

ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ И ДРУГИЕ ЖИВОТНЫЕ

Сергей Николенко

TRA Robotics — Санкт-Петербург

10 мая 2018 г.

Random facts:

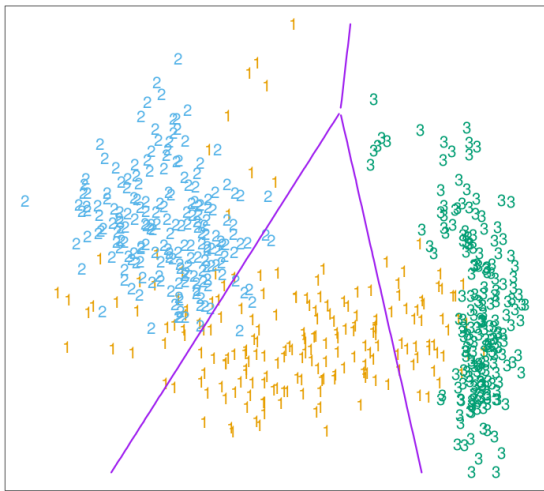
- 10 мая (23 день третьего месяца) — праздник Мацу, Великой Матушки Поднебесной; во время одной из медитаций юная Мацу спасла попавших в шторм отца и братьев, и в результате стала богиней моря и покровительницей рыбаков
- 10 мая 28 года до н.э. астрономы династии Хань наблюдали пятна на солнце
- 10 мая 1857 г. сипаи в гарнизоне города Мирут осознали, что патроны, которые им нужно было скусывать, пропитаны смесью говяжьего и свиного жира — тут-то смешанный состав индусов и мусульман и смог договориться
- 10 мая 1922 г. США аннексировали риф Кингмен (Kingman Reef), ныне неинкорпорированную неорганизованную территорию США; постоянного населения нет, зато есть военно-морская база и огромное количество гигантских моллюсков

LDA и QDA

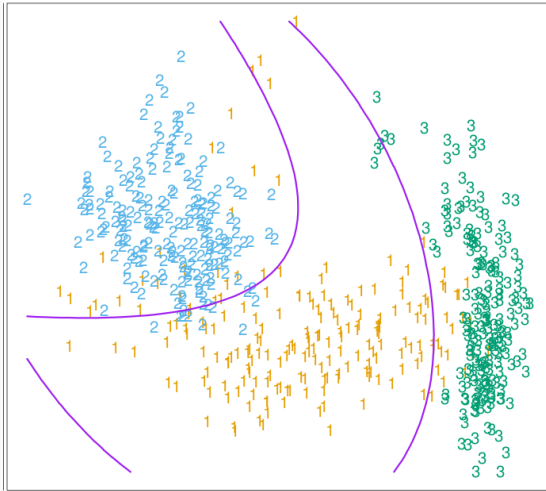
- В прошлый раз мы рассмотрели задачу классификации.
- Построили разделяющую гиперплоскость методом наименьших квадратов.
- И методом линейного дискриминанта Фишера.
- А потом научились обучать перцептрон и доказали сходимость метода.

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

НЕЛИНЕЙНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ



НЕЛИНЕЙНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ



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

$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1) + p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)}.$$

- Перепишем:

$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1) + p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)} = \frac{1}{1 + e^{-a}} = \sigma(a),$$

где

$$a = \ln \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)}, \quad \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}.$$

- $\sigma(a)$ – 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.

- В случае нескольких классов получится

$$p(\mathcal{C}_k | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_k)p(\mathcal{C}_k)}{\sum_j p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_j)p(\mathcal{C}_j)} = \frac{e^{a_k}}{\sum_j e^{a_j}}.$$

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

- Давайте рассмотрим гауссовы распределения для классов:

$$p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{x} | \mu_k, \Sigma).$$

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

- ...получится

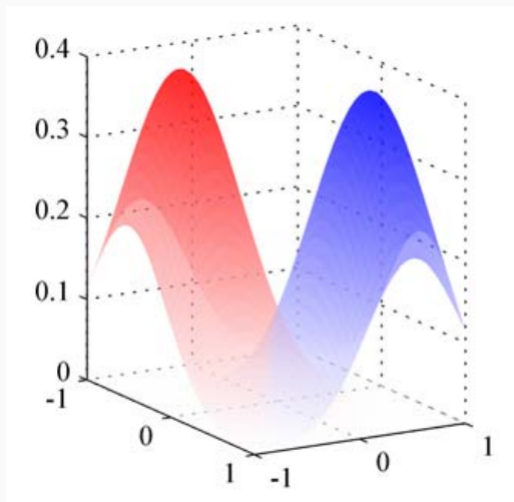
$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0), \text{ где}$$

$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1} (\mu_1 - \mu_2),$$

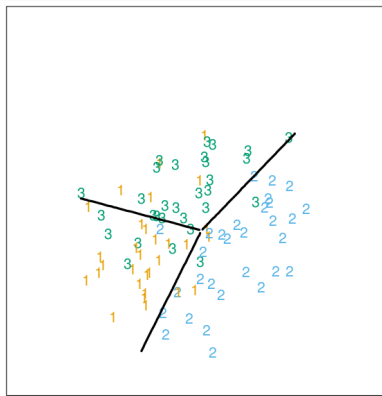
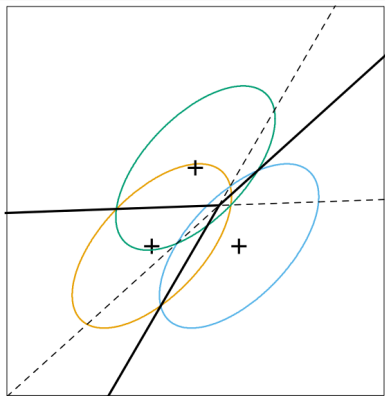
$$w_0 = -\frac{1}{2}\mu_1^\top \Sigma^{-1} \mu_1 + \frac{1}{2}\mu_2^\top \Sigma^{-1} \mu_2 + \ln \frac{p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathcal{C}_2)}.$$

- Т.е. в аргументе сигмоида получается линейная функция от \mathbf{x} . Поверхности уровня – это когда $p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x})$ постоянно, т.е. гиперплоскости в пространстве \mathbf{x} . Априорные вероятности $p(\mathcal{C}_k)$ просто сдвигают эти гиперплоскости.

РАЗДЕЛЯЮЩАЯ ГИПЕРПЛОСКОСТЬ

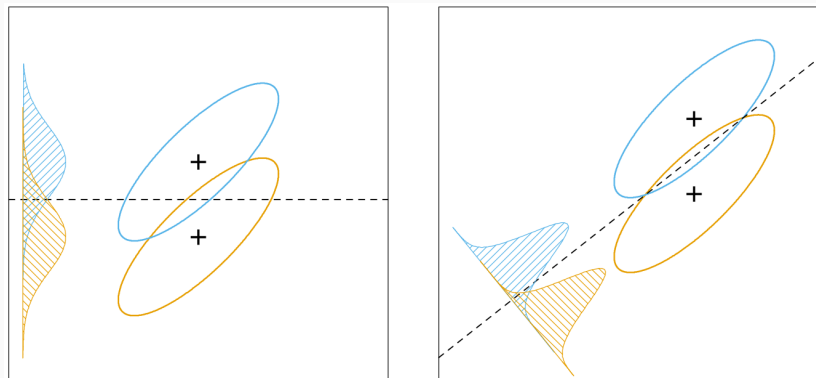


РАЗДЕЛЯЮЩАЯ ГИПЕРПЛОСКОСТЬ



ДИСКРИМИНАНТ ФИШЕРА

Кстати, с дискриминантом Фишера эта разделяющая поверхность отлично сходится.



- 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 $\pi_k = p(\mathcal{C}_k)$.

- 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.

- Как оценить распределения $p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_k)$, 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 \mathcal{C}_1 , $t_n = 0$ значит \mathcal{C}_2 .
- Обозначим $p(\mathcal{C}_1) = \pi$, $p(\mathcal{C}_2) = 1 - \pi$.

- Для одной точки в классе \mathcal{C}_1 :

$$p(\mathbf{x}_n, \mathcal{C}_1) = p(\mathcal{C}_1)p(\mathbf{x}_n | \mathcal{C}_1) = \pi \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_1, \Sigma).$$

- В классе \mathcal{C}_2 :

$$p(\mathbf{x}_n, \mathcal{C}_2) = p(\mathcal{C}_2)p(\mathbf{x}_n | \mathcal{C}_2) = (1 - \pi) \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_2, \Sigma).$$

- Функция правдоподобия:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{t} | \pi, \mu_1, \mu_2, \Sigma) &= \\ &= \prod_{n=1}^N [\pi \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_1, \Sigma)]^{t_n} [(1 - \pi) \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_2, \Sigma)]^{1-t_n}. \end{aligned}$$

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

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

и, взяв производную, получим, совершенно неожиданно,

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

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

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

- Берём производную, и получается, опять внезапно,

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

- Аналогично,

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

- Для матрицы ковариаций придётся постараться; в результате получится

$$\hat{\Sigma} = \frac{N_1}{N_1 + N_2} \mathbf{S}_1 + \frac{N_2}{N_1 + N_2} \mathbf{S}_2, \text{ где}$$
$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{n \in \mathcal{C}_1} (\mathbf{x}_n - \mu_1) (\mathbf{x}_n - \mu_1)^\top,$$
$$\mathbf{S}_2 = \frac{1}{N_2} \sum_{n \in \mathcal{C}_2} (\mathbf{x}_n - \mu_2) (\mathbf{x}_n - \mu_2)^\top.$$

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

- Это самым прямым образом обобщается на случай

нескольких классов.

Упражнение. Сделайте это.

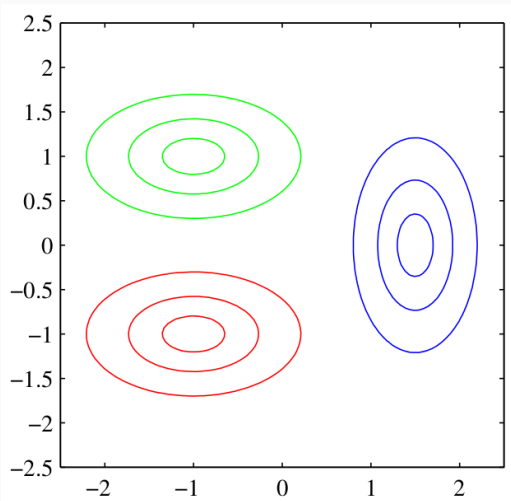
- А вот с разными матрицами ковариаций уже будет по-другому.
- Квадратичные члены не сократятся.
- Разделяющие поверхности станут квадратичными; QDA – quadratic discriminant analysis.

- В QDA получится

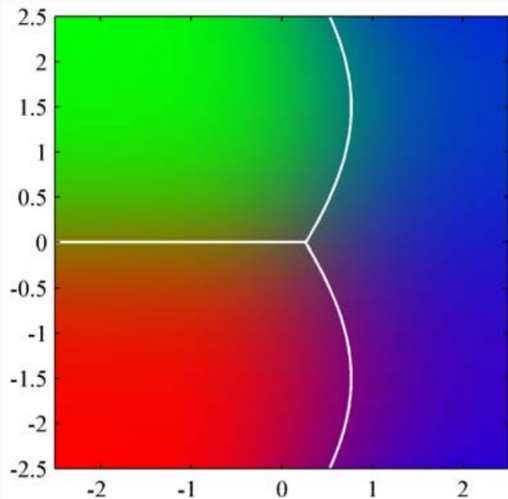
$$\delta_k(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \mu_k) + \log \pi_k.$$

- Разделяющая поверхность между \mathcal{C}_i и \mathcal{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 КОВАРИАЦИИ

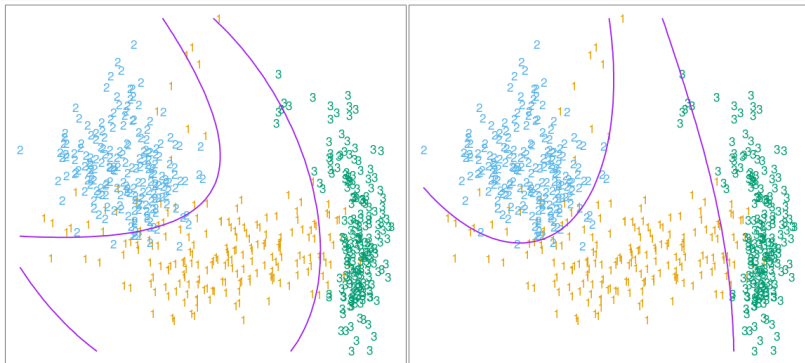


РАЗНЫЕ МАТРИЦЫ КОВАРИАЦИЙ



LDA vs. QDA

Разница между LDA с квадратичными членами и QDA обычно невелика.



- 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.

- 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.

- 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:

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

- 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.

- 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

- Итак, мы рассмотрели логистический сигмоид:

$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1) + p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)} = \frac{1}{1 + e^{-a}} = \sigma(a),$$

$$\text{где } a = \ln \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)}, \quad \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}.$$

- Вывели из него LDA и QDA, обучили их методом максимального правдоподобия, а потом отвлеклись на naïve Bayes.

- Возвращаемся к задаче классификации.
- Два класса, и апостериорное распределение – логистический сигмоид на линейной функции:

$$p(\mathcal{C}_1 | \phi) = y(\phi) = \sigma(\mathbf{w}^\top \phi), \quad p(\mathcal{C}_2 | \phi) = 1 - p(\mathcal{C}_1 | \phi).$$

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

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

$$p(\mathbf{t} | \mathbf{w}) = \prod_{n=1}^N y_n^{t_n} (1 - y_n)^{1-t_n}, \quad y_n = p(\mathcal{C}_1 | \phi_n).$$

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

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

- 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: $\|\mathbf{w}\| \rightarrow \infty$, и сигмоид превращается в функцию Хевисайда. Надо регуляризовать.

- 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 $E(\mathbf{w})$.

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

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

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

и шаг оптимизации будет

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{\text{new}} &= \mathbf{w}^{\text{old}} - (\Phi^\top \Phi)^{-1} [\Phi^\top \Phi \mathbf{w}^{\text{old}} - \Phi^\top \mathbf{t}] = \\ &= (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t}, \end{aligned}$$

т.е. мы за один шаг придём к решению.

- Для логистической регрессии:

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

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

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

- Формула шага оптимизации:

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

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).

ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ

- Итак, мы рассмотрели логистический сигмоид:

$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1) + p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)} = \frac{1}{1 + e^{-a}} = \sigma(a),$$

$$\text{где } a = \ln \frac{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x} | \mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)}, \quad \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}.$$

- Вывели из него LDA и QDA, обучили их методом максимального правдоподобия, а потом отвлеклись на naïve Bayes.

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

$$p(\mathcal{C}_1 | \phi) = y(\phi) = \sigma(\mathbf{w}^T \phi), \quad p(\mathcal{C}_2 | \phi) = 1 - p(\mathcal{C}_1 | \phi).$$

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

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

$$p(\mathbf{t} | \mathbf{w}) = \prod_{n=1}^N y_n^{t_n} (1 - y_n)^{1-t_n}, \quad y_n = p(\mathcal{C}_1 | \phi_n).$$

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

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

- 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.
- А ещё лучше – IRLS, который мы обсуждали в прошлый раз.

- В случае нескольких классов

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

- Опять выпишем максимальное правдоподобие; во-первых,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

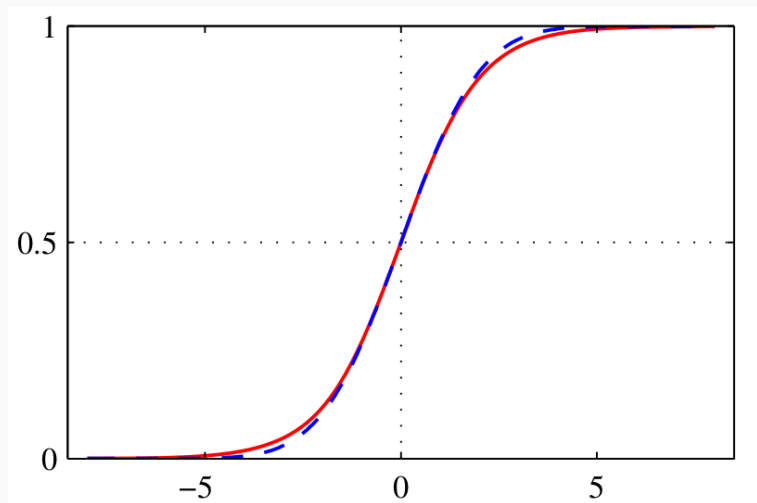
$$f(a) = \Phi(a) = \int_{-\infty}^a \mathcal{N}(\theta | 0, 1) d\theta.$$

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

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

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

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



ЛАПЛАСОВСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ
И
БАЙЕСОВСКАЯ
ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ

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

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

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

- 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.

- Это можно обобщить на многомерное распределение

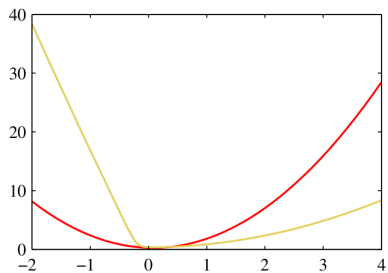
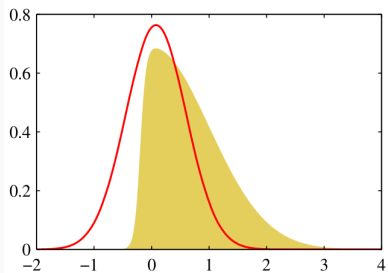
$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{Z} f(\mathbf{z}):$$

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

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

Упражнение. Какая здесь будет нормировочная константа?

ЛАПЛАСОВСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ



СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ПО ЛАПЛАСУ

- Вооружившись лапласовской аппроксимацией, давайте применим её сначала к выбору моделей.
- Напомним: чтобы сравнить модели из множества $\{\mathcal{M}_i\}_{i=1}^L$, по тестовому набору D оценим апостериорное распределение

$$p(\mathcal{M}_i | D) \propto p(\mathcal{M}_i)p(D | \mathcal{M}_i).$$

- Если модель определена параметрически, то $p(D | \mathcal{M}_i) = \int p(D | \theta, \mathcal{M}_i)p(\theta | \mathcal{M}_i)d\theta$.
- Это вероятность сгенерировать D , если выбирать параметры модели по её априорному распределению; знаменатель из теоремы Байеса:

$$p(\theta | \mathcal{M}_i, D) = \frac{p(D | \theta, \mathcal{M}_i)p(\theta | \mathcal{M}_i)}{p(D | \mathcal{M}_i)}.$$

- Мы раньше приближали фактически кусочно-постоянной функцией.
- Теперь давайте гауссианом приблизим; возьмём интеграл:

$$Z = \int f(\mathbf{z}) d\mathbf{z} \approx \int f(\mathbf{z}_0) e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{z}_0)^\top \mathbf{A}(\mathbf{z}-\mathbf{z}_0)} d\mathbf{z} = f(\mathbf{z}_0) \frac{(2\pi)^{M/2}}{|\mathbf{A}|^{1/2}}.$$

- А у нас $Z = p(D)$, $f(\theta) = p(D | \theta)p(\theta)$.

- Получаем

$$\ln p(D) \approx \ln p(D | \theta_{\text{MAP}}) + \ln P(\theta_{\text{MAP}}) + \frac{M}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{A}|.$$

- $\ln P(\theta_{\text{MAP}}) + \frac{M}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{A}|$ – фактор Оккама.
- $\mathbf{A} = -\nabla\nabla \ln p(D | \theta_{\text{MAP}})p(\theta_{\text{MAP}}) = -\nabla\nabla \ln p(\theta_{\text{MAP}} | D)$.

- Получаем

$$\ln p(D) \approx \ln p(D | \theta_{\text{MAP}}) + \ln P(\theta_{\text{MAP}}) + \frac{M}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{A}|.$$

- Если гауссовское априорное распределение $p(\theta)$ достаточно широкое, и \mathbf{A} полного ранга, то можно грубо приблизить (докажите это!)

$$\ln p(D) \approx \ln p(D | \theta_{\text{MAP}}) - \frac{1}{2} M \ln N,$$

где M – число параметров, N – число точек в D , а аддитивные константы мы опустили.

- Это *байесовский информационный критерий* (Bayesian information criterion, BIC), он же *критерий Шварца* (Schwarz criterion).

- 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.

- Априорное распределение выберем гауссовским:

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

- Тогда апостериорное будет

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

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

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

- Наше приближение – это

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

- Теперь можно описать байесовское предсказание:

$$p(\mathcal{C}_1 | \phi, \mathbf{t}) = \int p(\mathcal{C}_1 | \phi, \mathbf{w})p(\mathbf{w} | \mathbf{t})d\mathbf{w} \approx \int \sigma(\mathbf{w}^\top \phi)q(\mathbf{w})d\mathbf{w}.$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\mu_a = \mathbb{E}[a] = \int a p(a) da = \int q(\mathbf{w}) \mathbf{w}^\top \phi d\mathbf{w} = \mathbf{w}_{\text{MAP}}^\top \phi,$$

$$\begin{aligned} \sigma_a^2 &= \int (a^2 - \mathbb{E}[a])^2 p(a) da = \\ &= \int q(\mathbf{w}) [(\mathbf{w}^\top \phi)^2 - (\mu_N^\top \phi)^2]^2 d\mathbf{w} = \phi^\top \Sigma_N \phi. \end{aligned}$$

- Итого получили, что

$$p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{t}) = \int \sigma(a) p(a) da = \int \sigma(a) \mathcal{N}(a | \mu_a, \sigma_a^2) da.$$

- $p(\mathcal{C}_1 | \mathbf{t}) = \int \sigma(a) \mathcal{N}(a | \mu_a, \sigma_a^2) da.$
- 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.

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

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

Упражнение. Докажите это.

- В итоге получается аппроксимация

$$\int \sigma(a) \mathcal{N}(a | \mu, \sigma^2) da \approx \sigma(\kappa(\sigma^2)\mu),$$

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

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

$$p(\mathcal{C}_1 | \phi, \mathbf{t}) = \sigma(\kappa(\sigma^2)\mu_a), \text{ где}$$

$$\mu_a = \mathbf{w}_{\text{MAP}}^\top \phi,$$

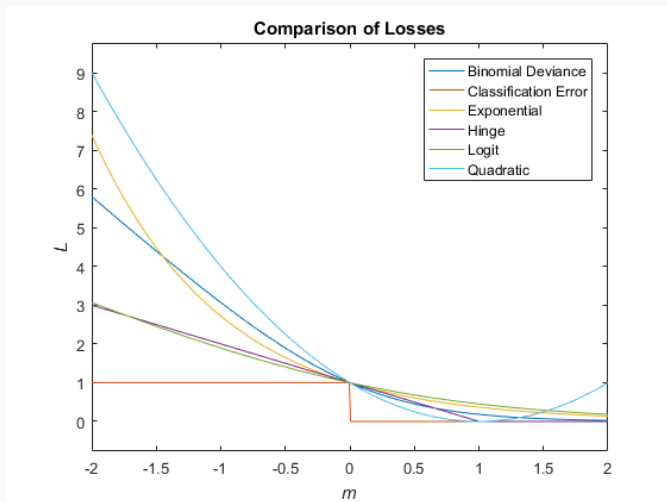
$$\sigma_a^2 = \phi^\top \Sigma_N \phi,$$

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

- Кстати, разделяющая поверхность $p(\mathcal{C}_1 | \phi, \mathbf{t}) = \frac{1}{2}$ задаётся уравнением $\mu_a = 0$, и тут нет никакой разницы с просто использованием \mathbf{w}_{MAP} . Разница будет только для более сложных критериев.

- И напоследок немножко другой взгляд: разные методы классификации отличаются друг от друга тем, какую функцию ошибки они оптимизируют.
- У классификации проблема с «правильной» функцией ошибки, то есть ошибкой собственно классификации:
 - она и не везде дифференцируема,
 - и производная её никому не нужна.
- Давайте посмотрим на разные функции потерь (loss functions); мы уже несколько видели, но ещё немало осталось.

ФУНКЦИИ ПОТЕРЬ В КЛАССИФИКАЦИИ



Спасибо за внимание!