Machine Learning

روش‌های چندمتغیره

یادگیری ماشین
(۱۳-۱۱-۸۰۵-۰۱)
فصل پنجم

دانشگاه شهید بهشتی
دانشکده‌ی مهندسی برق و کامپیوتر
پاییز ۱۳۹۳
احمد محمودی ازناوه

فهرست مطالب

- داده‌های چندمتغیره
- تخمین پارامترها
- دسته‌بندی
- رگرسیون

داده‌های چندمتغیره

- در بسیاری از کاربردها، اندازه‌گیری‌های متفاوتی انجام می‌شود، از این جهت با بردار ورودی (ویژگی) سروکار خواهیم داشت (به عنوان مثال یک بردار d-بعدی).

Data matrix

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \cdots & x_d^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_d^2 \\ \vdots & & & \\ x_1^N & x_2^N & \cdots & x_d^N \end{bmatrix}$$

یک نمونه

d inputs/features/attributes

N instances/observations/examples

پارامترهای چندمتغیره

$$Mean: E[\boldsymbol{x}] = \mu = [\mu_1, \ldots, \mu_d]^T$$

$$\sigma_i \equiv var(X_i)$$

$$Cov(X_i, X_j) = E[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)] = E[X_i X_j] - \mu_i \mu_j$$

$$\Sigma \equiv \mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = E[(\mathbf{X} - \mu)(\mathbf{X} - \mu)^T] = E[\mathbf{X}\mathbf{X}^T] - \mu\mu^{\mathrm{T}}$$

$$= \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2d} \\ \vdots & & & \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_d^2 \end{bmatrix}$$

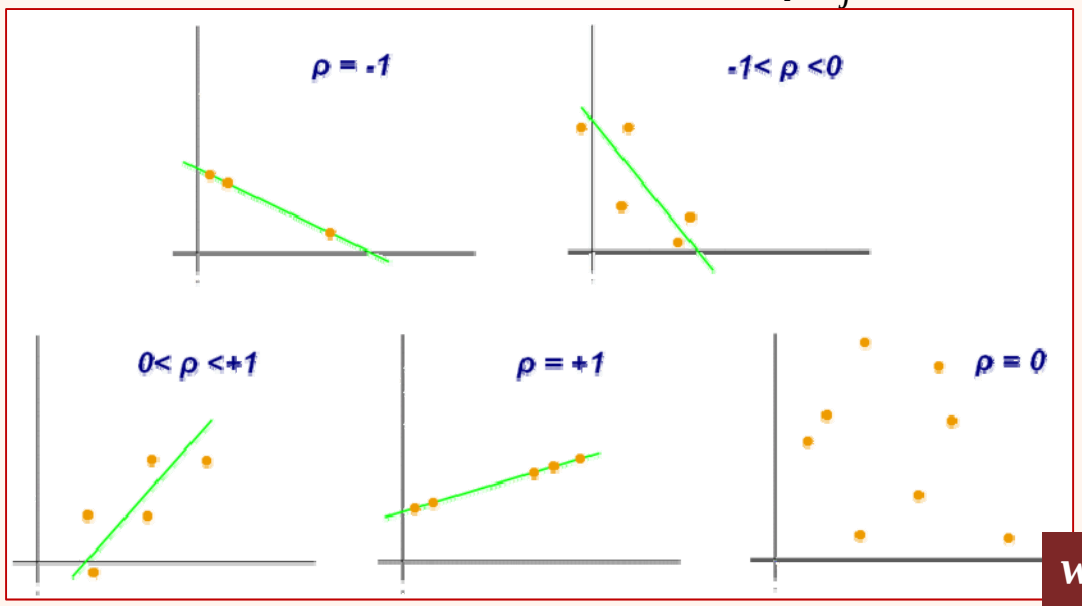
واریانس

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \cdots & x_d^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_d^2 \\ \vdots & & & \\ x_1^N & x_2^N & \cdots & x_d^N \end{bmatrix}$$

ضریب همبستگی Pearson

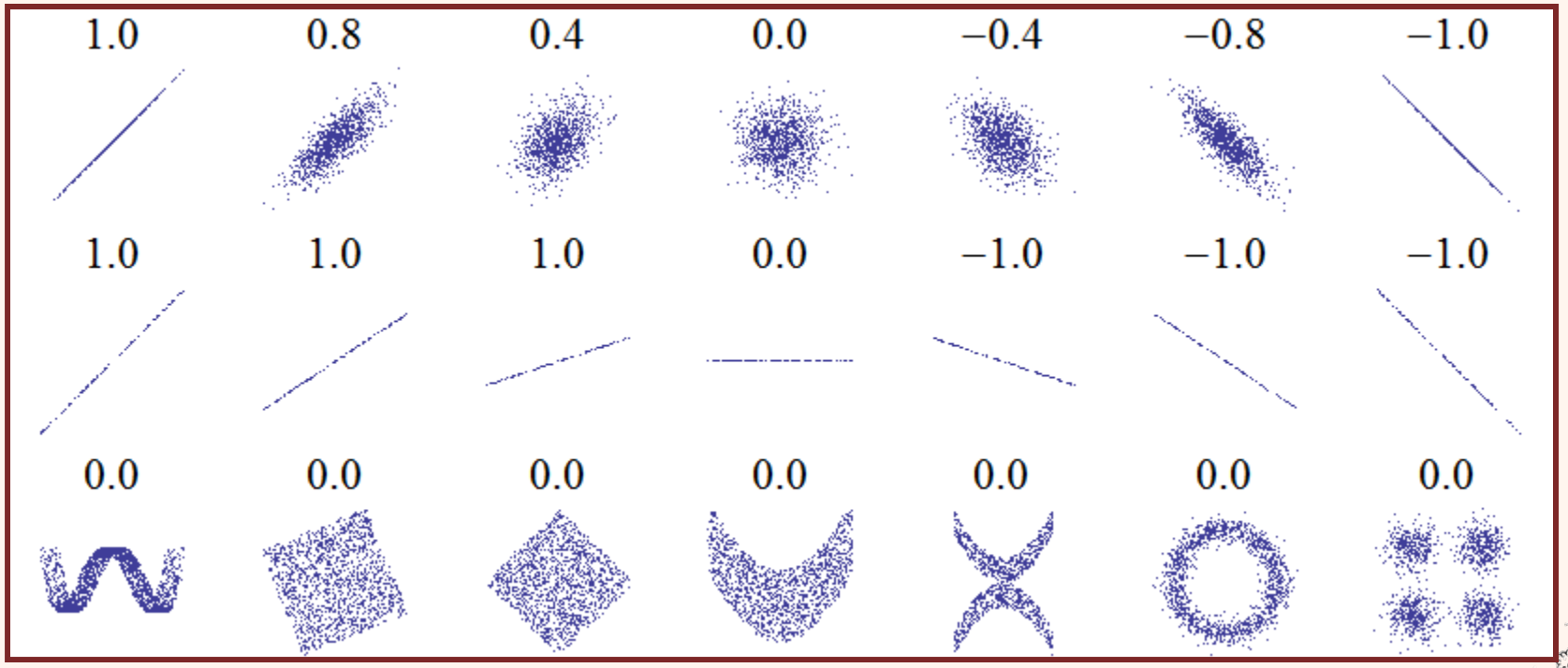
- میزان همبستگی خطی بین دو متغیر تصادفی را می‌سنجد.
  - مقدار این ضریب بین ۱- تا ۱ تغییر می‌کند که «۱» به معنای همبستگی مثبت کامل، «۰» به معنی نبود همبستگی، و «۱-» به معنی همبستگی منفی کامل است.
  - این ضریب که کاربرد فراوانی در آمار دارد، توسط کارل پیرسون براساس ایدهٔ اولیهٔ فرانسیس گالتون تدوین شد.

$$Correlation:\ Corr\left(X_i, X_j\right) \equiv \rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_i \sigma_j}$$



wikipedia

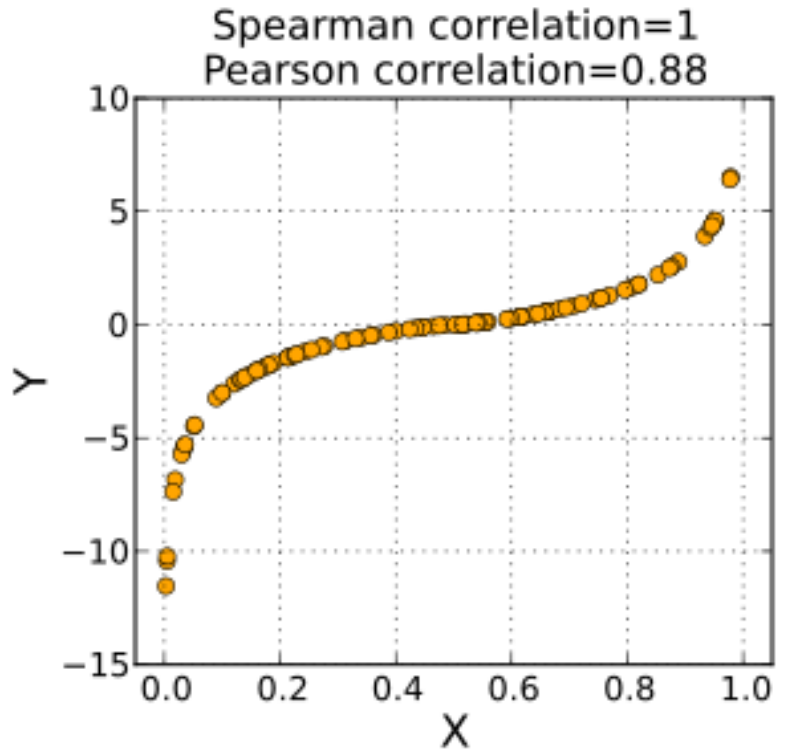
مثال



wikipedia

ضریب همبستگی رتبه‌ای Spearman

Spearman's rank correlation coefficient



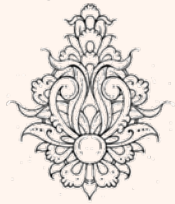
$$\rho = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2 \sum_i (y_i - \bar{y})^2}}$$

تخمین پارامترها

$$\text{Sample mean } \mathbf{m}: m_i = \frac{\sum_{t=1}^{N} x_i^t}{N}, i = 1,\ldots,d$$

$$\text{Covariance matrix } \mathbf{S}: s_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{N} \left(x_i^t - m_i\right)\left(x_j^t - m_j\right)}{N}$$

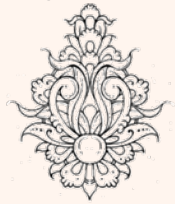
$$\text{Correlation matrix } \mathbf{R}: r_{ij} = \frac{s_{ij}}{s_i s_j}$$



تخمین پارامترهای نامشخص

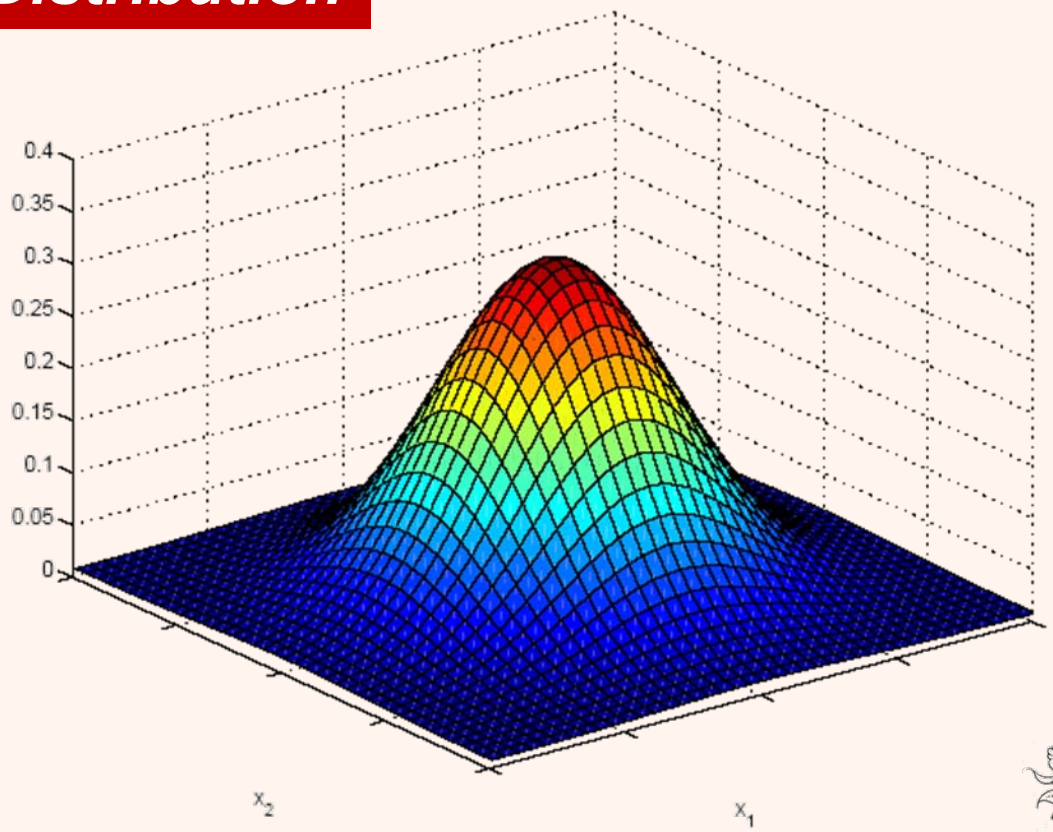
Estimation of Missing Values

- ممکن است در برخی نمونه‌ها برخی متغیرها در نباشند.
  - بهترین راه صرفنظر کردن از آن‌هاست، اما این راه در حالتی که داده‌های آموزشی محدود باشد، کارایی ندارد.
  - یک فیلد جدید اضافه کنیم که فقدان مقدار را مشخص می‌کند؛ ممکن است دارای اطلاعات ارزشمندی باشد.
- نسبت دادن مقدار: (imputation)
  - جایگزینی مقدار میانگین (mean imputation)
  - انتساب با رگرسیون (imputation by regression)



توزیع نرمال چند متغیره

Multivariate Normal Distribution



$$\mathbf{x} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$$

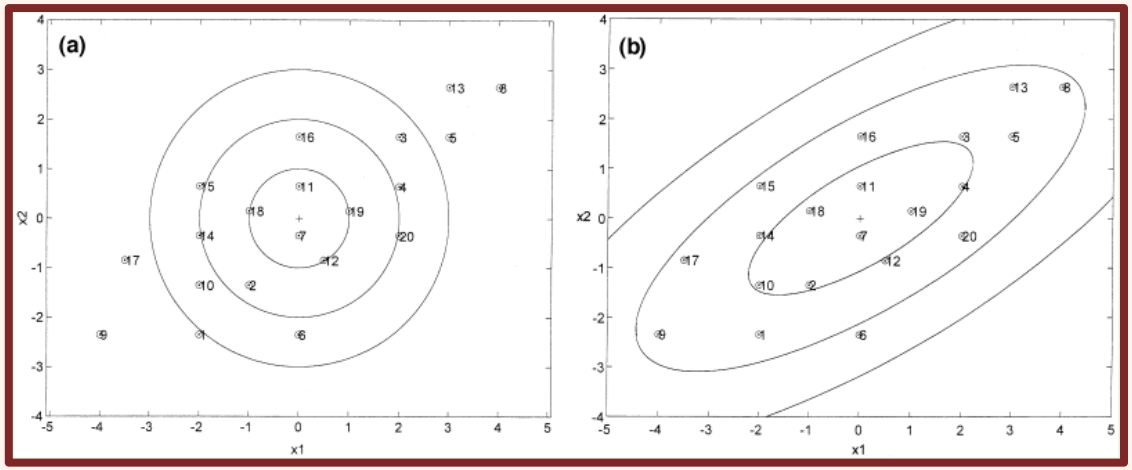
$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right]$$

توزیع نرمال چند متغیره (ادامه...)

Distance in standard units

- فاصله‌ی Mahalanobis:
  - معیاری برای اندازه‌گیری فاصله‌ی یک نقطه از یک توزیع داده است.

$$(x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu)$$



- $(x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu)=c^2$ **ابربیضی**

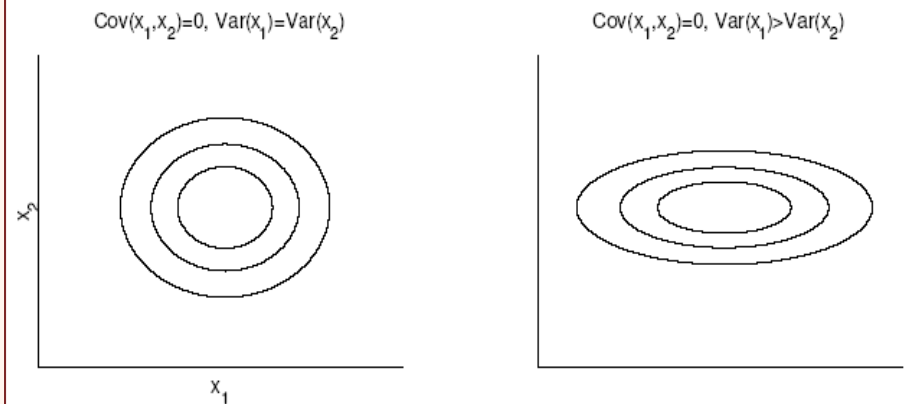
مثال- دو بعدی

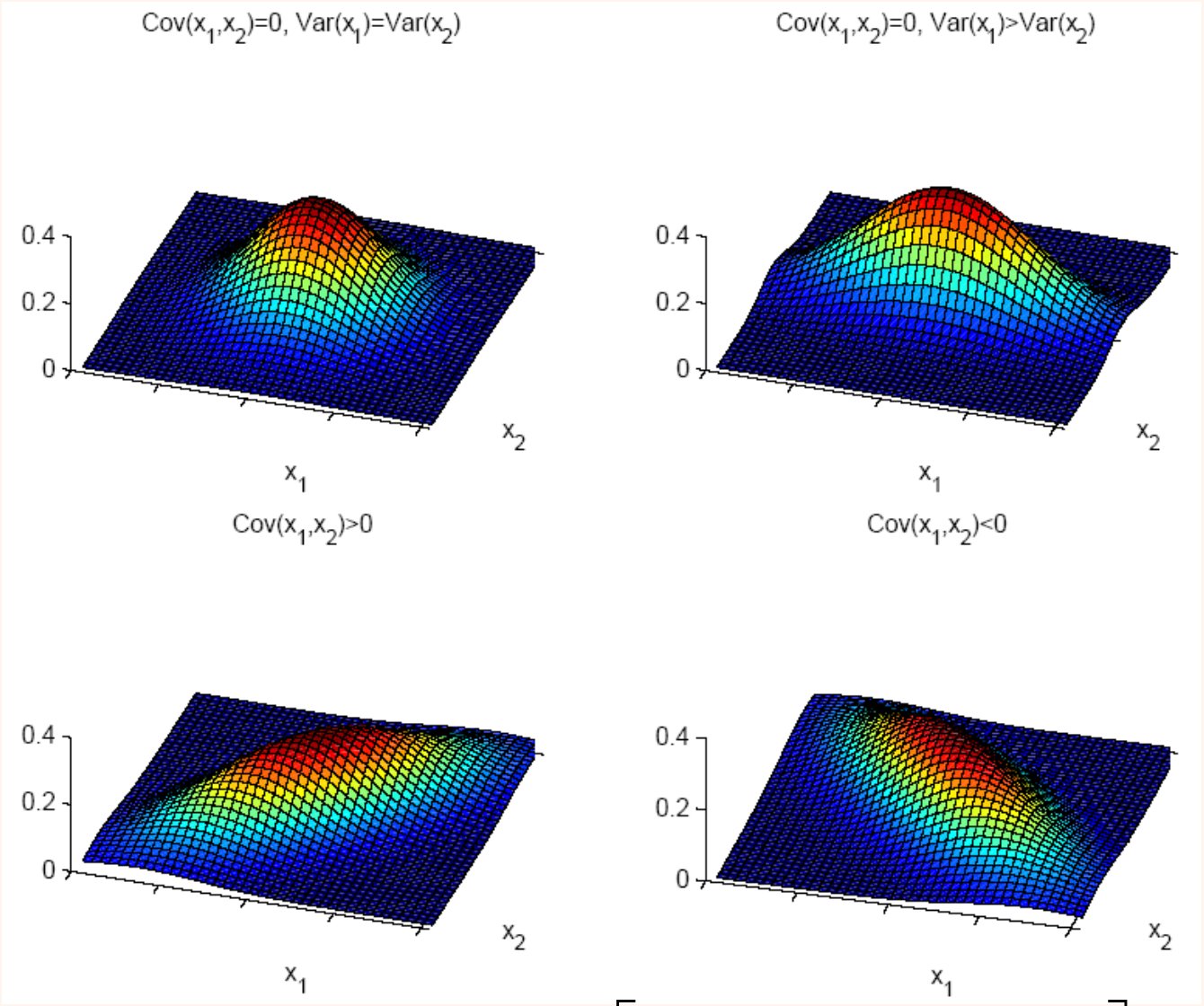
$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}$$

$$p(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left[-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left(z_1^2 - 2\rho z_1 z_2 + z_2^2\right)\right]$$

$$z_i = (x_i - \mu_i)/\sigma_i$$

z normalization





$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right]$$

nonsingular

positive definite

If not ->Dimension reduction

چندنکته

- در صورتی که x دارای توزیع نرمال (چندمتغیره) باشد، متغیر مربوط به هر بعد نیز دارای توزیع نرمال تک‌متغیره است. (عکس این مطلب درست نیست)
  - در واقع، هر زیر مجموعه‌ی kبعدی (k<d) نیز یک توزیع نرمال چندمتغیره است.
- در صورتی که متغیرها مستقل باشند:

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} p_i(x_i) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \prod_{i=1}^{d} \sigma_i} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i} \right)^2 \right]$$

ادامه ...

- در صورتی که $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \Sigma), \quad \mathbf{w} \in \Re^d$

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x} = w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_dx_d \mathcal{N}_d\left(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\mu}, \mathbf{w}^T\Sigma\mathbf{w}\right)$$

$$E\left[\mathbf{w}^T\mathbf{x}\right] = \mathbf{w}^T E\left[\mathbf{x}\right] = \mathbf{w}^T\mu$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}\right) &= E\left[\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x} - \mathbf{w}^T\mu\right)^2\right] = E\left[\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x} - \mathbf{w}^T\mu\right)\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x} - \mathbf{w}^T\mu\right)\right] \\ &= E\left[\mathbf{w}^T\left(\mathbf{x} - \mu\right)\left(\mathbf{x} - \mu\right)^T\mathbf{w}\right] = \mathbf{w}^T E\left[\left(\mathbf{x} - \mu\right)\left(\mathbf{x} - \mu\right)^T\right]\mathbf{w} \\ &= \mathbf{w}^T\Sigma\mathbf{w}\end{aligned}$$

در صورتی که k بردار در نظر گرفته شود:

$$\mathbf{W}^T\boldsymbol{x} \sim \mathcal{N}_k(\mathbf{W}^T\boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}^T\Sigma\mathbf{W})$$

$\mathbf{W}$ is a $d \times k$

دسته‌بندی چندمتغیره

$$p(x \mid C_i) \sim N(\mu_i, \Sigma_i)$$

$$p(\mathbf{x} \mid C_i) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\Sigma_i|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) \right]$$

Discriminant functions

$$g_i(\mathbf{x}) = \log p(\mathbf{x} \mid C_i) + \log P(C_i)$$

$$= -\frac{d}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |\Sigma_i| - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_i)^T \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x} - \mu_i) + \log P(C_i)$$

تخمین پارامترها

با تخمین و جایگزینی پارامترها خواهیم داشت:

$$\hat{P}(C_i) = \frac{\sum_t r_i^t}{N}$$

$$\mathbf{m}_i = \frac{\sum_t r_i^t \mathbf{x}^t}{\sum_t r_i^t}$$

$$\mathbf{S}_i = \frac{\sum_t r_i^t (\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i)^T}{\sum_t r_i^t}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\log|\mathbf{S}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T \mathbf{S}_i^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i) + \log \hat{P}(C_i)$$

Quadratic discriminant

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\log|\mathbf{S}_i| - \frac{1}{2}\left(\mathbf{x}^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_i^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i\right) + \log\hat{P}(C_i)$$

$$= \mathbf{x}^T\mathbf{W}_i\mathbf{x} + \mathbf{w}_i^T\mathbf{x} + w_{i0}$$

where

$$\mathbf{W}_i = -\frac{1}{2}\mathbf{S}_i^{-1}$$

$$\mathbf{w}_i = \mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i$$

$$w_{i0} = -\frac{1}{2}\mathbf{m}_i^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i - \frac{1}{2}\log|\mathbf{S}_i| + \log\hat{P}(C_i)$$

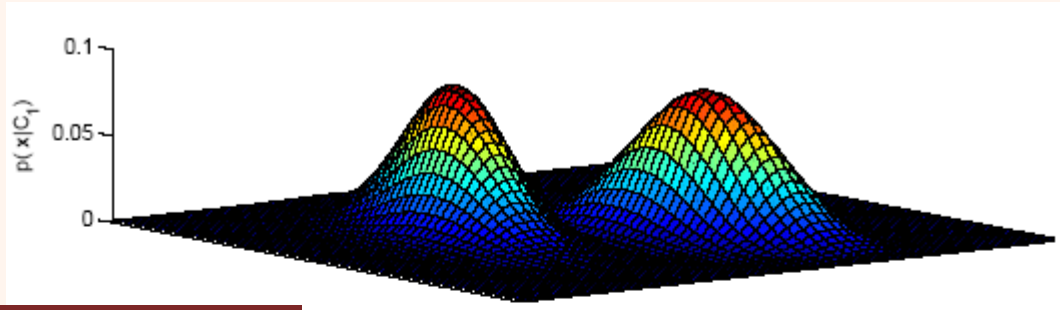
k.d for means

تعداد پارامترها

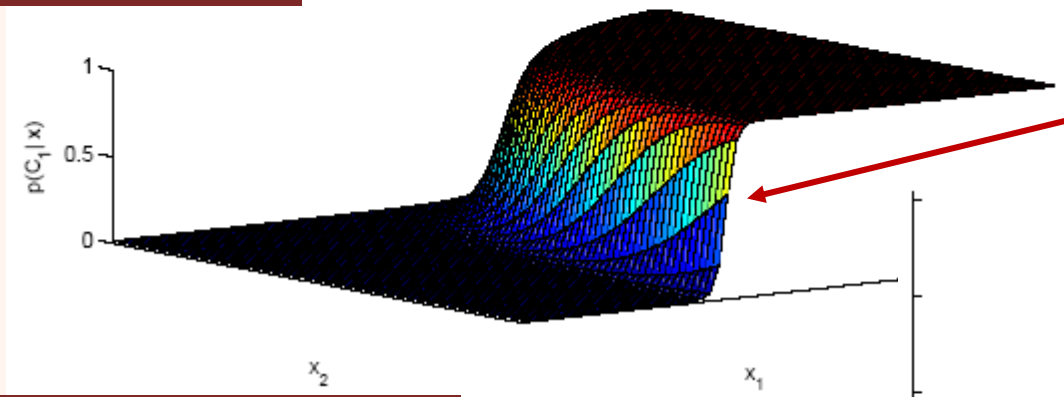
k.d.(d+1)/2 for covariance

در کم بودن تعداد نمونه‌های آموزشی ممکن است ماتریس singular شود.

Quadratic discriminant

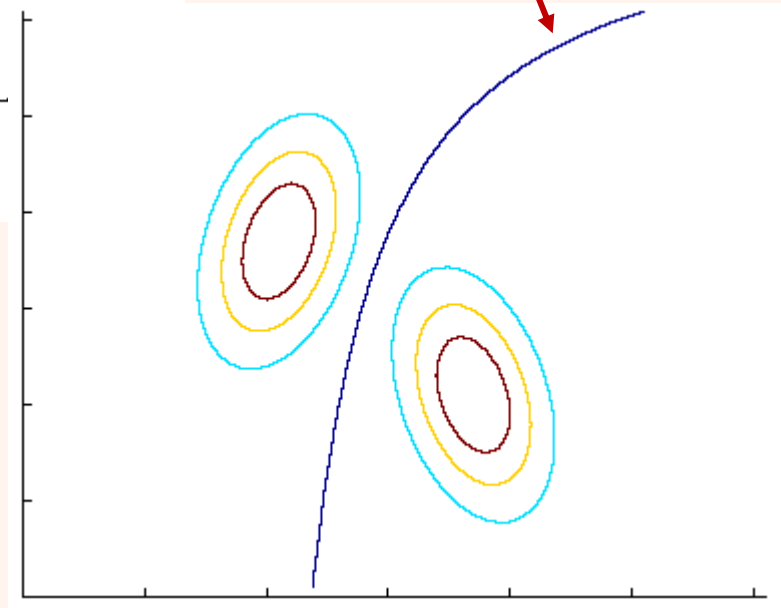


likelihoods



posterior for C_1

discriminant:
$P(C_1 \mid x) = 0.5$



Common Covariance Matrix S

- در صورت کم بودن تعداد نمونه‌های آموزشی می‌توان ماتریس کواریانس یکسان در نظر گرفت.

$$\mathbf{S} = \sum_i \hat{P}(C_i)\mathbf{S}_i$$

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\log|\mathbf{S}_i| - \frac{1}{2}\left(\mathbf{x}^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_i^T\mathbf{S}_i^{-1}\mathbf{m}_i\right) + \log \hat{P}(C_i)$$

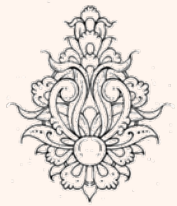
- در نتیجه خواهیم داشت:

$$g_i(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}_i)^T\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}_i) + \log \hat{P}(C_i)$$

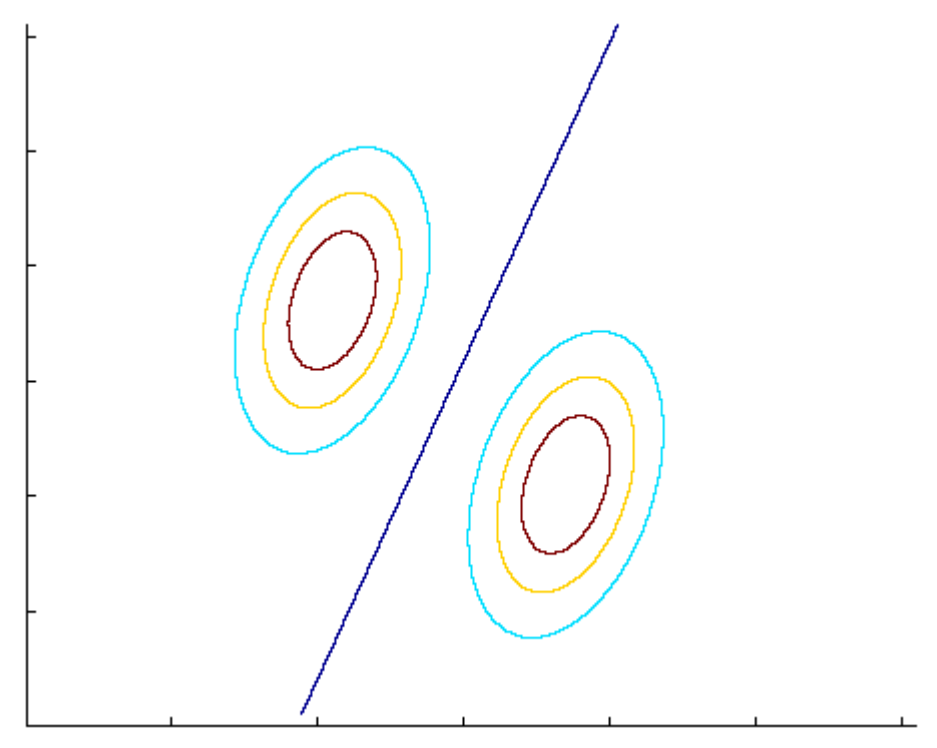
$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^T\mathbf{x} + w_{i0}$$

where

$$\mathbf{w}_i = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{m}_i \quad w_{i0} = -\frac{1}{2}\mathbf{m}_i^T\mathbf{S}^{-1}\mathbf{m}_i + \log \hat{P}(C_i)$$



جداساز خطی



تعداد پارامترها

k.d for means

d.(d+1)/2 for covariance

Diagonal S

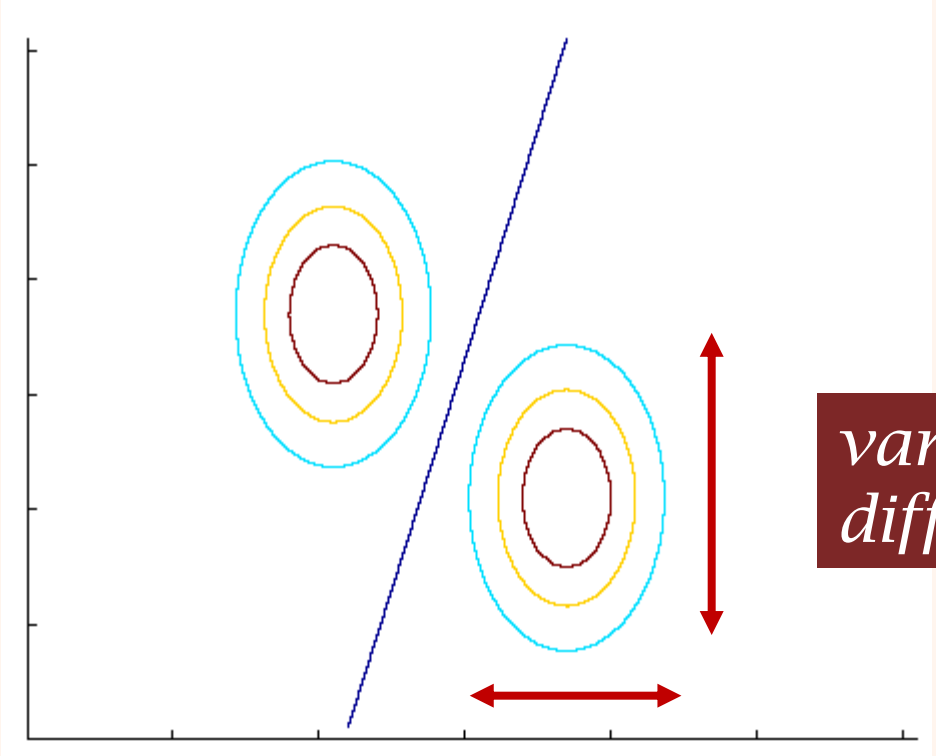
- در صورتی که متغیرها، مستقل در نظر گرفته شوند، ماتریس کواریانس قطری خواهد بود:

- $p(\mathbf{x}|C_i) = \prod_j p(x_j|C_i)$

Naïve bayes' classifier

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d}\left(\frac{x_j^t - m_{ij}}{s_j}\right)^2 + \log \hat{P}(C_i)$$

weighted Euclidean distance



variances may be different

تعداد پارامترها

k.d for means

d for covariance

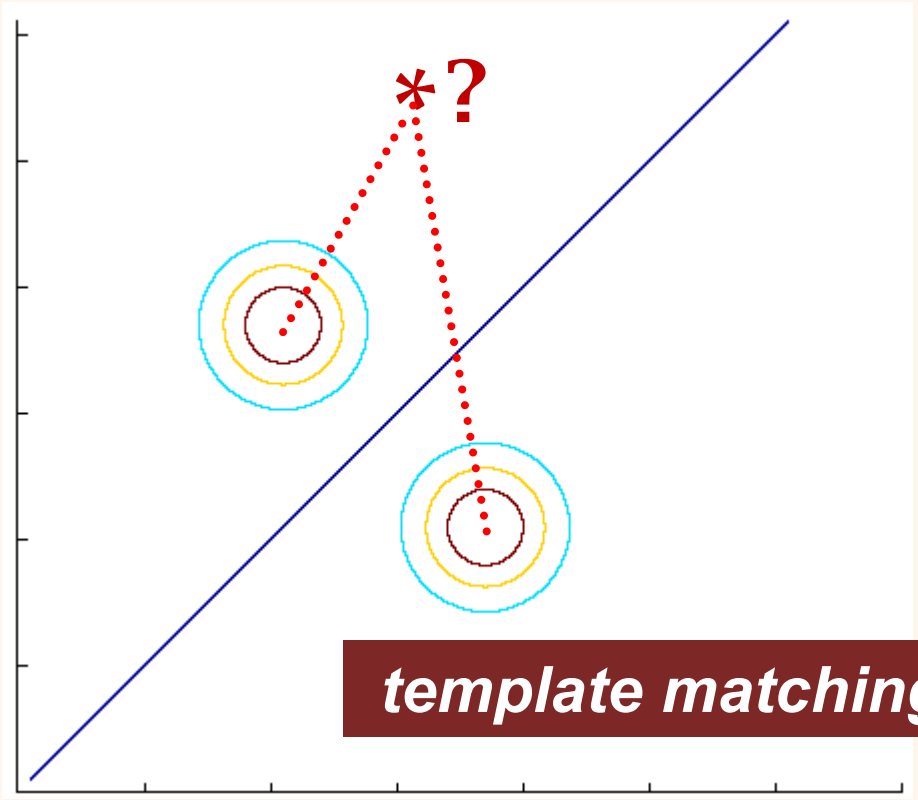
Nearest mean classifier

در صورتی که واریانس متغیرها هم یکسان در نظر گرفته شود:

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_i\|^2}{2s^2} + \log \hat{P}(C_i)$$

$$= -\frac{1}{2s^2}\sum_{j=1}^{d}\left(x_j^t - m_{ij}\right)^2 + \log \hat{P}(C_i)$$

در صورتی که تخمین میانگین‌ها هم اندازه باشند، از ضرب داخلی نیز می‌توان استفاده کرد



template matching

Tuning Complexity

Assumption	*Covariance matrix*	*No of parameters*
Shared, Hyperspheric	$\mathbf{S}_i=\mathbf{S}=s^2\mathbf{I}$	1
Shared, Axis-aligned	$\mathbf{S}_i=\mathbf{S}$, with $s_{ij}=0$	d
Shared, Hyperellipsoidal	$\mathbf{S}_i=\mathbf{S}$	$d(d+1)/2$
Different, Hyperellipsoidal	$\mathbf{S}_i$	$K\,d(d+1)/2$

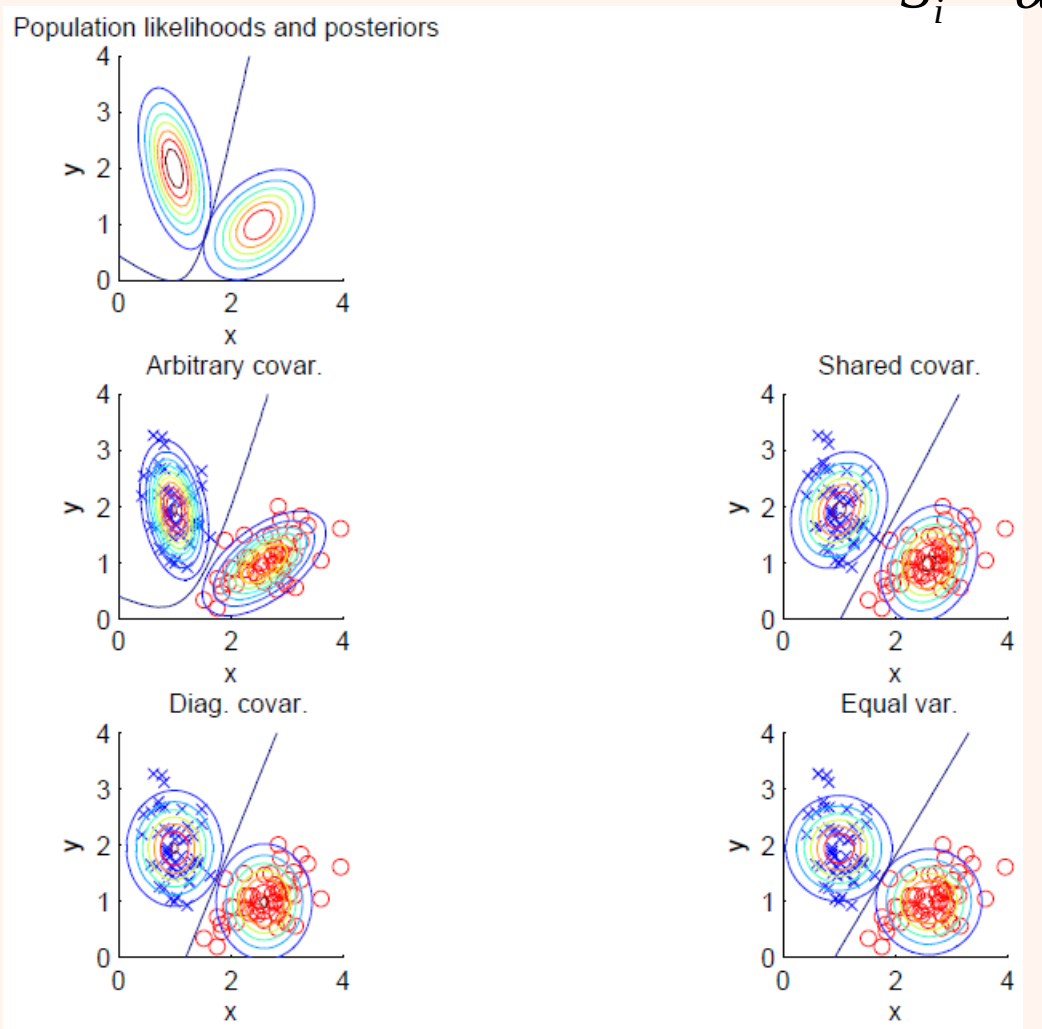
در نظر گرفتن ماتریس کواریانس مشترک معادل داشتن جداساز خطی است.

فاصله‌ی اقلیدسی زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد، که واریانس همه‌ی متغیرها یکسان در نظر گرفته شود

Regularized discriminant analysisi

Friedman, J. H. 1989. "Regularized Discriminant Analysis." Journal of American Statistical Association 84: 165–175.

$$S_i' = \alpha\sigma^2 I + \beta S + (1-\alpha-\beta)S_i$$



با انتخاب مناسب α و β می‌توان پیچیدگی مدل را تنظیم کرد.

Discrete Features

خصیصه‌های گسسته

- در برخی کاربردها، خصیصه‌ها مقداری گسسته دارند، به عنوان مثال:

$$\text{color} \in \{\text{red}, \text{blue}, \text{green}, \text{black}\}$$

$$\text{pixel} \in \{\text{on}, \text{off}\}$$

- در صورتی که مقدار اختصاص داده شده دودویی باشد (توزیع برنولی):

$$p_{ij} \equiv p\left(x_j = 1 \mid C_i\right)$$

- در صورتی که متغیرها وابسته در نظر گرفته شوند:

Naive Bayes'

$$p(x \mid C_i) = \prod_{j=1}^{d} p_{ij}^{x_j} \left(1 - p_{ij}\right)^{(1-x_j)}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \log p(\mathbf{x} \mid C_i) + \log P(C_i)$$

$$= \sum_j \left[x_j \log p_{ij} + (1 - x_j) \log \left(1 - p_{ij}\right)\right] + \log P(C_i)$$

تخمین

$$\hat{p}_{ij} = \frac{\sum_t x_j^t r_i^t}{\sum_t r_i^t}$$

خصیصه‌های گسسته (ادامه...)

- در صورتی خصیصه چندمقداری باشد.

- $x_j \in \{v_1, v_2, \ldots, v_{n_j}\}$

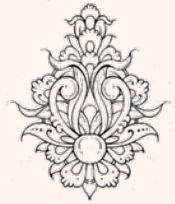
$$p_{ijk} \equiv p(z_{jk}=1 \mid C_i) = p(x_j = v_k \mid C_i)$$

- در صورتی که متغیرها مستقل باشند:

$$p(\mathbf{x} \mid C_i) = \prod_{j=1}^{d} \prod_{k=1}^{n_j} p_{ijk}^{z_{jk}}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \sum_j \sum_k z_{jk} \log p_{ijk} + \log P(C_i)$$

$$\hat{p}_{ijk} = \frac{\sum_t z_{jk}^t r_i^t}{\sum_t r_i^t}$$



رگرسیون خطی

$$g\left(x^t \mid w_1, w_0\right) = w_1 x^t + w_0$$

$$\sum_t r^t = N w_0 + w_1 \sum_t x^t$$

$$\sum_t r^t x^t = w_0 \sum_t x^t + w_1 \sum_t \left(x^t\right)^2$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} N & \sum_t x^t \\ \sum_t x^t & \sum_t \left(x^t\right)^2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \sum_t r^t \\ \sum_t r^t x^t \end{bmatrix}$$

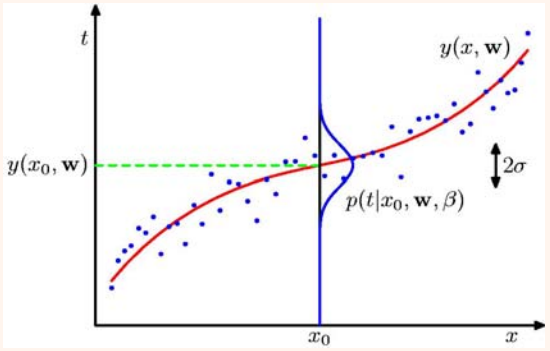
$$\mathbf{w} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$$

رگرسیون چندجمله‌ای

یادآوری

$$g\left(x^t \mid w_k,\ldots,w_2,w_1,w_0\right)=w_k\left(x^t\right)^k+\cdots+w_2\left(x^t\right)^2+w_1x^t+w_0$$

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} N & \sum_t x^t & \sum_t \left(x^t\right)^2 & \cdots & \sum_t \left(x^t\right)^k \\ \sum_t x^t & & & \cdots & \sum_t \left(x^t\right)^{k+1} \\ \vdots & & & \cdots & \\ \sum_t \left(x^t\right)^k & \sum_t \left(x^t\right)^{k+1} & \sum_t \left(x^t\right)^{k+2} & \cdots & \sum_t \left(x^t\right)^{2k} \end{bmatrix}$$



$$\mathbf{w}=\begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_k \end{bmatrix} \qquad \mathbf{y}=\begin{bmatrix} \sum_t r^t \\ \sum_t r^t x^t \\ \sum_t r^t \left(x^t\right)^2 \\ \vdots \\ \sum_t r^t \left(x^t\right)^k \end{bmatrix}$$

رگرسیون چندجمله‌ای

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} N & \sum_t x^t & \sum_t (x^t)^2 & \cdots & \sum_t (x^t)^k \\ \sum_t x^t & & & \cdots & \sum_t (x^t)^{k+1} \\ \vdots & & & \cdots & \\ \sum_t (x^t)^k & \sum_t (x^t)^{k+1} & \sum_t (x^t)^{k+2} & \cdots & \sum_t (x^t)^{2k} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}=\begin{bmatrix} \sum_t r^t \\ \sum_t r^t x^t \\ \sum_t r^t (x^t)^2 \\ \vdots \\ \sum_t r^t (x^t)^k \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}=\left(\mathbf{D}^T\mathbf{D}\right) \qquad \mathbf{y}=\mathbf{D}^T\mathbf{r}$$

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} 1 & x^1 & (x^1)^2 & \cdots & (x^1)^k \\ 1 & x^2 & (x^2)^2 & \cdots & (x^2)^k \\ \vdots & & & & \\ 1 & x^N & (x^N)^2 & \cdots & (x^N)^k \end{bmatrix} \qquad \mathbf{r}=\begin{bmatrix} r^1 \\ r^2 \\ \vdots \\ r^N \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{w}=\left(\mathbf{D}^T\mathbf{D}\right)^{-1}\mathbf{D}^T\mathbf{r}$$

رگرسیون چندمتغیره‌ی خطی

Multivariate linear Regression **Multiple Regression**

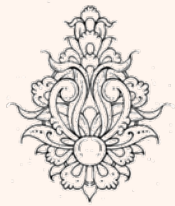
$$r^t = g\left(x^t \mid w_0, w_1, \ldots, w_d\right) + \varepsilon$$

$$= w_0 + w_1 x_1^t + w_2 x_2^t + \cdots + w_d x_d^t$$

- تابع خطا به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E\left(w_0, w_1, \ldots, w_d \mid \mathcal{X}\right) = \frac{1}{2}\sum_t \left[r^t - w_0 - w_1 x_1^t - \cdots - w_d x_d^t\right]^2$$

- مانند آن چه در پیش دابشتیم، با مشتق گرفتن، می‌توان ضرایب را به صورت تحلیلی به دست آورد.



رگرسیون چندمتغیره‌ی خطی

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1 & x_1^1 & x_2^1 & \cdots & x_d^1\\ 1 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_d^2\\ \vdots & & & & \\ 1 & x_1^N & x_2^N & \cdots & x_d^N\end{bmatrix},\ \mathbf{w}=\begin{bmatrix}w_0\\ w_1\\ w_2\\ \vdots\\ w_d\end{bmatrix},\quad \mathbf{r}=\begin{bmatrix}r^1\\ r^2\\ \vdots\\ r^N\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}=\left(\mathbf{D}^T\mathbf{D}\right)\qquad \mathbf{y}=\mathbf{D}^T\mathbf{r}$$

$$\mathbf{w}=\left(\mathbf{D}^T\mathbf{D}\right)^{-1}\mathbf{D}^T\mathbf{r}$$

$$X^T XW = X^T r \quad\Rightarrow\quad W=\left(X^T X\right)^{-1}X^T r$$

این مدل شبیه به مدلی است که برای رگرسیون چند جمله‌ای تک متغیره داشتیم.

$x_1=x,\ x_2=x^2,\ x_3=x^3,\ \ldots.\ x_k=x^k$

برای رگیرسیون چندجمله‌ای و چند متغیره نیز می‌توانیم به صورت مشابه عمل کنیم:

$z_1=x_1,\ z_2=x_2,\ z_3=x_1^2,\ z_4=x_2^2,\ z_5=x_1x_2$