МЕТОДЫ КЛАССИФИКАЦИИ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

04 октября 2023 г.

Random facts:

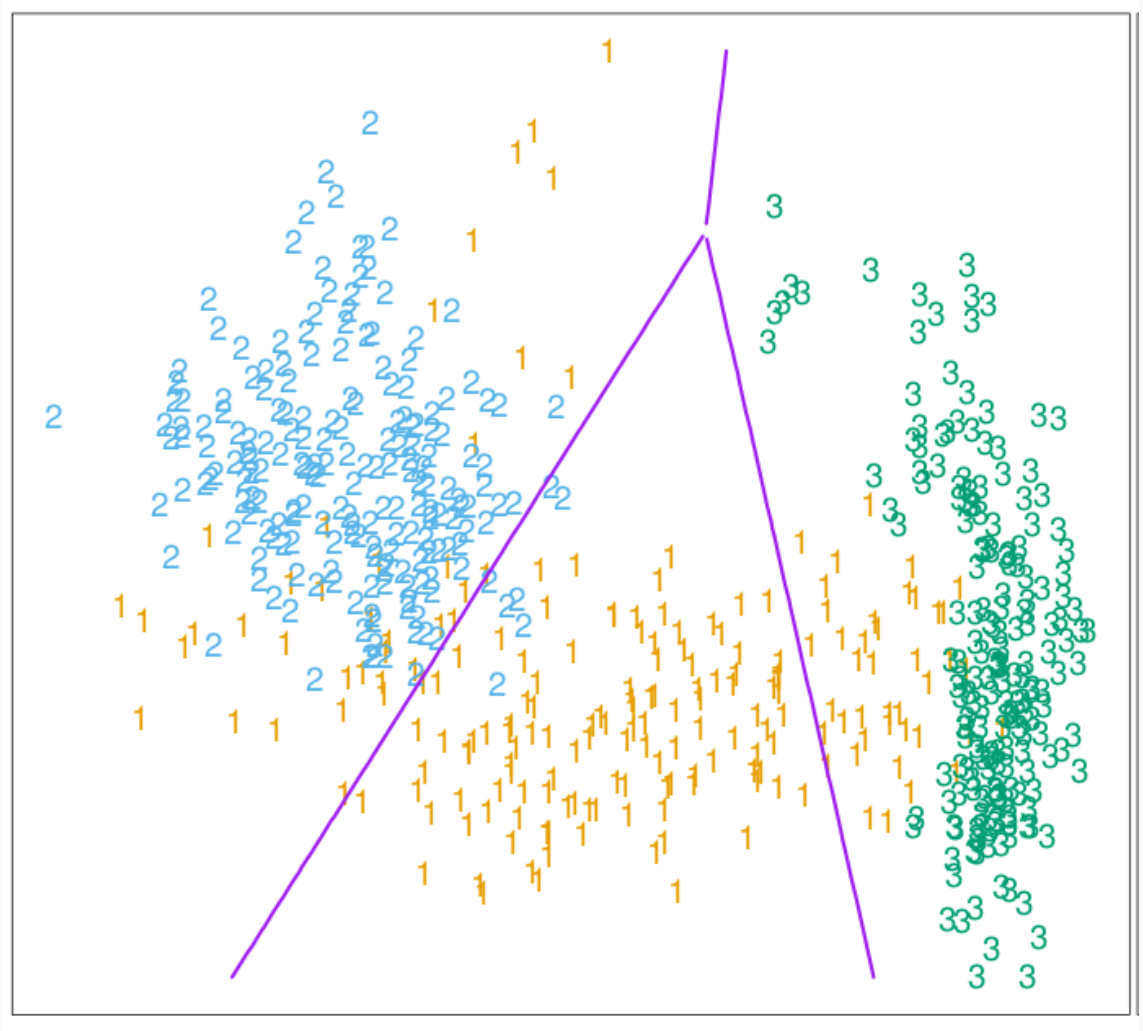
- 4 октября в Швеции — День булочек с корицей (cinnamon roll), придуманный в 1999 году для рекламы шведских традиций выпечки
- 4 октября 1535 г. появилась Coverdale Bible, первая в истории Библия, напечатанная на английском языке, и первый полный перевод Библии на Modern English
- 4 октября 1965 г., во время первого в истории визита папы римского в США, Павел VI издал буллу, в которой с евреев снимались обвинения в смерти Иисуса Христа
- 4 октября 1957 г. на орбиту был запущен первый искусственный спутник Земли; «Спутник-1» имел массу 83.6 кг и диаметр 58 см, за 92 дня совершил 1440 оборотов (около 60 млн км), а 4 января 1958 г. вошёл в плотные слои атмосферы и сгорел
- 4 октября 1993 г. президент России Борис Ельцин для осуществления своего указа о роспуске Верховного Совета ввёл бронетанковые войска в Москву и осуществил штурм здания парламента
- 4 октября 1995 г. в Японии начата телевизионная трансляция сериала «Евангелион», ставшего одним из главных аниме-сериалов в истории

LDA и QDA

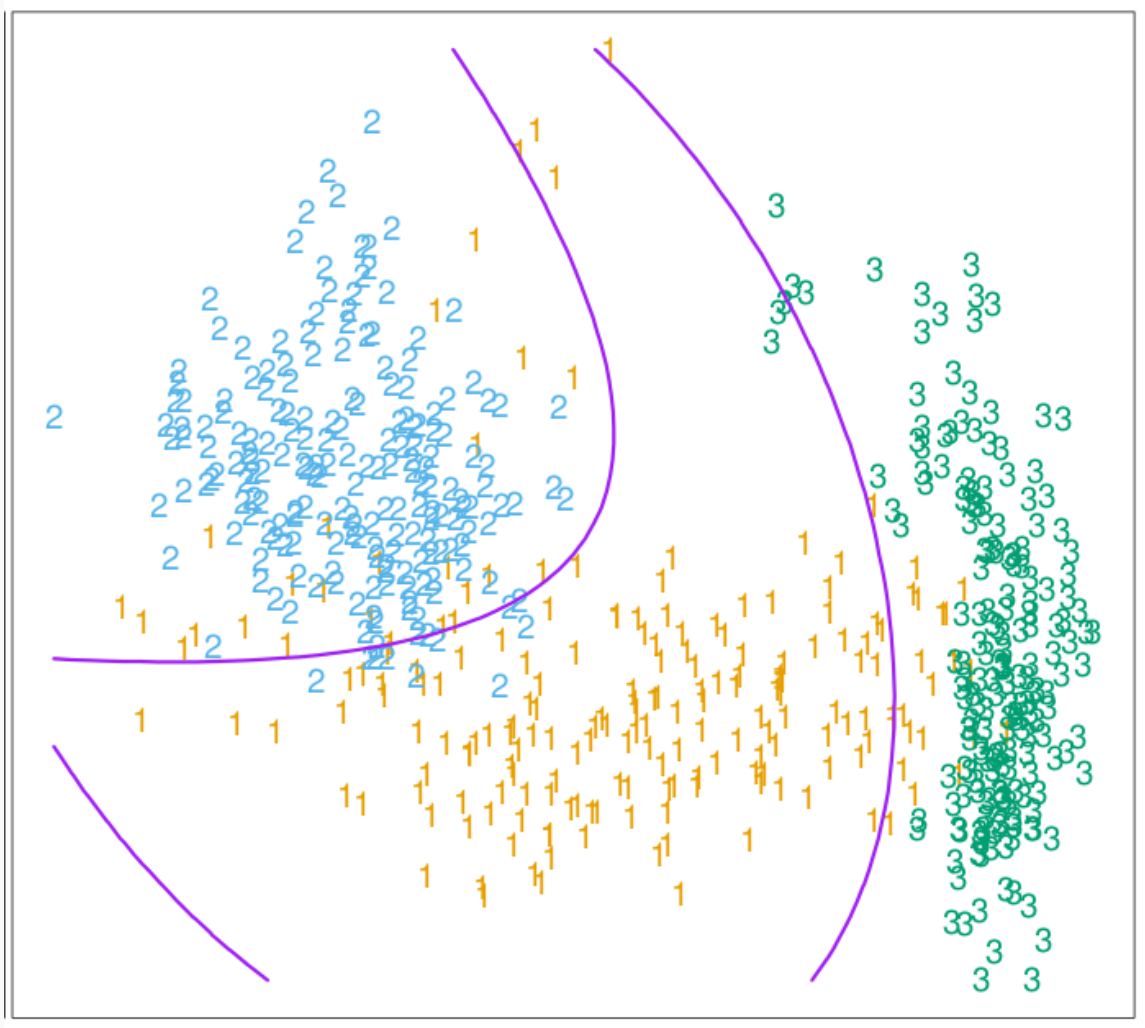
Нелинейные поверхности

- Мы учились проводить разделяющие гиперплоскости.
- Но как же нелинейные поверхности?
- Можно делать нелинейные из линейных, увеличивая размерность.

Нелинейные поверхности



Нелинейные поверхности



Порождающие модели

- Теперь классификация через порождающие модели: давайте каждому классу сопоставим плотность $p(\mathbf{x} \mid C_k)$, найдём априорные распределения $p(C_k)$, будем искать $p(C_k \mid \mathbf{x})$ по теореме Байеса.
- Для двух классов:

$$p(C_1 \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1)}{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1) + p(\mathbf{x} \mid C_2)p(C_2)}.$$

Порождающие модели

- Перепишем:

$$p(C_1 \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1)}{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1) + p(\mathbf{x} \mid C_2)p(C_2)} = \frac{1}{1 + e^{-a}} = \sigma(a),$$

где

$$a = \ln \frac{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1)}{p(\mathbf{x} \mid C_2)p(C_2)}, \qquad \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}.$$

Порождающие модели

- $\sigma(a)$ – *логистический сигмоид*:

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

- $\sigma(-a) = 1 - \sigma(a)$.
- $a = \ln\left(\frac{\sigma}{1-\sigma}\right)$ – *логит-функция*.

Упражнение. Докажите эти свойства.

Несколько классов

- В случае нескольких классов получится

$$p(C_k \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid C_k)p(C_k)}{\sum_j p(\mathbf{x} \mid C_j)p(C_j)} = \frac{e^{a_k}}{\sum_j e^{a_j}}.$$

- Здесь $a_k = \ln p(\mathbf{x} \mid C_k)p(C_k)$.
- $\frac{e^{a_k}}{\sum_j e^{a_j}}$ – нормализованная экспонента, или softmax-функция (сглаженный максимум).

Пример

- Давайте рассмотрим гауссовы распределения для классов:

$$p(\mathbf{x} \mid C_k) = N(\mathbf{x} \mid \mu_k, \Sigma).$$

- Сначала пусть Σ у всех одинаковые, а классов всего два.
- Посчитаем логистический сигмоид...

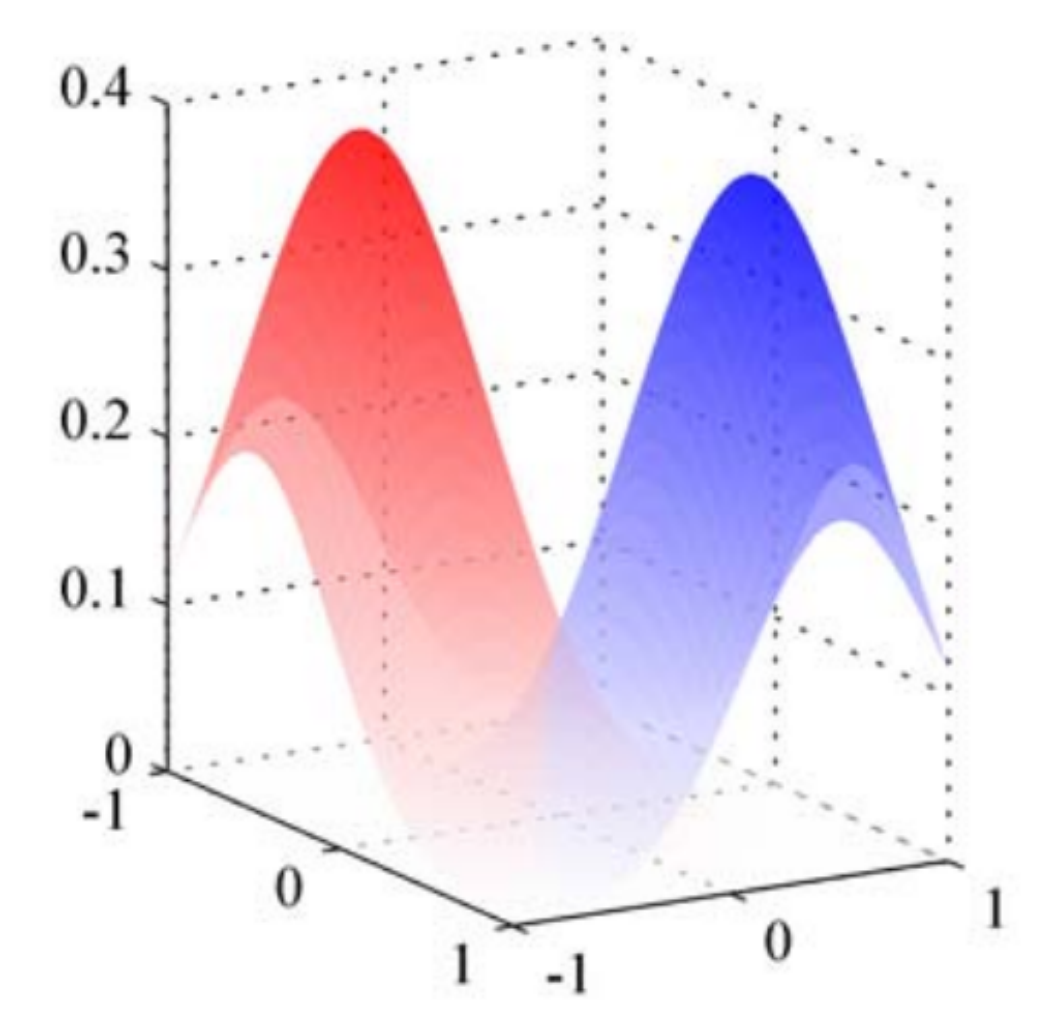
Пример

- ...получится

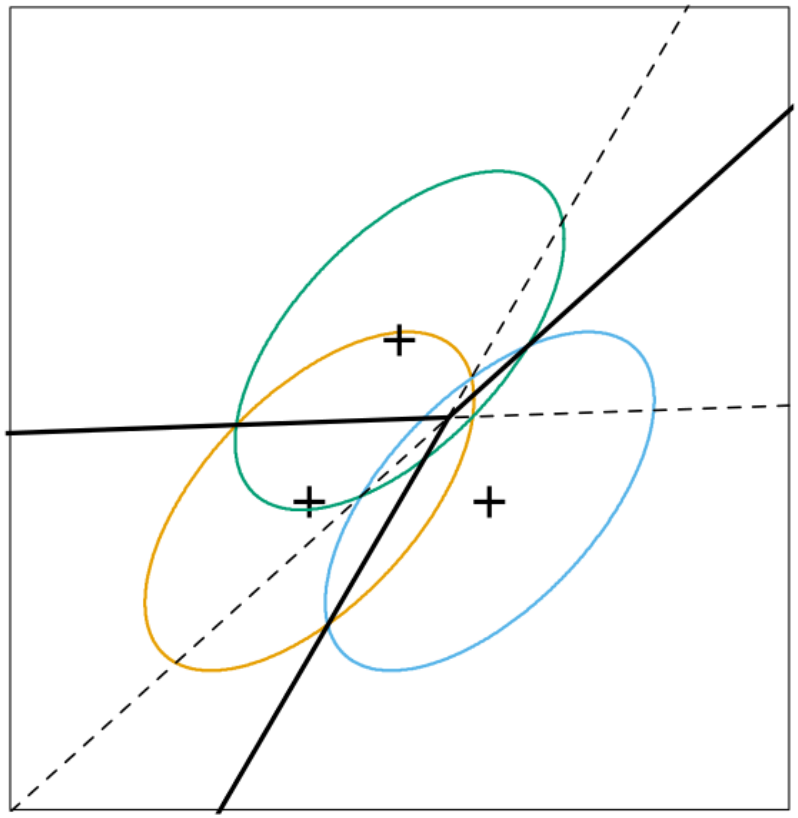
$$p(C_1 \mid \mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0), \text{ где}$$
$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1}\left(\mu_1 - \mu_2\right),$$
$$w_0 = -\frac{1}{2}\mu_1^\top \Sigma^{-1}\mu_1 + \frac{1}{2}\mu_2^\top \Sigma^{-1}\mu_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)}.$$

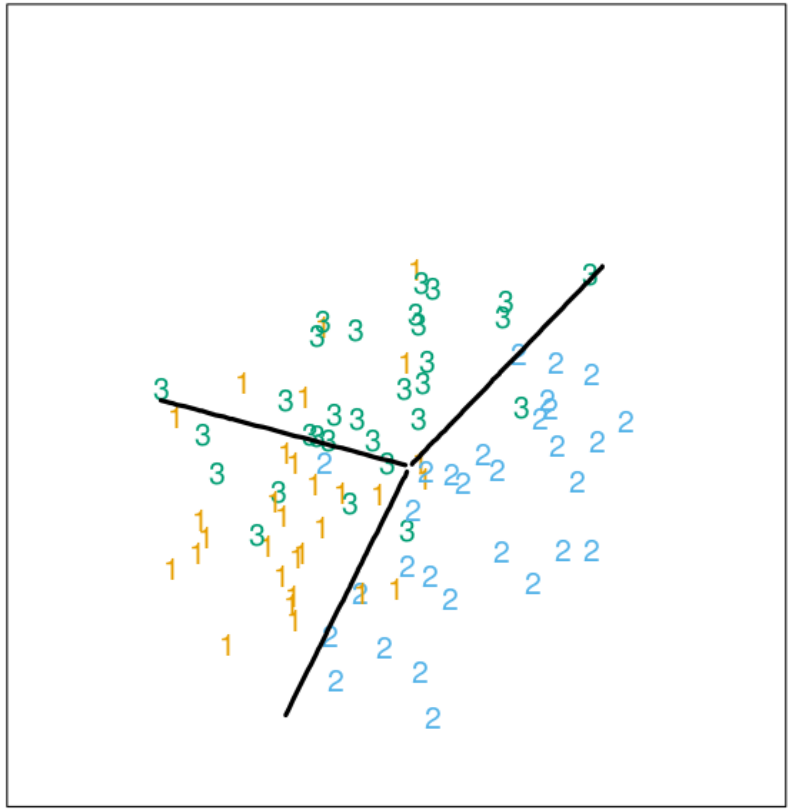
- Т.е. в аргументе сигмоида получается линейная функция от $\mathbf{x}$. Поверхности уровня – это когда $p(C_1 \mid \mathbf{x})$ постоянно, т.е. гиперплоскости в пространстве $\mathbf{x}$. Априорные вероятности $p(C_k)$ просто сдвигают эти гиперплоскости.

Разделяющая гиперплоскость



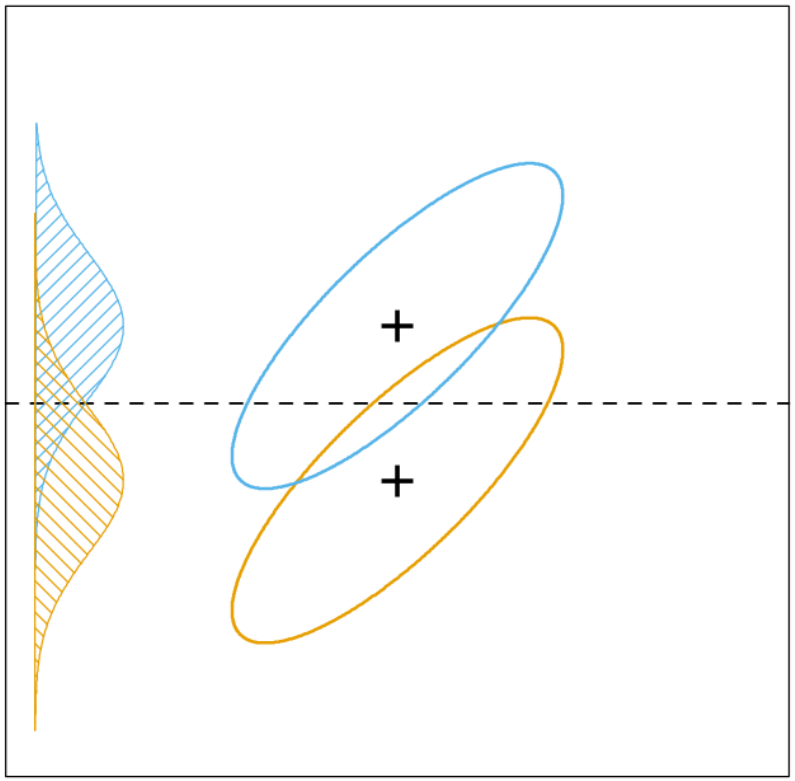
Разделяющая гиперплоскость

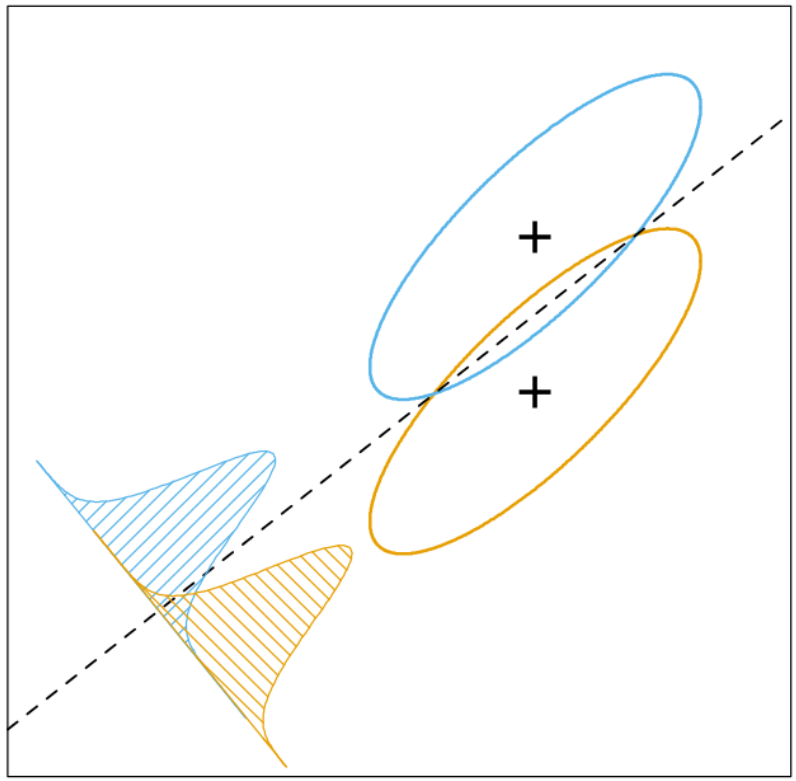




Дискриминант Фишера

Кстати, с дискриминантом Фишера эта разделяющая поверхность отлично сходится.





Несколько классов

- С несколькими классами получится тоже примерно так же:

$$\delta_k(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^\top \Sigma^{-1} \mu_k + \ln \pi_k,$$

  где $\pi_k = p(C_k)$.
- Получились линейные $\delta_k(\mathbf{x})$, и опять разделяющие поверхности линейные (тут разделяющие поверхности – когда две максимальных вероятности равны).
- Этот метод называется LDA – linear discriminant analysis.

Метод максимального правдоподобия

- Как оценить распределения $p(\mathbf{x} \mid C_k)$, если даны только данные?
- Можно по методу максимального правдоподобия.
- Опять рассмотрим тот же пример: два класса, гауссианы с одинаковой матрицей ковариаций, и есть $D = \{\mathbf{x}_n, t_n\}_{n=1}^N$, где $t_n = 1$ значит C_1, $t_n = 0$ значит C_2.
- Обозначим $p(C_1) = \pi$, $p(C_2) = 1 - \pi$.

Метод максимального правдоподобия

- Для одной точки в классе C_1:

$$p(\mathbf{x}_n, C_1) = p(C_1)p(\mathbf{x}_n \mid C_1) = \pi N(\mathbf{x}_n \mid \mu_1, \Sigma).$$

- В классе C_2:

$$p(\mathbf{x}_n, C_2) = p(C_2)p(\mathbf{x}_n \mid C_2) = (1-\pi) N(\mathbf{x}_n \mid \mu_2, \Sigma).$$

- Функция правдоподобия:

$$p(\mathbf{t} \mid \pi, \mu_1, \mu_2, \Sigma) = \\ = \prod_{n=1}^{N} \left[\pi N(\mathbf{x}_n \mid \mu_1, \Sigma)\right]^{t_n} \left[(1-\pi) N(\mathbf{x}_n \mid \mu_2, \Sigma)\right]^{1-t_n}.$$

Метод максимального правдоподобия

- Максимизируем логарифм правдоподобия. Сначала по π, там останется только

$$\sum_{n=1}^{N} \left[t_n \ln \pi + (1 - t_n) \ln(1 - \pi) \right],$$

и, взяв производную, получим, совершенно неожиданно,

$$\hat{\pi} = \frac{N_1}{N_1 + N_2}.$$

Метод максимального правдоподобия

- Теперь по μ_1; всё, что зависит от μ_1:

$$\sum_n t_n \ln N(\mathbf{x}_n \mid \mu_1, \Sigma) = -\frac{1}{2} \sum_n t_n \left(\mathbf{x}_n - \mu_1\right)^\top \Sigma^{-1} \left(\mathbf{x}_n - \mu_1\right) + C.$$

- Берём производную, и получается, опять внезапно,

$$\hat{\mu}_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{n=1}^{N} t_n \mathbf{x}_n.$$

- Аналогично,

$$\hat{\mu}_2 = \frac{1}{N_2} \sum_{n=1}^{N} (1 - t_n) \mathbf{x}_n.$$

Метод максимального правдоподобия

- Для матрицы ковариаций придётся постараться; в результате получится

$$\hat{\Sigma} = \frac{N_1}{N_1 + N_2}\mathbf{S}_1 + \frac{N_2}{N_1 + N_2}\mathbf{S}_2, \text{ где}$$

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{n \in C_1}(\mathbf{x}_n - \mu_1)(\mathbf{x}_n - \mu_1)^\top,$$

$$\mathbf{S}_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{n \in C_2}(\mathbf{x}_n - \mu_2)(\mathbf{x}_n - \mu_2)^\top.$$

- Тоже совершенно неожиданно: взвешенное среднее оценок для двух матриц ковариаций.

Метод максимального правдоподобия

- Это самым прямым образом обобщается на случай нескольких классов.

Упражнение. Сделайте это.

Разные матрицы ковариаций

- А вот с разными матрицами ковариаций уже будет по-другому.
- Квадратичные члены не сократятся.
- Разделяющие поверхности станут квадратичными; QDA – quadratic discriminant analysis.

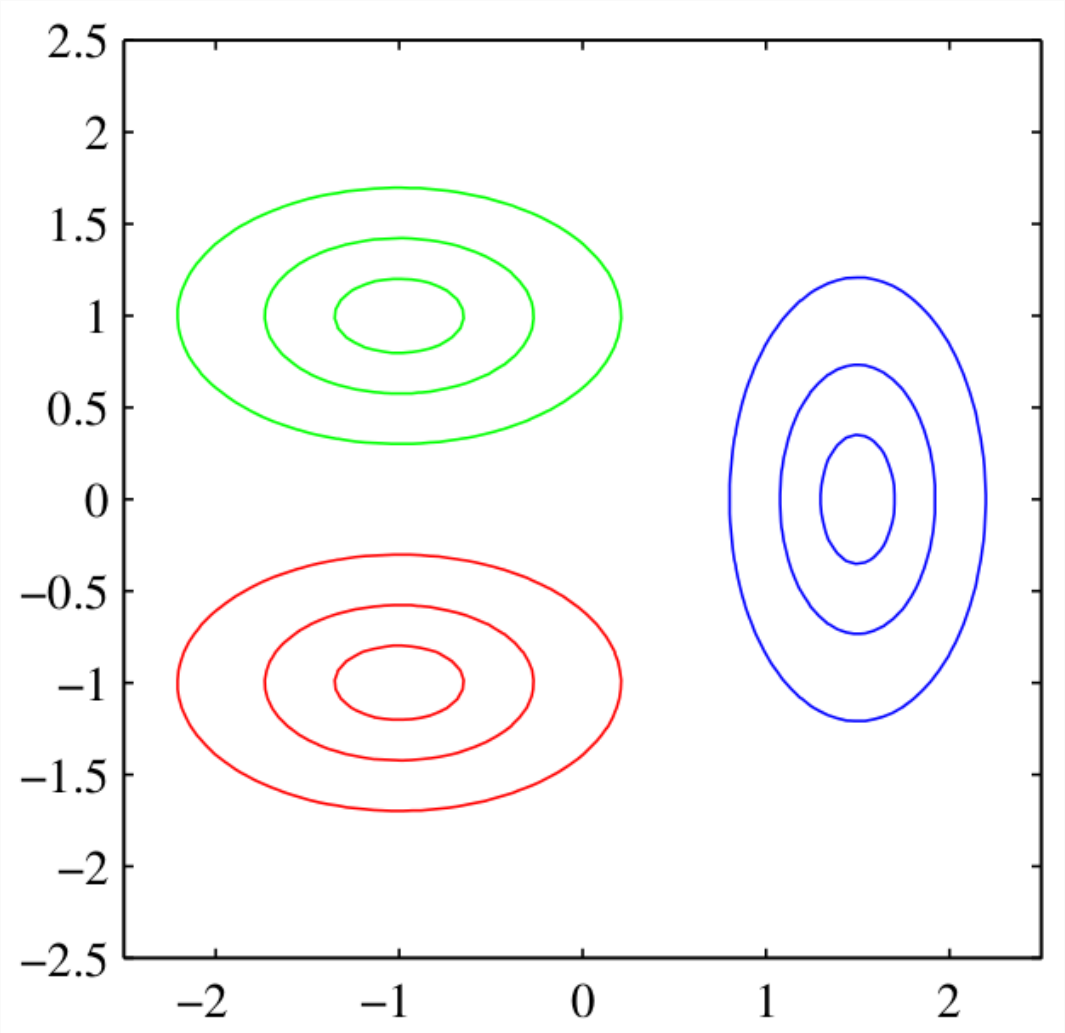
Разные матрицы ковариаций

- В QDA получится

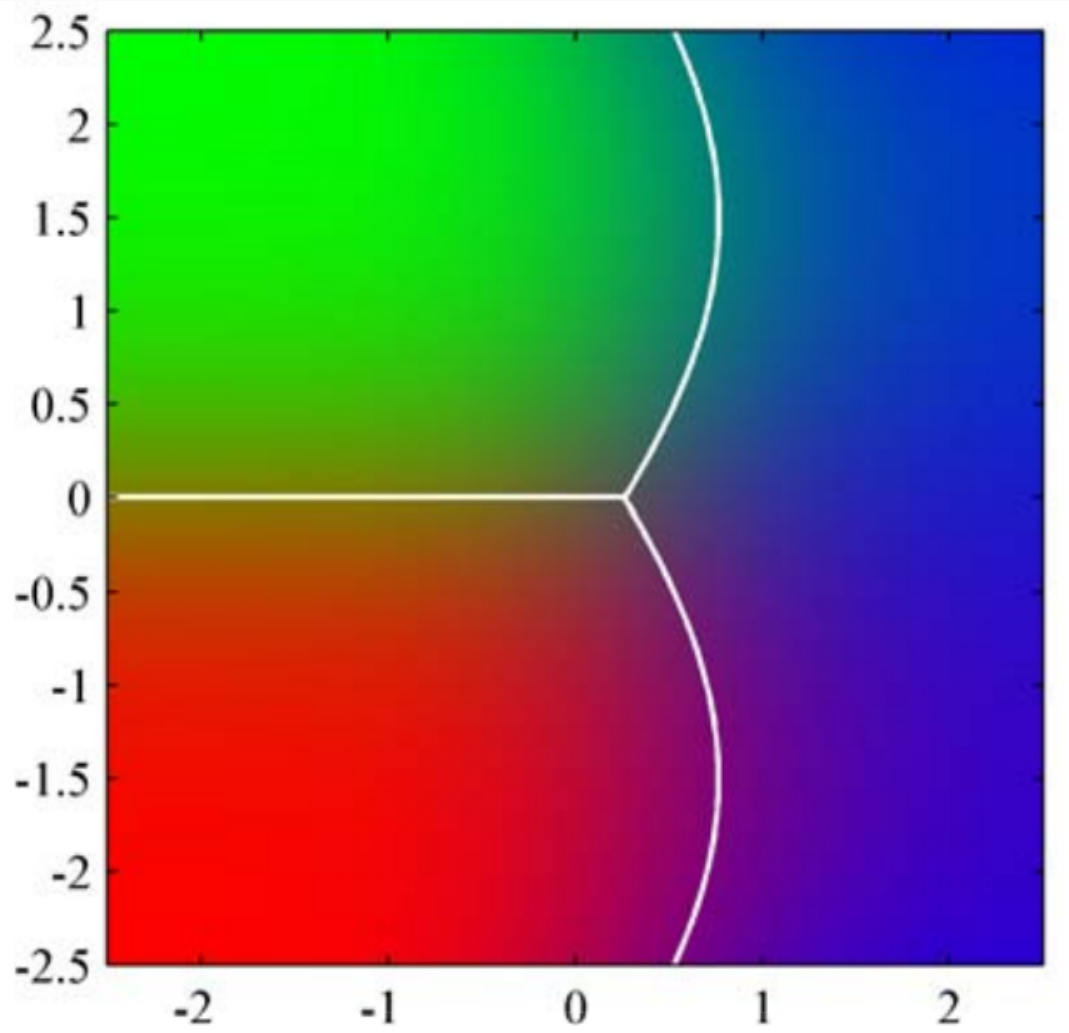
$$\delta_k(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\log|\Sigma_k| - \frac{1}{2}\left(\mathbf{x}-\mu_k\right)^{-1}\Sigma_k^{-1}\left(\mathbf{x}-\mu_k\right) + \log\pi_k.$$

- Разделяющая поверхность между C_i и C_j – это $\{\mathbf{x} \mid \delta_i(\mathbf{x}) = \delta_j(\mathbf{x})\}$.
- Оценки максимального правдоподобия такие же, только надо отдельно матрицы ковариаций оценивать.

Разные матрицы ковариаций

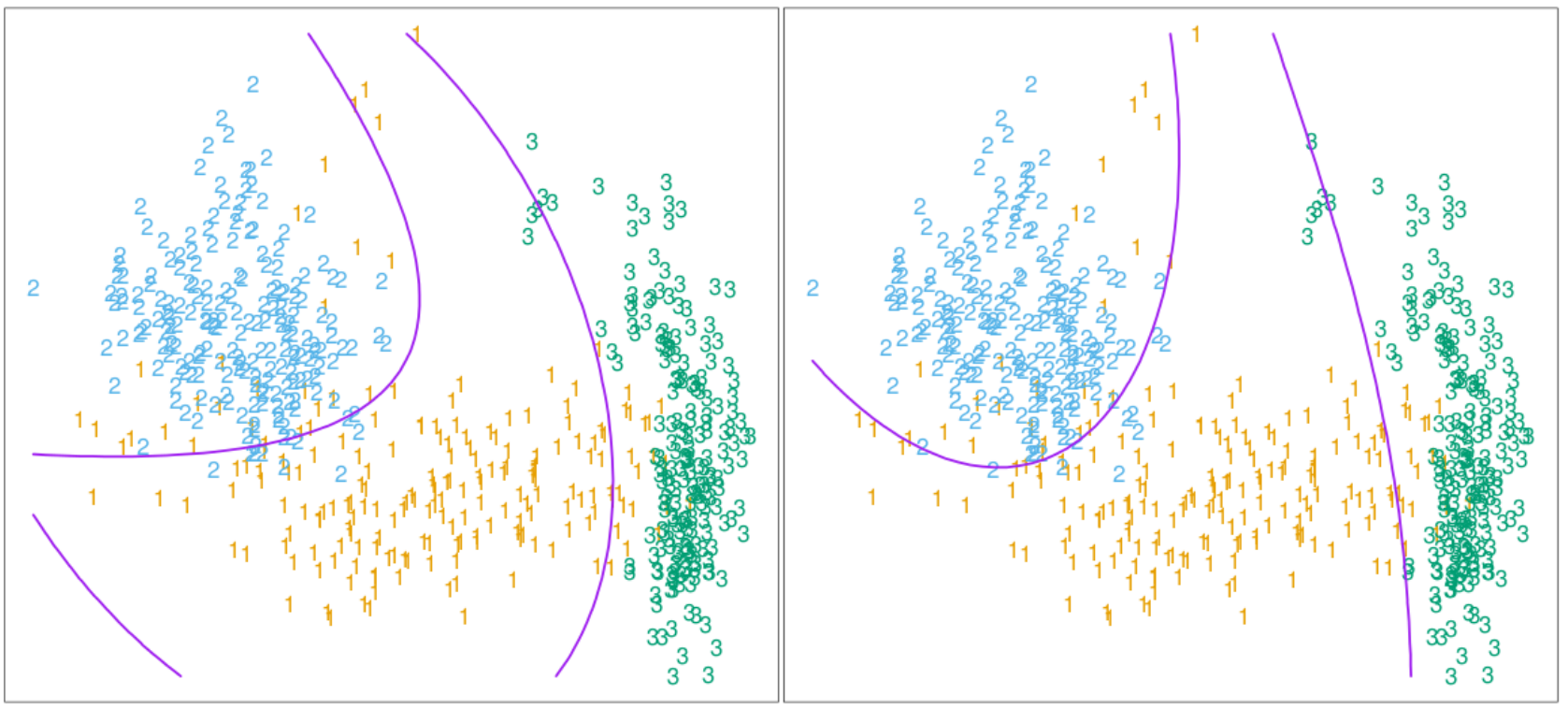


Разные матрицы ковариаций



LDA vs. QDA

Разница между LDA с квадратичными членами и QDA обычно невелика.



LDA vs. QDA

- LDA и QDA неплохо работают на практике. Часто это первая идея в классификации.
- Число параметров:
  - у LDA $(K-1)(d+1)$ параметр: по $d+1$ на каждую разницу вида $\delta_k(\mathbf{x}) - \delta_K(\mathbf{x})$;
  - у QDA $(K-1)(d(d+3)/2+1)$ параметр, но он выглядит гораздо лучше своих лет.

LDA vs. QDA

- Почему хорошо работают?
- Скорее всего, потому, что линейные и квадратичные оценки достаточно стабильны: даже если bias относительно большой (как будет, если данные всё-таки не гауссианами порождены), variance будет маленькой.

RDA

- Компромисс между LDA и QDA – регуляризованный дискриминантный анализ, RDA.
- Стянем ковариации каждого класса к общей матрице ковариаций:

$$\hat{\Sigma}_k(\alpha) = \alpha\hat{\Sigma}_k + (1-\alpha)\hat{\Sigma},$$

  где $\hat{\Sigma}_k$ – оценка из QDA, $\hat{\Sigma}$ – оценка из LDA.
- Или стянем к единичной матрице:

$$\hat{\Sigma}_k(\gamma) = \gamma\hat{\Sigma}_k + (1-\gamma)\hat{\sigma}^2\mathbf{I}.$$

Снижение ранга в LDA

- Предположим, что размерность d больше, чем число классов K.
- Тогда центроиды классов $\hat{\mu}_k$ лежат в подпространстве размерности $\leq K - 1$.
- И когда мы определяем ближайший центроид, нам достаточно считать расстояния только в этом подпространстве.
- Таким образом, можно сократить ранг задачи.

Снижение ранга в LDA

- Куда именно проецировать? Не обязательно само подпространство, порождённое центроидами, будет оптимальным.
- Это мы уже проходили: для размерности 1 это линейный дискриминант Фишера.
- Это он и есть: оптимальное подпространство будет там, где межклассовая дисперсия максимальна по отношению к внутриклассовой.

Логистическая регрессия

В прошлый раз

- Итак, мы рассмотрели логистический сигмоид:

$$p(C_1 \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1)}{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1) + p(\mathbf{x} \mid C_2)p(C_2)} = \frac{1}{1 + e^{-a}} = \sigma(a),$$

$$\text{где } a = \ln \frac{p(\mathbf{x} \mid C_1)p(C_1)}{p(\mathbf{x} \mid C_2)p(C_2)}, \qquad \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}.$$

- Вывели из него LDA и QDA, обучив их методом максимального правдоподобия.

Два класса

- Два класса, и апостериорное распределение – логистический сигмоид на линейной функции:

$$p(C_1 \mid \phi) = y(\phi) = \sigma(\mathbf{w}^\top \phi), \quad p(C_2 \mid \phi) = 1 - p(C_1 \mid \phi).$$

- *Логистическая регрессия* – это когда мы напрямую оптимизируем $\mathbf{w}$.

Два класса

- Для датасета $\{\phi_n, t_n\}$, $t_n \in \{0, 1\}$, $\phi_n = \phi(\mathbf{x}_n)$:

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}) = \prod_{n=1}^{N} y_n^{t_n} (1 - y_n)^{1 - t_n}, \quad y_n = p(C_1 \mid \phi_n).$$

- Ищем параметры максимального правдоподобия, минимизируя $-\ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w})$:

$$E(\mathbf{w}) = -\ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^{N} \left[t_n \ln y_n + (1 - t_n) \ln(1 - y_n) \right].$$

Два класса

- Пользуясь тем, что $\sigma' = \sigma(1 - \sigma)$, берём градиент (похоже на перцептрон):

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} (y_n - t_n)\phi_n.$$

- Если теперь сделать градиентный спуск, получим как раз разделяющую поверхность.
- Заметим, правда, что если данные действительно разделимы, то может получиться жуткий оверфиттинг: $\|\mathbf{w}\| \to \infty$, и сигмоид превращается в функцию Хевисайда. Надо регуляризовать.

IRLS

- В логистической регрессии не получается замкнутого решения из-за сигмоида.
- Но функция $E(\mathbf{w})$ всё равно выпуклая, и можно воспользоваться методом Ньютона-Рапсона – на каждом шаге использовать локальную квадратичную аппроксимацию к функции ошибки:

$$\mathbf{w}^{\text{new}} = \mathbf{w}^{\text{old}} - \mathbf{H}^{-1}\nabla E(\mathbf{w}),$$

где $\mathbf{H}$ (Hessian) – матрица вторых производных $E(\mathbf{w})$.

IRLS

- Замечание: давайте применим Ньютона-Рапсона к обычной линейной регрессии с квадратической ошибкой:

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} \left(\mathbf{w}^\top \phi_n - t_n\right) \phi_n = \Phi^\top \Phi \mathbf{w} - \Phi^\top \mathbf{t},$$

$$\nabla\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} \phi_n \phi_n^\top = \Phi^\top \Phi,$$

и шаг оптимизации будет

$$\mathbf{w}^{\text{new}} = \mathbf{w}^{\text{old}} - \left(\Phi^\top \Phi\right)^{-1} \left[\Phi^\top \Phi \mathbf{w}^{\text{old}} - \Phi^\top \mathbf{t}\right] = \\ = \left(\Phi^\top \Phi\right)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t},$$

т.е. мы за один шаг придём к решению.

IRLS

- Для логистической регрессии:

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} (y_n - t_n)\,\phi_n = \Phi^\top (\mathbf{y} - \mathbf{t})\,,$$

$$\mathbf{H} = \nabla\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} y_n(1 - y_n)\phi_n\phi_n^\top = \Phi^\top R\Phi$$

для диагональной матрицы R с $R_{nn} = y_n(1 - y_n)$.

IRLS

- Формула шага оптимизации:

$$\mathbf{w}^{\text{new}} = \mathbf{w}^{\text{old}} - \left(\Phi^\top R \Phi\right)^{-1} \Phi^\top (\mathbf{y} - \mathbf{t}) = \left(\Phi^\top R \Phi\right)^{-1} \Phi^\top R \mathbf{z},$$

  где $\mathbf{z} = \Phi \mathbf{w}^{\text{old}} - R^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{t})$.
- Получилось как бы решение взвешенной задачи минимизации квадратического отклонения с матрицей весов R.
- Отсюда название: iterative reweighted least squares (IRLS).

Несколько классов

- В случае нескольких классов

$$p(C_k \mid \phi) = y_k(\phi) = \frac{e^{a_k}}{\sum_j e^{a_j}} \text{ для } a_k = \mathbf{w}_k^\top \phi.$$

- Опять выпишем максимальное правдоподобие; во-первых,

$$\frac{\partial y_k}{\partial a_j} = y_k \left([k = j] - y_j \right).$$

Несколько классов

- Теперь запишем правдоподобие – для схемы кодирования 1-of-K будет целевой вектор $\mathbf{t}_n$ и правдоподобие

$$p(\mathbf{T} \mid \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} p(C_k \mid \phi_n)^{t_{nk}} = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} y_{nk}^{t_{nk}}$$

для $y_{nk} = y_k(\phi_n)$; берём логарифм:

$$E(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = -\ln p(\mathbf{T} \mid \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = -\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{nk} \ln y_{nk}, \text{ и}$$

$$\nabla_{\mathbf{w}_j} E(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = -\sum_{n=1}^{N} \left(y_{nj} - t_{nj}\right) \phi_n.$$

Несколько классов

- Оптимизировать опять можно по Ньютону-Рапсону; гессиан получится как

$$\nabla_{\mathbf{w}_k} \nabla_{\mathbf{w}_j} E(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = -\sum_{n=1}^{N} y_{nk} \left([k = j] - y_{nj} \right) \phi_n \phi_n^\top.$$

Пробит-регрессия

- А что если у нас другая форма сигмоида?
- Мы по-прежнему в той же постановке: два класса, $p(t = 1 \mid a) = f(a)$, $a = \mathbf{w}^\top \phi$, f – функция активации.
- Давайте установим функцию активации с порогом θ: для каждого ϕ_n, вычисляем $a_n = \mathbf{w}^\top \phi_n$, и

$$\begin{cases} t_n = 1, & \text{если } a_n \geq \theta, \\ t_n = 0, & \text{если } a_n < \theta. \end{cases}$$

Пробит-регрессия

- Если θ берётся по распределению $p(\theta)$, это соответствует

$$f(a) = \int_{-\infty}^{a} p(\theta)\mathrm{d}\theta.$$

- Пусть, например, $p(\theta)$ – гауссиан с нулевым средним и единичной дисперсией. Тогда

$$f(a) = \Phi(a) = \int_{-\infty}^{a} N\left(\theta \mid 0, 1\right)\mathrm{d}\theta.$$

Пробит-регрессия

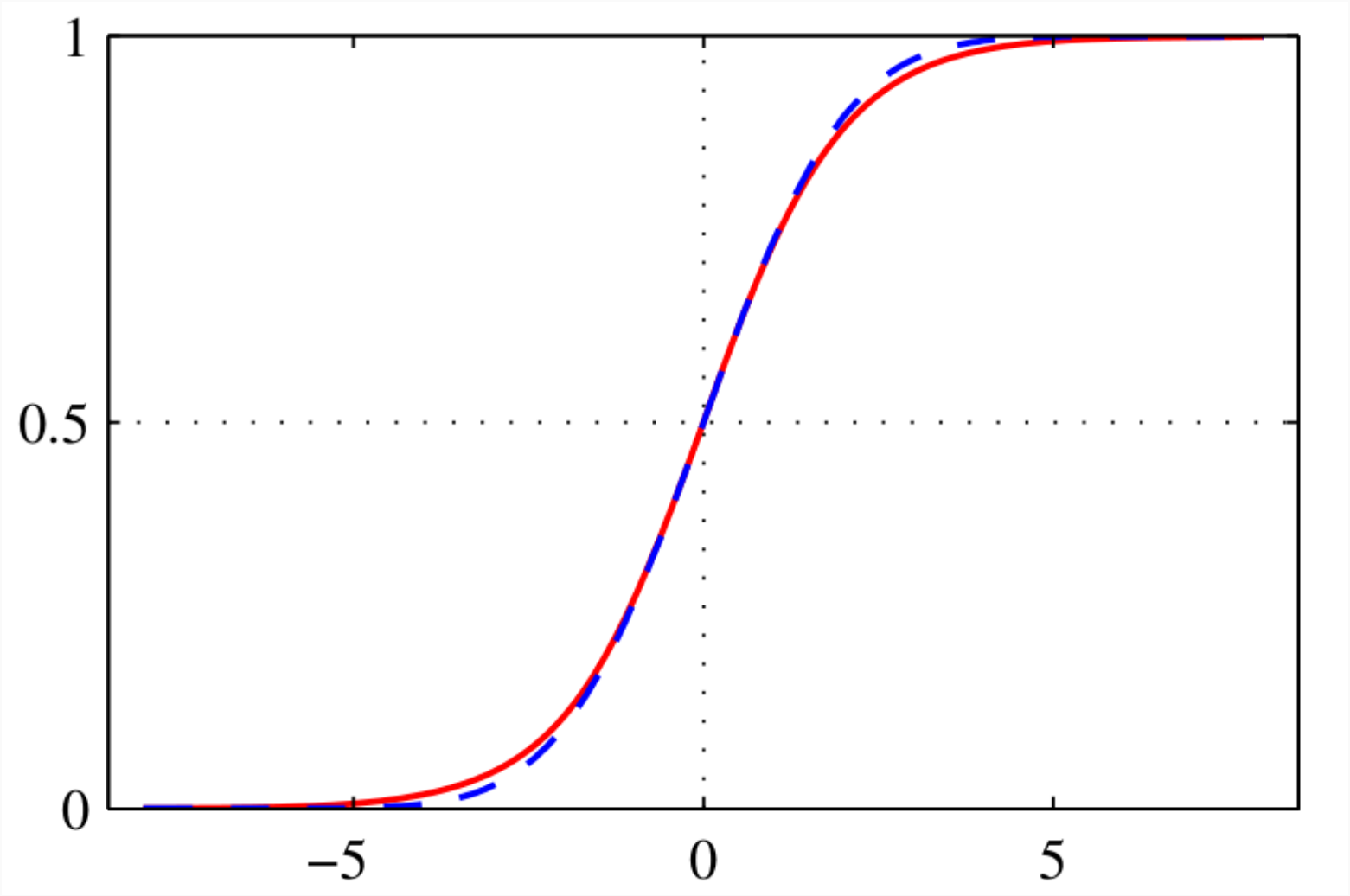
- Это называется *пробит-функцией* (probit); неэлементарная, но тесно связана с

$$\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-\frac{\theta^2}{2}} \mathrm{d}\theta :$$

$$\Phi(a) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{erf}(a)\right].$$

- Пробит-регрессия – это модель с пробит-функцией активации.

σ и Φ



Лапласовская аппроксимация и байесовская логистическая регрессия

Лапласовская аппроксимация

- Небольшое лирическое отступление: как приблизить сложное распределение простым?
- Например, как приблизить гауссианом возле максимума? (естественная задача)
- Рассмотрим пока распределение от одной непрерывной переменной $p(z) = \frac{1}{Z} f(z)$.

Лапласовская аппроксимация

- Первый шаг: найдём максимум z_0.
- Второй шаг: разложим в ряд Тейлора

$$\ln f(z) \approx \ln f(z_0) - \frac{1}{2} A(z - z_0)^2, \text{ где } A = -\frac{d^2}{dz^2} \ln f(z) \mid_{z=z_0} .$$

- Третий шаг: приблизим

$$f(z) \approx f(z_0) e^{-\frac{A}{2}(z-z_0)^2},$$

и после нормализации это будет как раз гауссиан.

Лапласовская аппроксимация

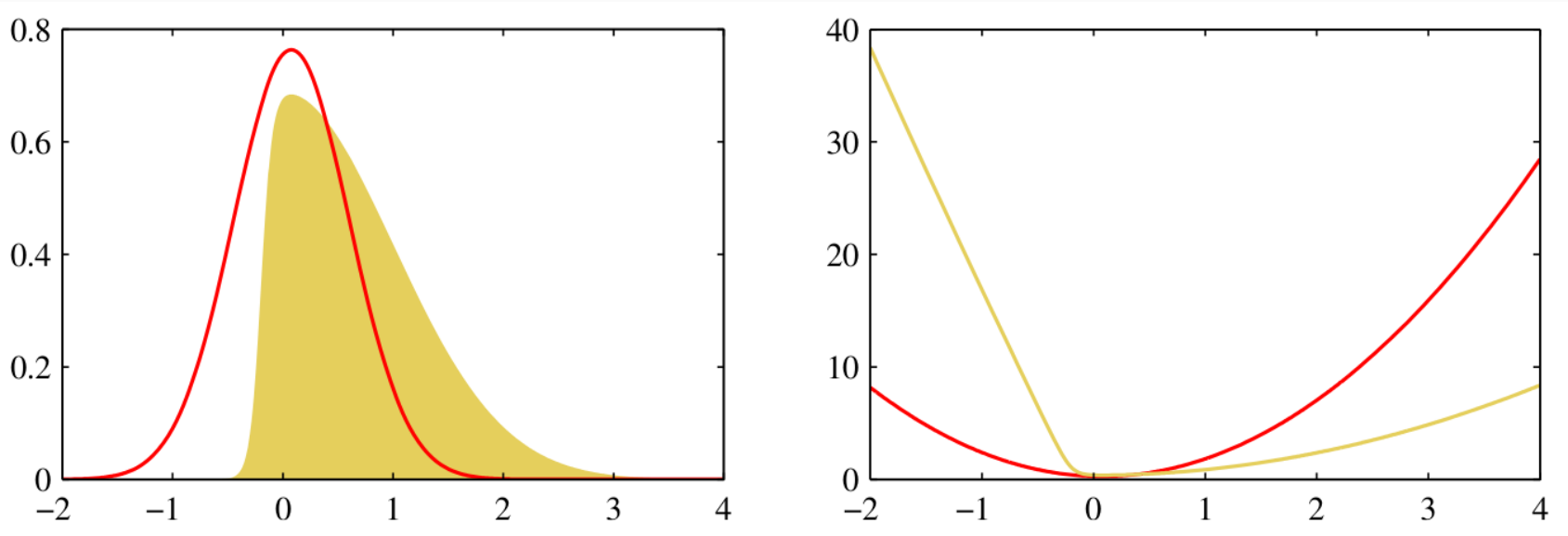
- Это можно обобщить на многомерное распределение $p(\mathbf{z}) = \frac{1}{Z} f(\mathbf{z})$:

$$f(\mathbf{z}) \approx f(\mathbf{z}_0) e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{z}_0)^\top \mathbf{A} (\mathbf{z}-\mathbf{z}_0)},$$

$$\text{где } \mathbf{A} = -\nabla\nabla \ln f(\mathbf{z}) \,|_{z=z_0} \,.$$

Упражнение. Какая здесь будет нормировочная константа?

Лапласовская аппроксимация



Байесовская логистическая регрессия

- Теперь давайте обработаем логистическую регрессию по-байесовски.
- Логистическую регрессию так просто не выпишешь, как линейную – точного ответа из произведения логистических сигмоидов не получается.
- Будем приближать по Лапласу.

Байесовская логистическая регрессия

- Априорное распределение выберем гауссовским:

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

- Тогда апостериорное будет

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) \propto & p(\mathbf{w}) p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}), \text{ и} \\ \ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) = & -\frac{1}{2} \left(\mathbf{w} - \mu_0\right)^\top \Sigma_0^{-1} \left(\mathbf{w} - \mu_0\right) \\ & + \sum_{n=1}^{N} \left[t_n \ln y_n + (1 - t_n) \ln(1 - y_n)\right] + \text{const}, \\ \text{где } y_n = & \sigma(\mathbf{w}^\top \phi_n). \end{aligned}$$

Байесовская логистическая регрессия

- Чтобы приблизить, сначала находим максимум $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$, а потом матрица ковариаций – это матрица вторых производных

$$\Sigma_N = -\nabla\nabla \ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) = \Sigma_0^{-1} + \sum_{n=1}^{N} y_n(1 - y_n)\phi_n\phi_n^\top.$$

- Наше приближение – это

$$q(\mathbf{w}) = N(\mathbf{w} \mid \mathbf{w}_{\text{MAP}}, \Sigma_N).$$

Байесовская логистическая регрессия

- Теперь можно описать байесовское предсказание:

$$p(C_1 \mid \phi, \mathbf{t}) = \int p(C_1 \mid \phi, \mathbf{w}) p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}) d\mathbf{w} \approx \int \sigma(\mathbf{w}^\top \phi) q(\mathbf{w}) \mathrm{d}\mathbf{w}.$$

- Заметим, что $\sigma(\mathbf{w}^\top \phi)$ зависит от $\mathbf{w}$ только через его проекцию на ϕ.
- Обозначим $a = \mathbf{w}^\top \phi$:

$$\sigma(\mathbf{w}^\top \phi) = \int \delta(a - \mathbf{w}^\top \phi) \sigma(a) \mathrm{d}a.$$

Байесовская логистическая регрессия

- $\sigma(\mathbf{w}^\top \phi) = \int \delta(a - \mathbf{w}^\top \phi)\sigma(a)\mathrm{d}a$, а значит,

$$\int \sigma(\mathbf{w}^\top \phi) q(\mathbf{w}) d\mathbf{w} = \int \sigma(a) p(a) \mathrm{d}a,$$

$$\text{где } p(a) = \int \delta(a - \mathbf{w}^\top \phi) q(\mathbf{w}) \mathrm{d}\mathbf{w}.$$

- $p(a)$ – это маргинализация гауссиана $q(\mathbf{w})$, где мы интегрируем по всему, что ортогонально ϕ.

Байесовская логистическая регрессия

- $p(a)$ – это маргинализация гауссиана $q(\mathbf{w})$, где мы интегрируем по всему, что ортогонально ϕ.
- Значит, $p(a)$ – тоже гауссиан; найдём его моменты:

$$\begin{aligned}\mu_a =& \mathrm{E}[a] = \int a p(a) \mathrm{d}a = \int q(\mathbf{w}) \mathbf{w}^\top \phi \mathrm{d}\mathbf{w} = \mathbf{w}_{\mathrm{MAP}}^\top \phi, \\ \sigma_a^2 =& \int \left(a^2 - \mathrm{E}[a]\right)^2 p(a) \mathrm{d}a = \\ =& \int q(\mathbf{w}) \left[(\mathbf{w}^\top \phi)^2 - (\mu_N^\top \phi)^2\right]^2 \mathrm{d}\mathbf{w} = \phi^\top \Sigma_N \phi.\end{aligned}$$

- Итого получили, что

$$p(C_1 \mid \mathbf{t}) = \int \sigma(a) p(a) \mathrm{d}a = \int \sigma(a) N(a \mid \mu_a, \sigma_a^2) \mathrm{d}a.$$

Байесовская логистическая регрессия

- $p(C_1 \mid \mathbf{t}) = \int \sigma(a) N(a \mid \mu_a, \sigma_a^2) \mathrm{d}a.$
- Этот интеграл так просто не взять, потому что сигмоид сложный, но можно приблизить, если приблизить $\sigma(a)$ через пробит: $\sigma(a) \approx \Phi(\lambda a)$ для $\lambda = \sqrt{\pi/8}$.

Упражнение. Докажите, что для $\lambda = \sqrt{\pi/8}$ у σ и Φ одинаковый наклон в нуле.

Байесовская логистическая регрессия

- А если мы перейдём к пробит-функции, то её свёртка с гауссианом будет просто другим пробитом:

$$\int \Phi(\lambda a) N(a \mid \mu, \sigma^2) \mathrm{d}a = \Phi\left(\frac{\mu}{\sqrt{\frac{1}{\lambda^2} + \sigma^2}}\right).$$

Упражнение. Докажите это.

Байесовская логистическая регрессия

- В итоге получается аппроксимация

$$\int \sigma(a) N(a \mid \mu, \sigma^2) \mathrm{d}a \approx \sigma\left(\kappa(\sigma^2)\mu\right),$$

$$\text{где } \kappa(\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\pi}{8}\sigma^2}}.$$

Байесовская логистическая регрессия

- И теперь, собирая всё вместе, мы получили распределение предсказаний:

$$
\begin{aligned}
p(C_1 \mid \phi, \mathbf{t}) &= \sigma\left(\kappa(\sigma_a^2)\mu_a\right), \text{ где} \\
\mu_a &= \mathbf{w}_{\mathrm{MAP}}^\top \phi, \\
\sigma_a^2 &= \phi^\top \Sigma_N \phi, \\
\kappa(\sigma^2) &= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\pi}{8}\sigma^2}}.
\end{aligned}
$$

- Кстати, разделяющая поверхность $p(C_1 \mid \phi, \mathbf{t}) = \frac{1}{2}$ задаётся уравнением $\mu_a = 0$, и тут нет никакой разницы с просто использованием $\mathbf{w}_{\mathrm{MAP}}$. Разница будет только для более сложных критериев.

Спасибо!

Спасибо за внимание!