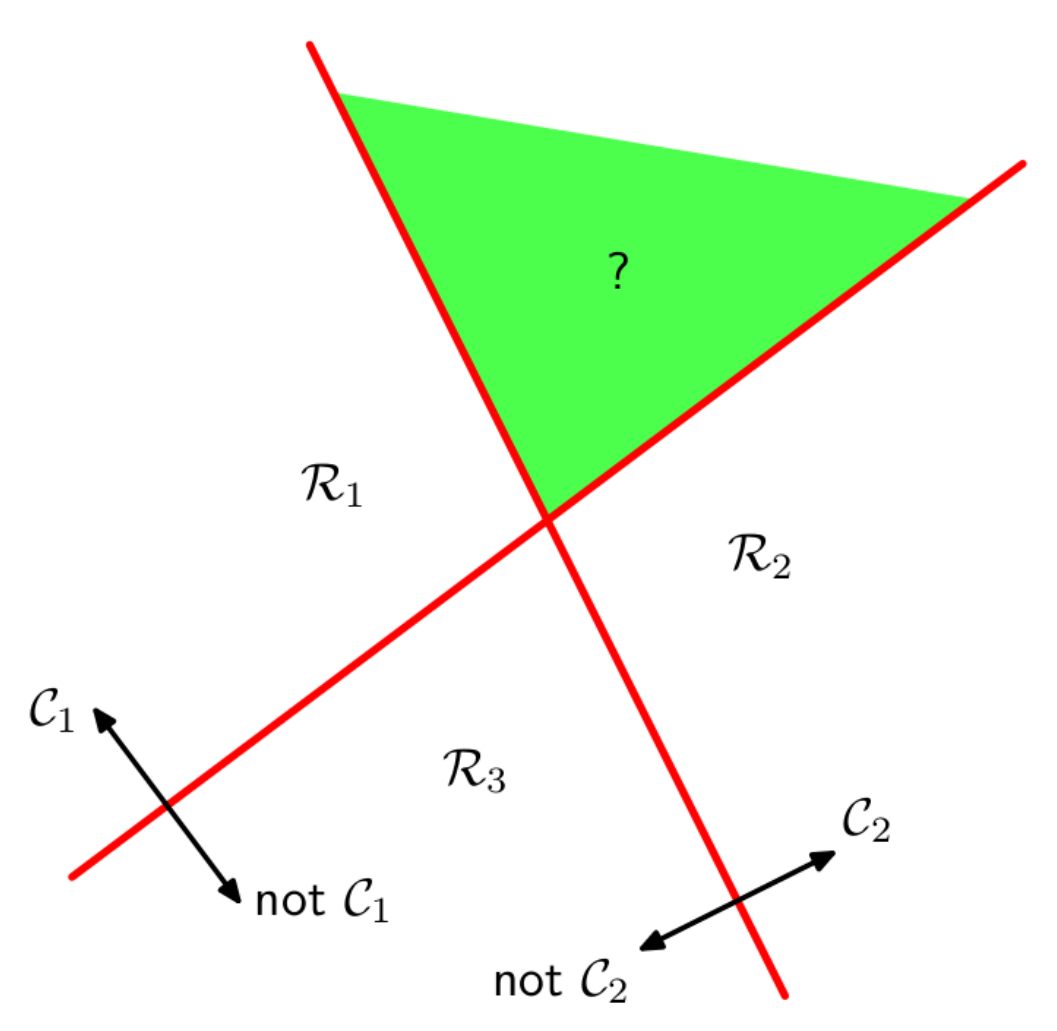
Разделяющая гиперплоскость



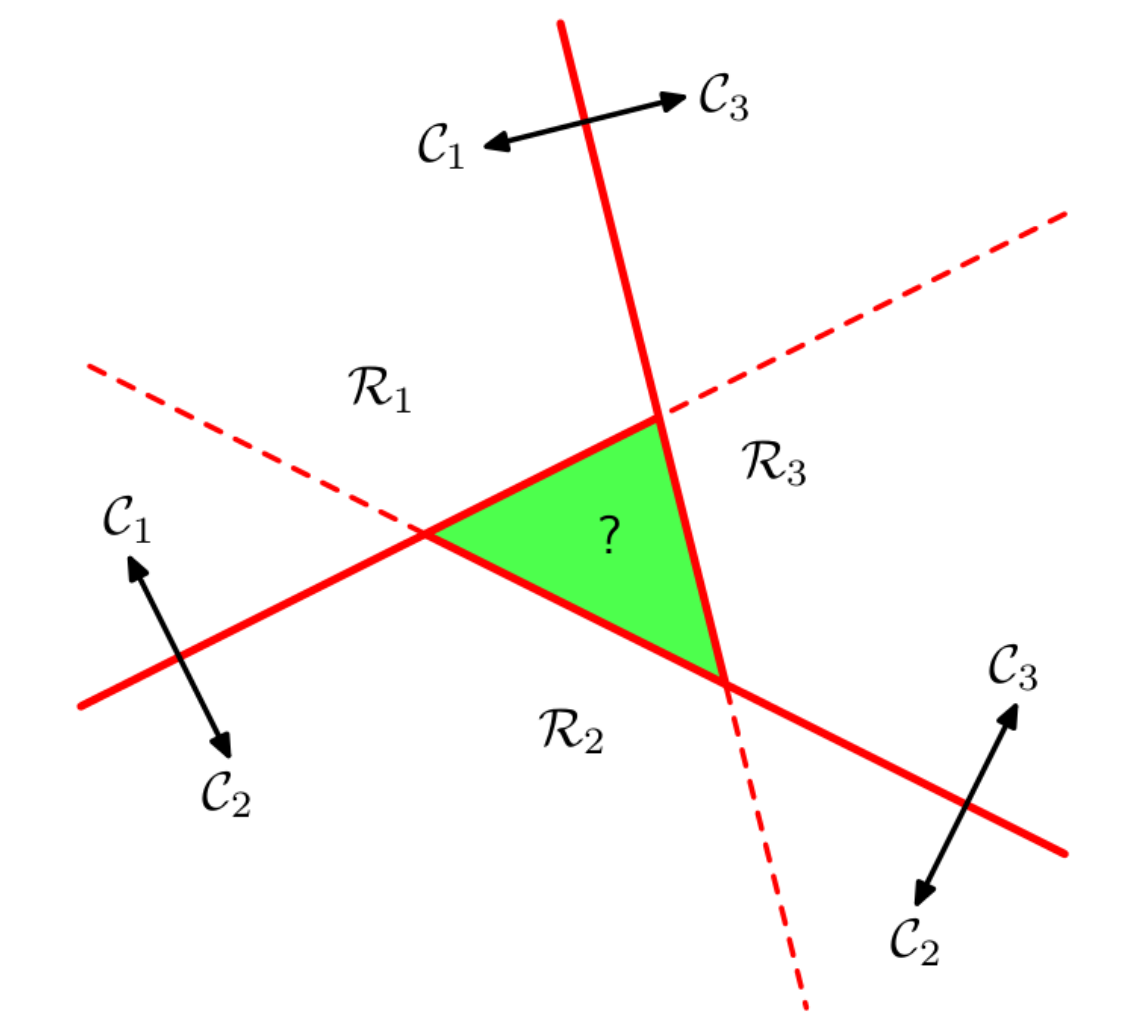
Несколько классов

- С несколькими классами выходит незадача.
- Можно рассмотреть K поверхностей вида «один против всех».
- Можно – $\binom{K}{2}$ поверхностей вида «каждый против каждого».
- Но всё это как-то нехорошо.

Несколько классов



Несколько классов



Несколько классов

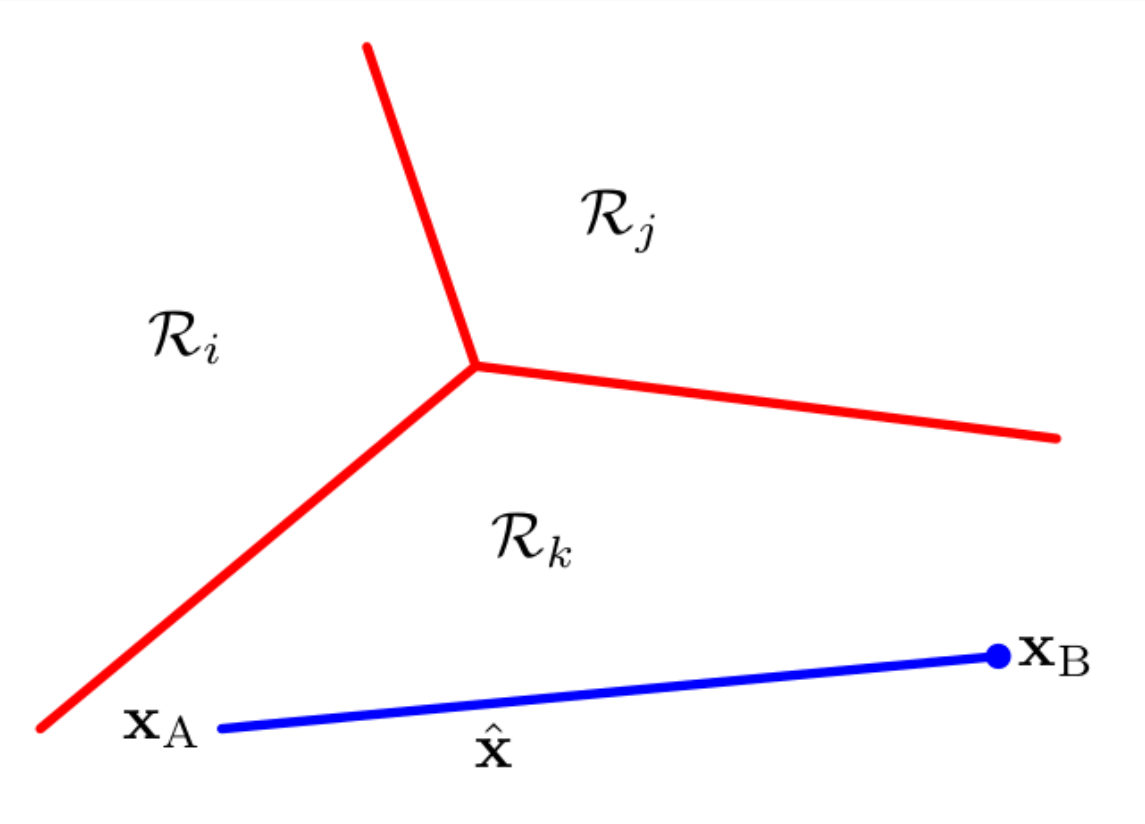
- Лучше рассмотреть единый дискриминант из K линейных функций:

$$y_k(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x} + w_{k0}.$$

- Классифицировать в C_k, если $y_k(\mathbf{x})$ – максимален.
- Тогда разделяющая поверхность между C_k и C_j будет гиперплоскостью вида $y_k(\mathbf{x}) = y_j(\mathbf{x})$:

$$\left(\mathbf{w}_k - \mathbf{w}_j\right)^\top \mathbf{x} + \left(w_{k0} - w_{j0}\right).$$

Несколько классов



Упражнение. Докажите, что области, соответствующие классам, при таком подходе всегда односвязные и выпуклые.

Метод наименьших квадратов

- Мы снова можем воспользоваться методом наименьших квадратов: запишем $y_k(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x} + w_{k0}$ вместе (спрятав свободный член) как

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{W}^\top \mathbf{x}.$$

- Можно найти $\mathbf{W}$, оптимизируя сумму квадратов; функция ошибки:

$$E_D(\mathbf{W}) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[(\mathbf{XW} - \mathbf{T})^\top (\mathbf{XW} - \mathbf{T})\right].$$

- Берём производную, решаем...

Метод наименьших квадратов

- ...получается привычное

$$\mathbf{W} = \left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{T} = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{T},$$

  где $\mathbf{X}^\dagger$ – псевдообратная Мура-Пенроуза.

- Теперь можно найти и дискриминантную функцию:

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{W}^\top \mathbf{x} = \mathbf{T}^\top \left(\mathbf{X}^\dagger\right)^\top \mathbf{x}.$$

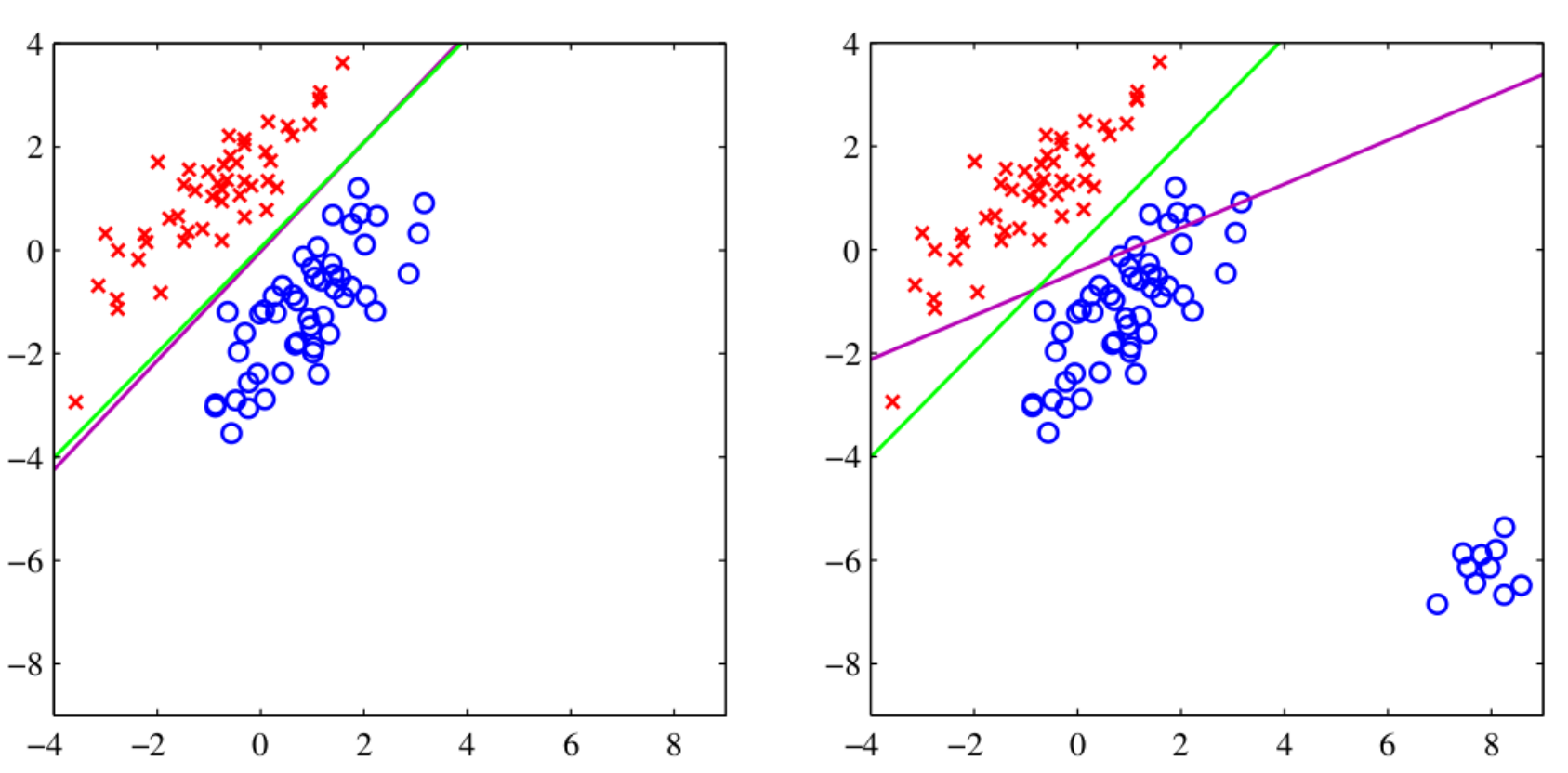
Метод наименьших квадратов

- Это решение сохраняет линейность.

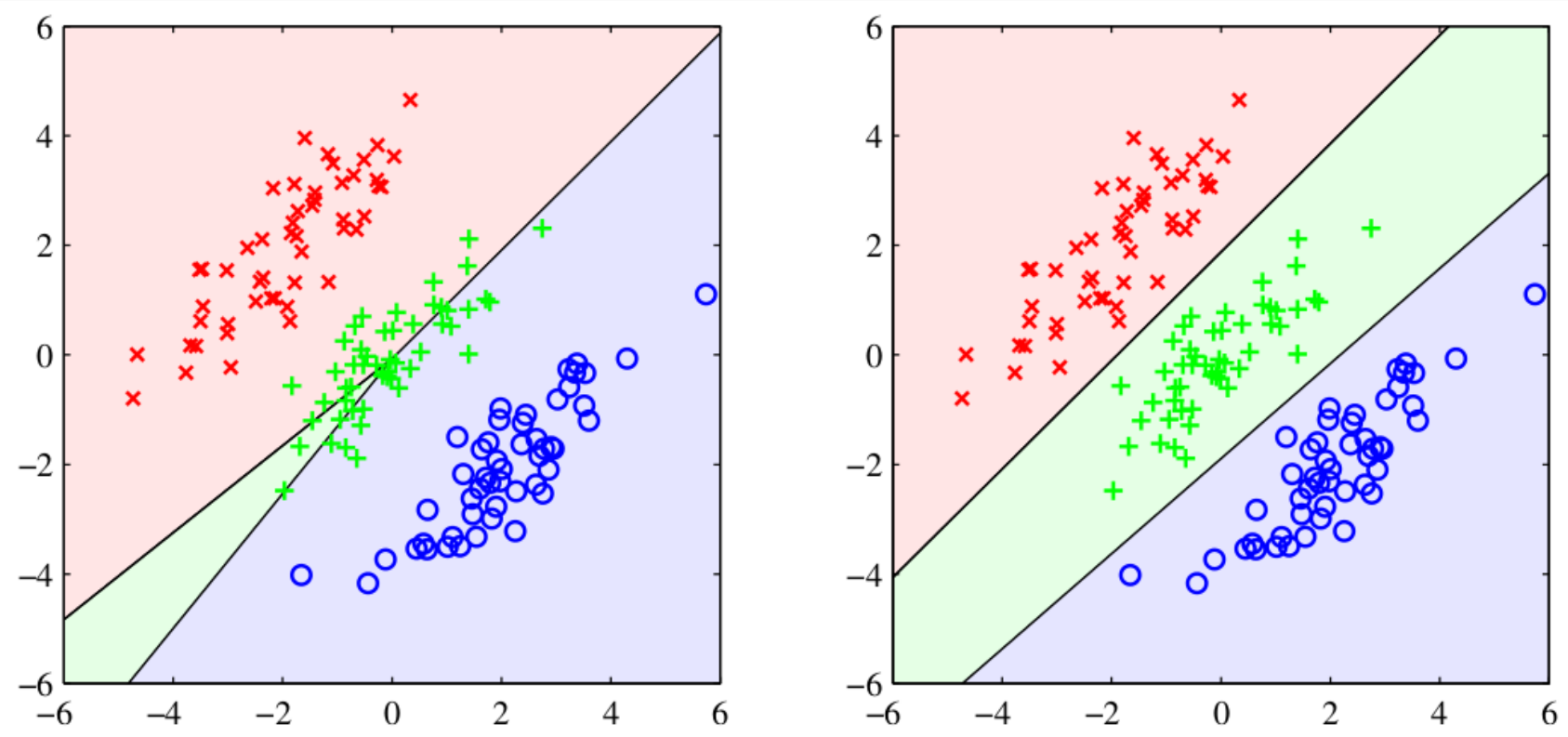
Упражнение. Докажите, что в схеме кодирования 1-of-K предсказания $y_k(\mathbf{x})$ для разных классов при любом $\mathbf{x}$ будут давать в сумме 1. Почему они всё-таки не будут разумными оценками вероятностей?

- Проблемы наименьших квадратов:
  - outliers плохо обрабатываются;
  - «слишком правильные» предсказания добавляют штраф.

Проблемы наименьших квадратов



Проблемы наименьших квадратов



Проблемы наименьших квадратов

- Почему так? Почему наименьшие квадраты так плохо работают?

Проблемы наименьших квадратов

- Почему так? Почему наименьшие квадраты так плохо работают?
- Они предполагают гауссовское распределение ошибки.
- Но, конечно, распределение у бинарных векторов далеко не гауссово.

Линейный дискриминант Фишера

Линейный дискриминант Фишера

- Другой взгляд на классификацию: в линейном случае мы хотим спроецировать точки в размерность 1 (на нормаль разделяющей гиперплоскости) так, чтобы в этой размерности 1 они хорошо разделялись.
- Т.е. классификация – это такой метод радикального сокращения размерности.
- Давайте посмотрим на классификацию с этих позиций и попробуем добиться оптимальности в каком-то смысле.

Линейный дискриминант Фишера

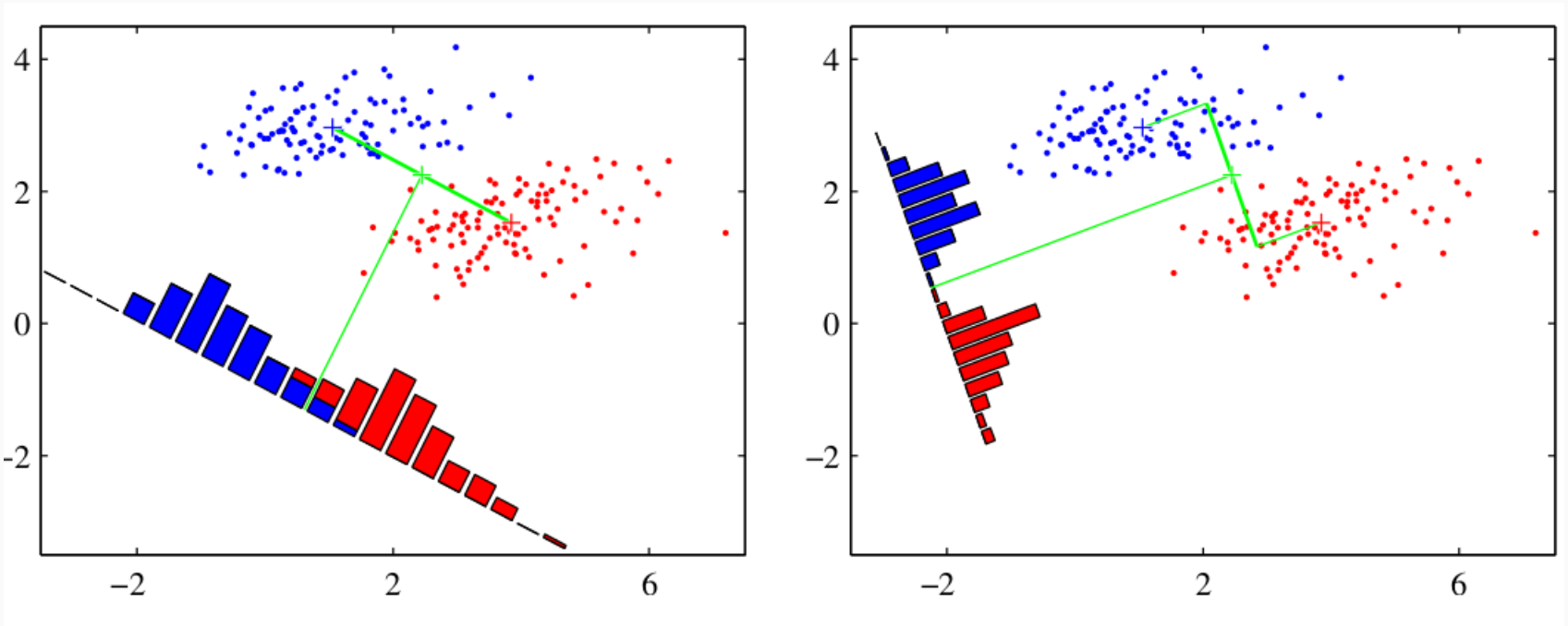
- Рассмотрим два класса C_1 и C_2 с N_1 и N_2 точками.
- Первая идея – надо найти серединный перпендикуляр между центрами кластеров

$$\mathbf{m}_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{C_1}\mathbf{x}, \text{ и } \mathbf{m}_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{C_2}\mathbf{x},$$

т.е. максимизировать $\mathbf{w}^\top(\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1)$.

- Надо ещё добавить ограничение $\|\mathbf{w}\| = 1$, но всё равно не ахти как работает.

Линейный дискриминант Фишера



Чем левая картинка хуже правой?

Линейный дискриминант Фишера

- Слева больше дисперсия каждого кластера.
- Идея: минимизировать перекрытие классов, оптимизируя и проекцию расстояния, и дисперсию.
- Выборочные дисперсии в проекции: для $y_n = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n$

$$s_1 = \sum_{n \in C_1} (y_n - m_1)^2 \text{ и } s_1 = \sum_{n \in C_2} (y_n - m_2)^2.$$

Линейный дискриминант Фишера

- Критерий Фишера:

$$J(\mathbf{w}) = \frac{(m_2 - m_1)^2}{s_1^2 + s_2^2} = \frac{\mathbf{w}^\top \mathbf{S}_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^\top \mathbf{S}_W \mathbf{w}}, \text{ где}$$

$$\mathbf{S}_B = (\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1)(\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1)^\top,$$

$$\mathbf{S}_W = \sum_{n \in C_1} (\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_1)(\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_1)^\top + \sum_{n \in C_2} (\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_2)(\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_2)^\top.$$

(between-class covariance и within-class covariance).

- Дифференцируя по $\mathbf{w}$...

Линейный дискриминант Фишера

- ...получим, что $J(\mathbf{w})$ максимален при

$$\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{S}_B \mathbf{w}\right) \mathbf{S}_W \mathbf{w} = \left(\mathbf{w}^\top \mathbf{S}_W \mathbf{w}\right) \mathbf{S}_B \mathbf{w}.$$

- Т.к. $\mathbf{S}_B = (\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1)(\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1)^\top$, $\mathbf{S}_B \mathbf{w}$ всё равно будет в направлении $\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1$, а длина $\mathbf{w}$ нас не интересует.
- Поэтому получается

$$\mathbf{w} \propto \mathbf{S}_W^{-1} (\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1).$$

- В итоге мы выбрали направление проекции, и осталось только разделить данные на этой проекции.

Линейный дискриминант Фишера

- Любопытно, что дискриминант Фишера тоже можно получить из наименьших квадратов.
- Давайте для класса C_1 выберем целевое значение $\frac{N_1+N_2}{N_1}$, а для класса C_2 возьмём $-\frac{N_1+N_2}{N_2}$.

Упражнение. Докажите, что при таких целевых значениях наименьшие квадраты – это дискриминант Фишера.

Линейный дискриминант Фишера

- А что будет с несколькими классами? Рассмотрим $\mathbf{y} = \mathbf{W}^\top \mathbf{x}$, обобщим внутреннюю дисперсию как

$$\mathbf{S}_W = \sum_{k=1}^{K} \mathbf{S}_k = \sum_{k=1}^{K} \sum_{n \in C_k} (\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_k) (\mathbf{x}_n - \mathbf{m}_k)^\top .$$

- Чтобы обобщить внешнюю (межклассовую) дисперсию, просто возьмём остаток полной дисперсии

$$\mathbf{S}_T = \sum_{n} (\mathbf{x}_n - \mathbf{m}) (\mathbf{x}_n - \mathbf{m})^\top ,$$

$$\mathbf{S}_B = \mathbf{S}_T - \mathbf{S}_W .$$

Линейный дискриминант Фишера

- Обобщить критерий можно разными способами, например:

$$J(\mathbf{W}) = \mathrm{Tr}\left[\mathbf{s}_W^{-1}\mathbf{s}_B\right],$$

где $\mathbf{s}$ – ковариации в пространстве проекций на $\mathbf{y}$:

$$\mathbf{s}_W = \sum_{k=1}^{K} \sum_{n \in C_k} \left(\mathbf{y}_n - \mu_k\right)\left(\mathbf{y}_n - \mu_k\right)^\top,$$

$$\mathbf{s}_B = \sum_{k=1}^{K} N_k \left(\mu_k - \mu\right)\left(\mu_k - \mu\right)^\top,$$

где $\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n \in C_k} \mathbf{y}_n$.

Спасибо за внимание!