Метрические методы

Виктор Владимирович Китов

МГУ им.Ломоносова, ф-т ВМиК, кафедра ММП.

I семестр 2015 г.

Содержание

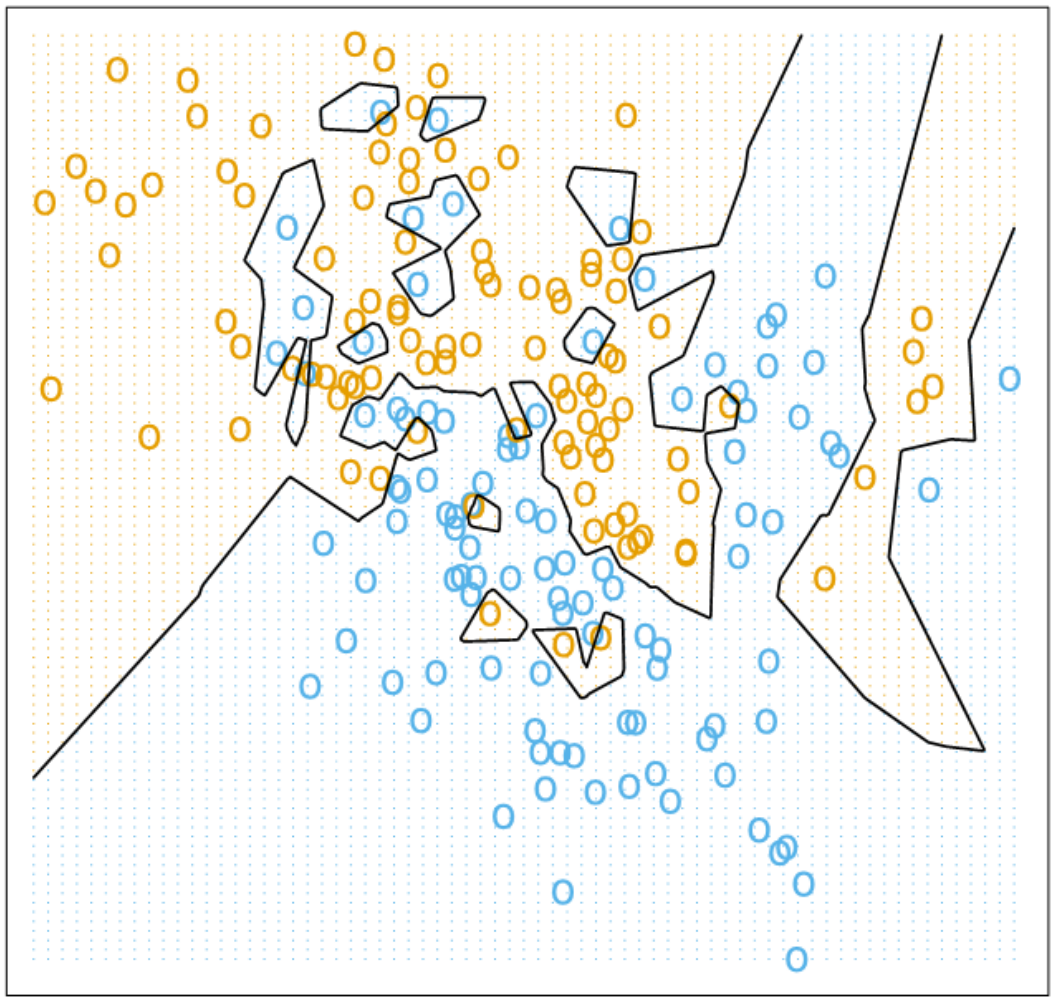
Метод K-ближайших соседей (K-nearest neighbours)

Классификация методом k ближайших соседей

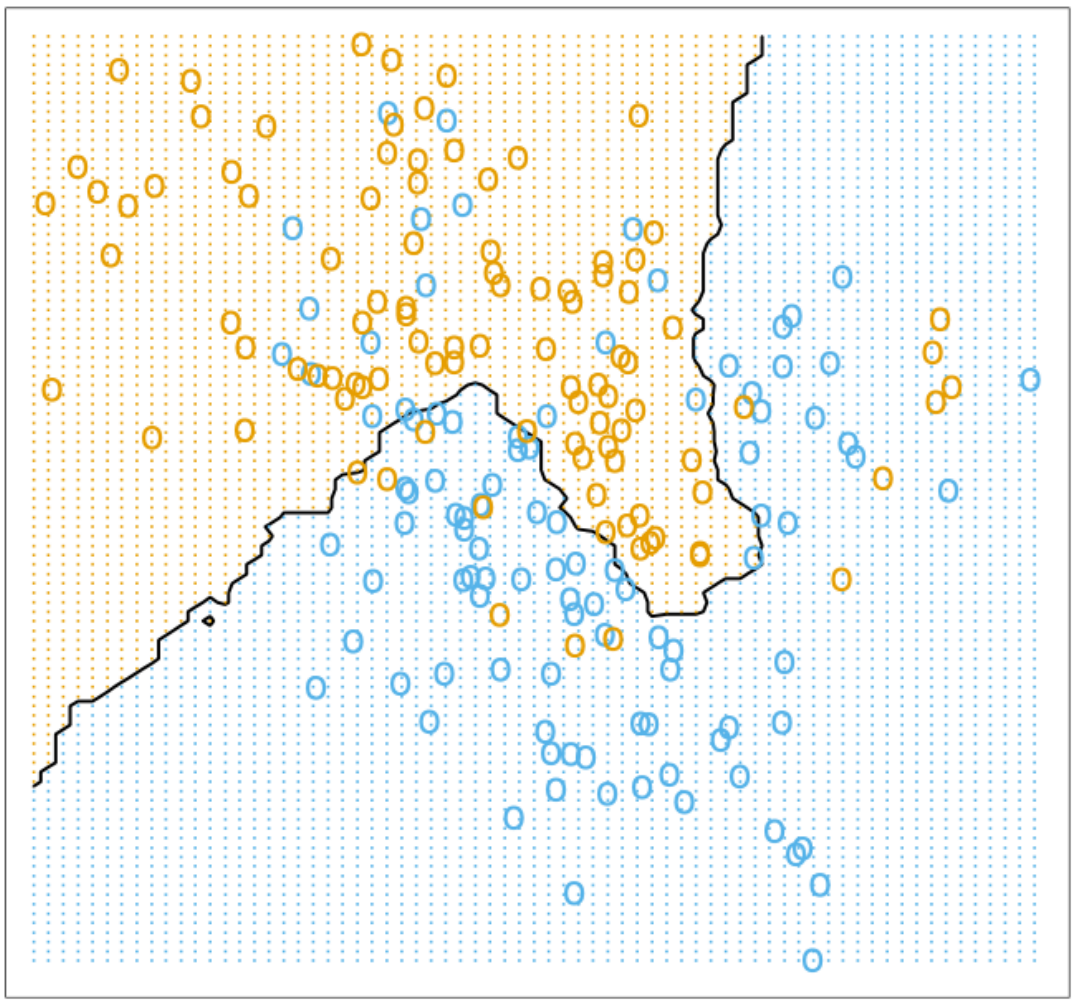
1. Найти k ближайших объектов к интересующему объекту x в обучающей выборке.
2. Сопоставить x самый часто встречающийся класс среди k соседей.

- Случай $k = 1$: алгоритм ближайшего соседа (nearest neighbour)
- Случай $k = N$: константный прогноз наиболее частым классом в выборке.
- В случае регрессии нужно усреднить характеристики k ближайших соседей.
- Основное предположение метода:
  - близкие объекты выдают похожие ответы

Пример: классификация одним ближайшим соседом



Пример: классификация 15 ближайшими соседями



Параметры метода

- Параметры:
  - число соседей k
  - функция близости $\rho(x, y)$
- Вариант метода с адаптивным k по точности ближайших соседей.

Свойства

- Преимущества:
  - нужно знать только ф-цию близости между объектами, сами признаки не нужны.
    - может быть применен к объектам любой сложности, если задана ф-ция близости
  - простая логика работы, легко объяснить и реализовать
  - интерпретируемость (case based reasoning)
  - не требует обучения
    - может применяться в online случаях.
    - K-CV можно заменить на LOO оценивание.
- Недостатки:
  - медленная классификация со сложностью $O(N)$
  - требования по памяти тоже $O(N)$, т.к. нужно хранить всю выборку
  - точность ухудшается с ростом размерности пространства

Проклятие размерности (curse of dimensionality)

- Проклятие размерности - явление, когда с ростом размерности признакового пространства D методу для поддержания точности требуется обучающая выборка, которая растет экспоненциально от D.
- Пример: оценка гистограмм

Проклятие размерности (curse of dimensionality)

- Случай K-ближайших соседей:
  - допущение: объекты распределены равномерно в признаковом пространстве
  - шар радиуса R имеет объем $V(R) = CR^D$, $C = \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)}$.
  - отношение объемов шаров радиуса R и $R - \varepsilon$:

$$\frac{V(R-\varepsilon)}{V(R)} = \left(\frac{R-\varepsilon}{R}\right)^D \xrightarrow{D\to\infty} 0$$

  - основной объем концентрируется на поверхности сферы, значит там лежат ближайшие соседи.
  - ближайшие соседи перестают быть близкими по расстоянию.
- В реальных задачах признаки могут быть распределены не равномерно по всему объему, а быть зависимыми и лежать на многообразии меньшей размерности.

Классификация - пограничный случай

Когда несколько классов имеют одинаковый ранг, можно сопоставить класс:

- случайным образом
- имеющий большую априорную вероятность
- чей ближайший представитель ближе к x
- для которого среднее значение представителей этого класса среди ближайших соседей ближе
- чей самый дальний представитель среди ближайших соседей ближе (т.е. класс представлен более компактно)

Содержание

Нормализация признаков

- Чаще всего используется Евклидова метрика близости:

$$\rho(x, z) = \sqrt{\sum_{d=1}^{D} (x^d - z^d)^2}$$

- Необходимо нормализовывать признаки.
  - Определим μ_j, σ_j, L_j, U_j как среднее значение, стандартное отклонение, минимальное и максимальное значение j-го признака.

Преобразование	**Свойства результата**
$x'_j = \frac{x_j - \mu_j}{\sigma_j}$	среднее=0, дисперсия=1.
$x'_j = \frac{x_j - L_j}{U_j - L_j}$	принадлежит интервалу $[0, 1]$.

Нормализация признаков

- Нелинейные трансформации для признаков, допускающих редкие большие значения:
  - $\tilde{x}^i = \log(x^i)$
  - $\tilde{x}^i = \left(x^i\right)^p, 0 \leq p < 1$
- Для $F_i(\alpha) = P(x^i \leq \alpha)$ преобразование $\tilde{x}^i \to F_i(x^i)$ даст признак, равномерно распределенный на $[0, 1]$.

Выбор функции расстояния

Metric	$d(x, z)$
Евклидова	$\sqrt{\sum_{i=1}^{D}(x^i - z^i)^2}$
L_p	$\sqrt[p]{\sum_{i=1}^{D}(x^i - z^i)^p}$
L_∞	$\max_{i=1,2,\ldots D} \lvert x^i - z^i \rvert$
L_1	$\sum_{i=1}^{D} \lvert x^i - z^i \rvert$
Canberra	$\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D} \frac{\lvert x^i - z^i \rvert}{x^i + z^i}$
Ланса-Уильямса	$\frac{\sum_{i=1}^{D} \lvert x^i - z^i \rvert}{\sum_{i=1}^{D} x^i + z^i}$
косинусная мера	$1\text{-}\frac{\sum_{i=1}^{D} x^i z^i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{D}(x^i)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{D}(z^i)^2}}$

Нормализующее преобразование

- x распределен согласно некоторому распределению со средним μ и невырожденной матрицей ковариации Σ ($\mu \in \mathbb{R}^D$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{D \times D}$)
- Тогда нормализующее преобразование (whitening) $z = \Sigma^{-1/2}(x - \mu)$ даст новый вектор признаков со средним 0 и ковариацией $I \in \mathbb{R}^{D \times D}$, где I - это единичная матрица.
- Доказательство:

$$\mathbb{E}z = \mathbb{E}\left\{\Sigma^{-1/2}(x - \mu)\right\} = \Sigma^{-1/2}\mathbb{E}\left\{x - \mu\right\} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^D$$

$$\begin{aligned} cov[z] &= \mathbb{E}(z - \mathbb{E}z)(z - \mathbb{E}z)^T = \mathbb{E}zz^T \\ &= \mathbb{E}\left\{\Sigma^{-1/2}(x - \mu)(x - \mu)^T(\Sigma^{-1/2})^T\right\} = \\ &= \Sigma^{-1/2}\mathbb{E}\left\{(x - \mu)(x - \mu)^T\right\}(\Sigma^{-1/2})^T = \\ &= \Sigma^{-1/2}\Sigma\Sigma^{-1/2} = I \end{aligned}$$

Расстояние между нормализациями

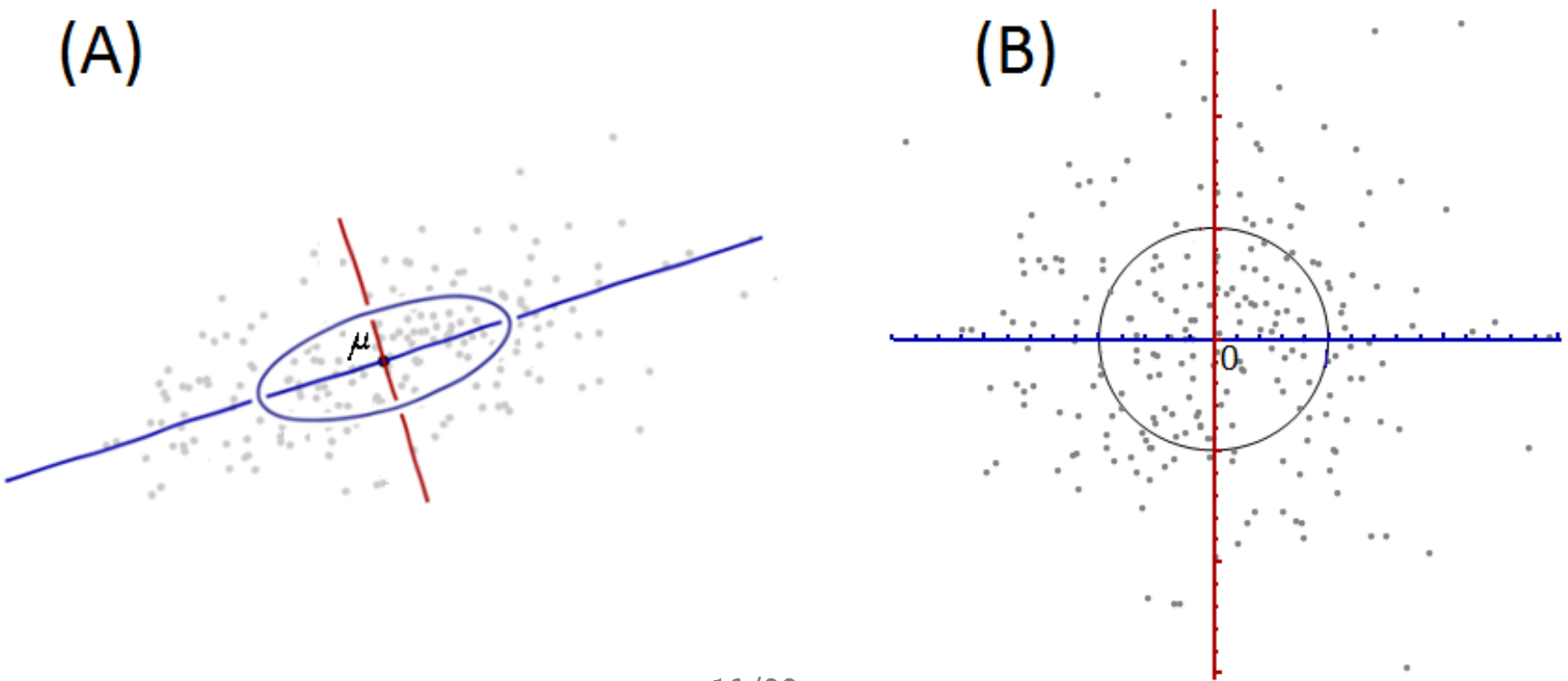
- Расстояние между x и x' можно считать в нормализованном пространстве как Евклидово расстояние между $z = \Sigma^{-1/2}(x - \mu)$ и $z' = \Sigma^{-1/2}(x' - \mu)$:

$$\begin{aligned}\rho_M(x, x') &= \rho_E(z, z') = \sqrt{(z - z')^T(z - z')} = \\ &= \sqrt{(x - x')^T\Sigma^{-1/2}\Sigma^{-1/2}(x - x')} \\ &= \sqrt{(x - x')^T\Sigma^{-1}(x - x')}\end{aligned}$$

- Это называется *расстоянием Махаланобиса*.
- Частный случай: если признаки нескореллированы и $\operatorname{Var} x^i = \sigma_i^2$, то $\rho(x, \tilde{x}) = \sqrt{\sum_i \frac{(x^i - \tilde{x}^i)^2}{\sigma_i^2}}$

Расстояние Махаланобиса - иллюстрация

(A): объекты в исходном признаковом пространстве и множество точек $G_\alpha = \{x : \rho_M(x, \mu) = \alpha\}$. (B): объекты в нормализованном признаковом пространстве и образ G_α - множество точек $\{z : \rho_E(z, 0) = \alpha\}$.



Содержание

Взвешенный учет

Определим $x_{i_1}, x_{i_2}, ...x_{i_N}$ как переупорядочивание $x_1, x_2, ...x_N$ по расстоянию до x: $\rho(x, x_{i_1}) \leq \rho(x, x_{i_2}) \leq ... \leq \rho(x, x_{i_N})$.
Определим $z_1 = x_{i_1}$, $z_2 = x_{i_2}, ...z_K = x_{i_K}$.
Метод ближайших соседей можно определить через C дискриминантных функций:

$$g_c(x) = \sum_{k=1}^{K} \mathbb{I}[z_k \in \omega_c], \quad c = 1, 2, ...C.$$

Взвешенный учет ближайших соседей:

$$g_c(x) = \sum_{k=1}^{K} w(k, \rho(x, z_k))\mathbb{I}[z_k \in \omega_c], \quad c = 1, 2, ...C.$$

Часто выбираемые веса

Независимые от x:

$$w_k = \alpha^k, \quad \alpha \in (0,1)$$

$$w_k = \frac{K+1-k}{K}$$

Зависимые от x:

$$w_k = \begin{cases} \frac{\rho(z_K,x)-\rho(z_k,x)}{\rho(z_K,x)-\rho(z_1,x)}, & \rho(z_K,x) \neq \rho(z_1,x) \\ 1 & \rho(z_K,x) = \rho(z_1,x) \end{cases}$$

$$w_k = \frac{1}{\rho(z_k,x)}$$

Понятие отступа

- Рассмотрим обучающую выборку: $(x_1, c_1), (x_2, c_2), ...(x_N, c_N)$, где c_i - правильный класс для объекта x_i, а $\mathbf{C} = \{1, 2, ...C\}$ - множество допустимых классов.
- Определим понятие отступа:

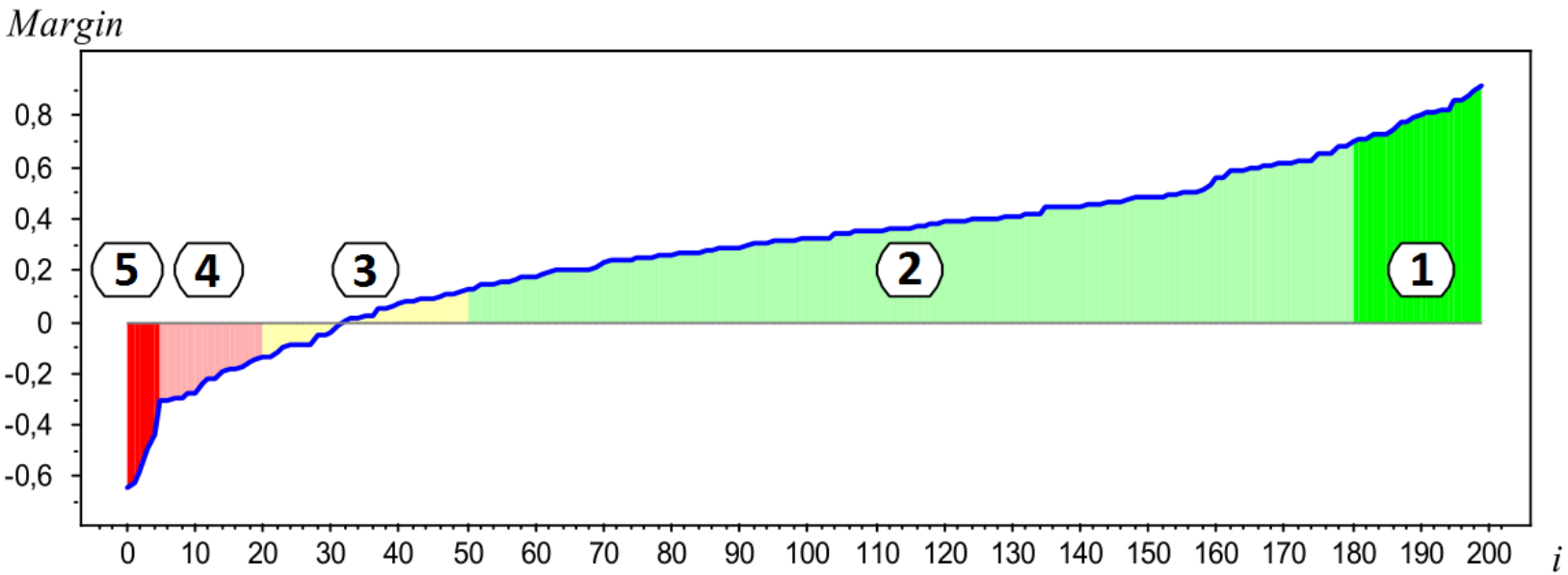
$$M(x_i, c_i) = g_{c_i}(x_i) - \max_{c \in \mathbf{C} \setminus \{\mathbf{c_i}\}} g_c(x_i)$$

  - отступ отрицательный <=> объект x_i был неправильно классифицирован
  - величина отступа показывает, насколько классификатор уверен, что объект x_i может быть отнесен к истинному классу c_i

Классификация объектов по отступам

По величине отступа объекты делятся на следующие категории:

1. Объекты, классифицированные верно с высокой степенью уверенности
2. Правильно классифицированные объекты
3. Пограничные объекты (их классификация неустойчива)
4. Неправильно классифицированные объекты
5. Объекты, сильно выбивающиеся из закономерности, определенной классификатором



Критерии качества по отступу

Хороший классификатор:

- минимизирует область отрицательных отступов
- классифицирует правильно с высокой степенью уверенности (высоким $M(x_i, c_i)$)