Метрические методы классификации и регрессии

Воронцов Константин Вячеславович
vokov@forecsys.ru
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: http://shad.yandex.ru/lectures

ШАД Яндекс • 16 февраля 2015

Содержание

Гипотезы компактности или непрерывности

Задачи классификации и регрессии:

X — объекты, Y — ответы;

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка;

Гипотеза компактности (для классификации):

Близкие объекты, как правило, лежат в одном классе.

Гипотеза непрерывности (для регрессии):

Близким объектам соответствуют близкие ответы.

Формализация понятия «близости»:

Задана функция расстояния $\rho\colon X \times X \to [0, \infty)$.

Пример. Евклидово расстояние и его обобщение:

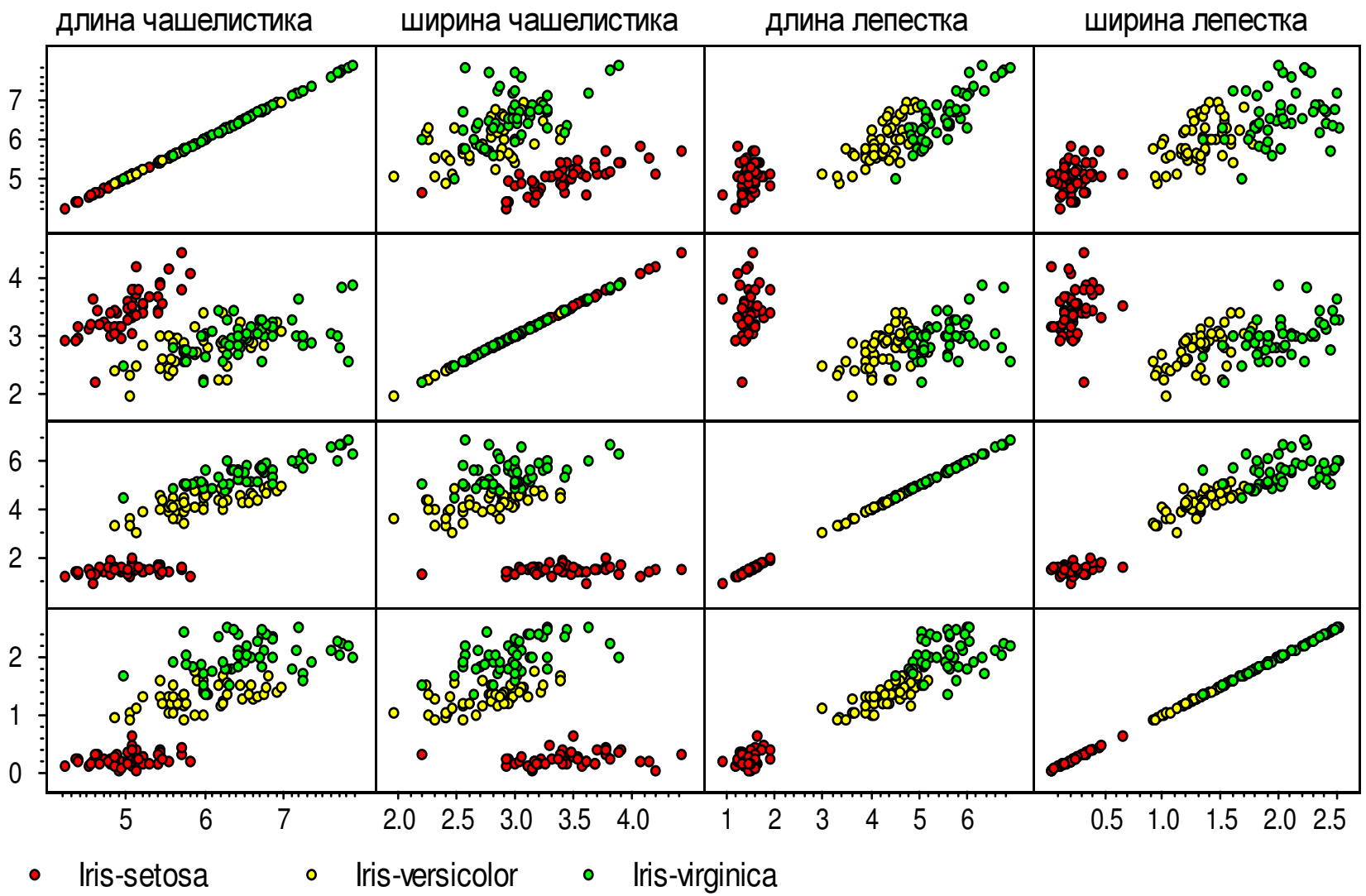
$$\rho(x, x_i) = \left(\sum_{j=1}^{n} \left|x^j - x_i^j\right|^2\right)^{1/2} \qquad \rho(x, x_i) = \left(\sum_{j=1}^{n} w_j \left|x^j - x_i^j\right|^p\right)^{1/p}$$

$x = (x^1, \ldots, x^n)$ — вектор признаков объекта x,

$x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$ — вектор признаков объекта x_i.

Пример: задача классификации цветков ириса [Фишер, 1936]

$n = 4$ признака, $|Y| = 3$ класса, длина выборки $\ell = 150$.



Обобщённый метрический классификатор

Для произвольного $x \in X$ отранжируем объекты $x_1, \ldots, x_\ell$:

$$\rho(x, x^{(1)}) \leqslant \rho(x, x^{(2)}) \leqslant \cdots \leqslant \rho(x, x^{(\ell)}),$$

$x^{(i)}$ — i-й сосед объекта x среди $x_1, \ldots, x_\ell$;
$y^{(i)}$ — ответ на i-м соседе объекта x.

Метрический алгоритм классификации:

$$a(x; X^\ell) = \arg\max_{y \in Y} \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \left[y^{(i)} = y\right] w(i, x)}_{\Gamma_y(x)},$$

$w(i, x)$ — вес (степень важности) i-го соседа объекта x,
неотрицателен, не возрастает по i.
$\Gamma_y(x)$ — *оценка близости* объекта x к классу y.

Метод ближайшего соседа

$w(i,x) = [i{=}1]$.

Преимущества:

- простота реализации;
- интерпретируемость решений,
  вывод на основе прецедентов (case-based reasoning, CBR)

Недостатки:

- неустойчивость к погрешностям (шуму, выбросам);
- отсутствие настраиваемых параметров;
- низкое качество классификации;
- приходится хранить всю выборку целиком.

Метод k ближайших соседей

$w(i,x) = [i \leqslant k]$.

Преимущества:

- менее чувствителен к шуму;
- появился параметр k.

Оптимизация числа соседей k:

функционал скользящего контроля leave-one-out

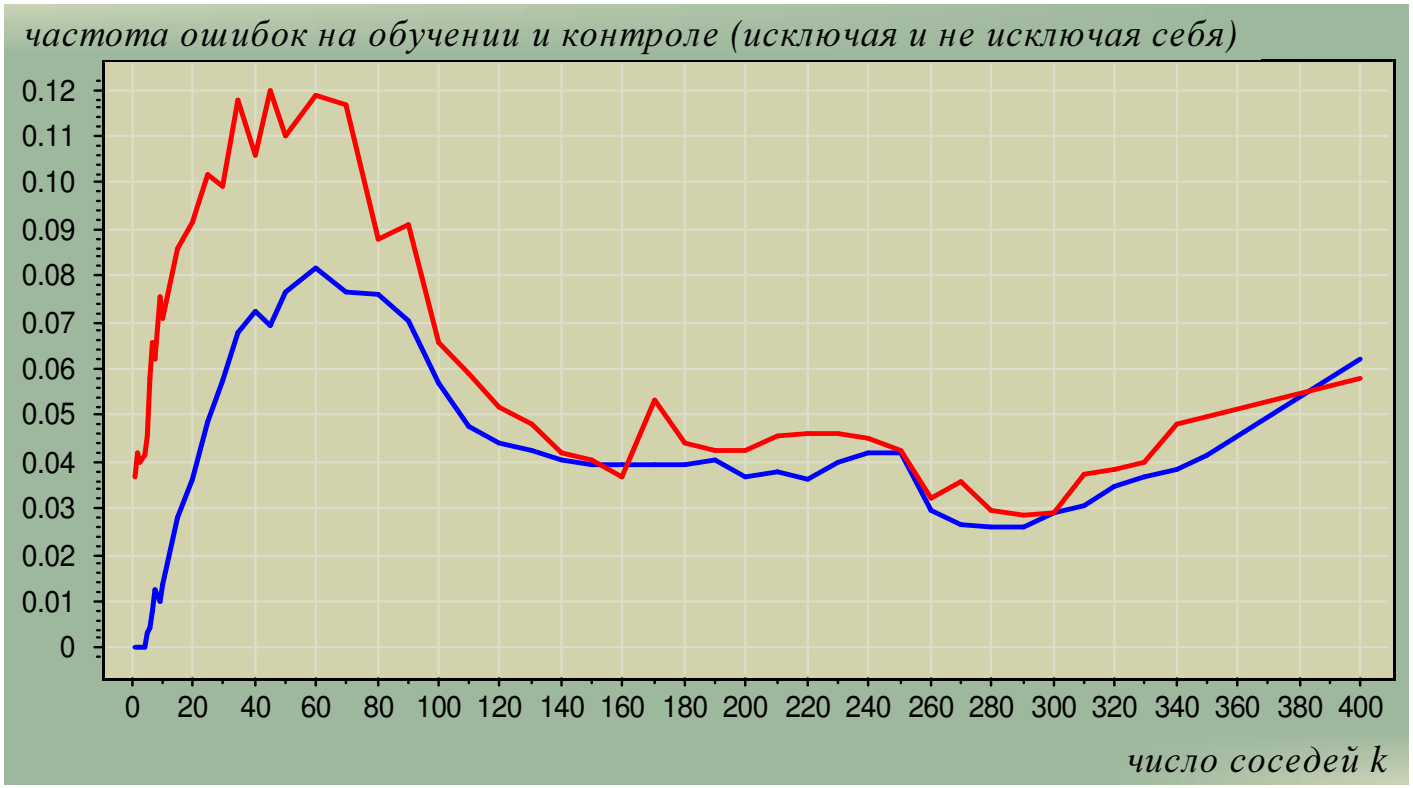
$$\mathrm{LOO}(k, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \Big[a\big(x_i; X^\ell \setminus \{x_i\}, k\big) \neq y_i \Big] \to \min_k .$$

Проблема:

- неоднозначность классификации при $\Gamma_y(x) = \Gamma_s(x)$, $y \neq s$.

Пример зависимости LOO(k)

Пример. Задача UCI: Breast Cancer (Wisconsin)



— смещённое число ошибок, когда объект учитывается как сосед самого себя

— несмещённое число ошибок LOO

В реальных задачах минимум редко бывает при $k = 1$.

Метод k взвешенных ближайших соседей

$w(i,x) = [i \leqslant k]w_i$,
где w_i — вес, зависящий только от номера соседа;

Возможные эвристики:

$w_i = \frac{k+1-i}{k}$ — линейное убывающие веса;
$w_i = q^i$ — экспоненциально убывающие веса, $0 < q < 1$;

Проблемы:

- как более обоснованно задать веса?
- возможно, было бы лучше, если бы вес $w(i,x)$ зависел не от порядкового номера соседа i, а от расстояния до него $\rho(x, x^{(i)})$.

Метод окна Парзена

$w(i,x) = K\left(\frac{\rho(x,x^{(i)})}{h}\right)$, где h — ширина окна,
$K(r)$ — ядро, не возрастает и положительно на $[0,1]$.

Метод парзеновского окна *фиксированной ширины:*

$$a(x; X^\ell, h, K) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]\, K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

Метод парзеновского окна *переменной ширины:*

$$a(x; X^\ell, k, K) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]\, K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{\rho(x, x^{(k+1)})}\right)$$

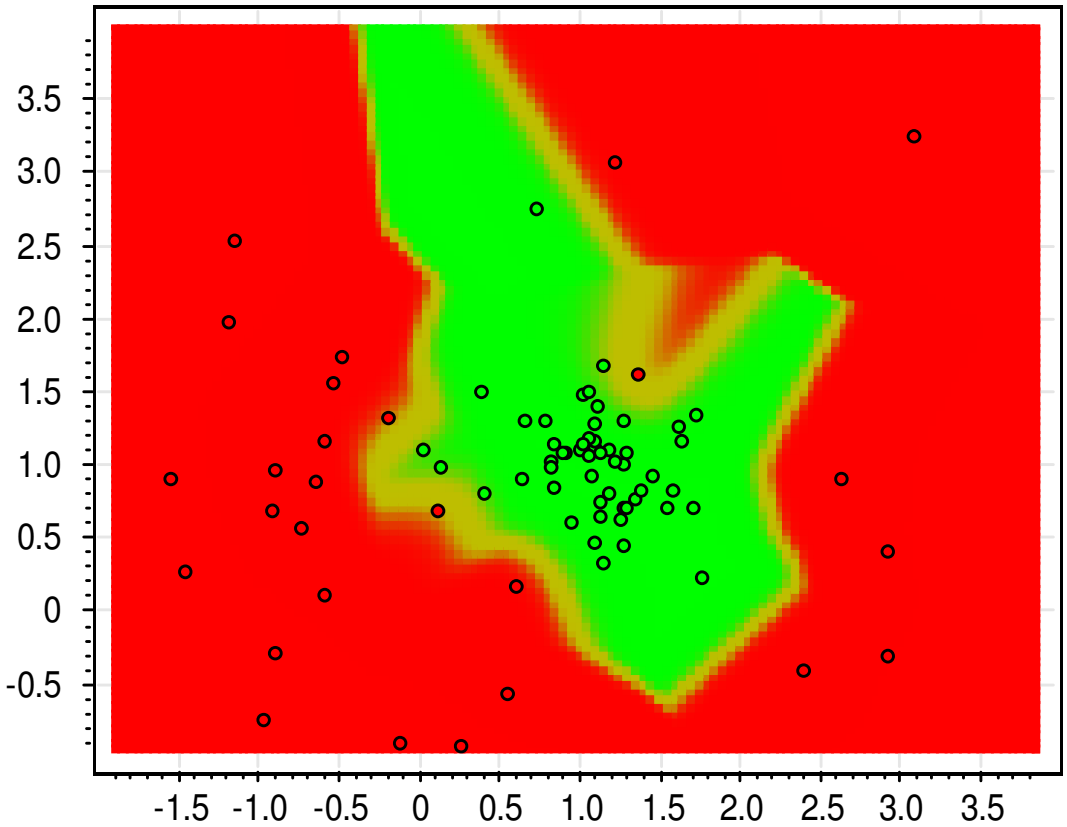
Оптимизация параметров — по критерию LOO:

- выбор ширины окна h или числа соседей k
- выбор ядра K

Парзеновское окно переменной ширины, $k = 1$

Пример: двумерная выборка, два класса $Y = \{-1, +1\}$.

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Gamma_y(x) = \operatorname{sign}\big(\underbrace{\Gamma_{+1}(x) - \Gamma_{-1}(x)}\big)$$



Метод потенциальных функций

$$w(i,x) = \gamma^{(i)} K\left(\frac{\rho(x,x^{(i)})}{h^{(i)}}\right)$$

Более простая запись (без ранжирования объектов):

$$a(x; X^\ell) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]\, \gamma_i\, K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h_i}\right),$$

где γ_i — веса объектов, $\gamma_i \geqslant 0$, $h_i > 0$.

Физическая аналогия:

γ_i — величина «заряда» в точке x_i;

h_i — «радиус действия» потенциала с центром в точке x_i;

y_i — знак «заряда» (в случае двух классов $Y = \{-1, +1\}$);

в электростатике $K(r) = \frac{1}{r}$ или $\frac{1}{r+a}$,

для задач классификации нет таких ограничений на K.

Метод потенциальных функций = линейный классификатор

Два класса: $Y = \{-1, +1\}$.

$$a(x; X^\ell) = \arg\max_{y \in Y} \Gamma_y(x) = \operatorname{sign}\big(\Gamma_{+1}(x) - \Gamma_{-1}(x)\big) =$$

$$= \operatorname{sign} \sum_{i=1}^{\ell} \gamma_i y_i \, K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h_i}\right).$$

Сравним с линейной моделью классификации:

$$a(x) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{n} \gamma_j f_j(x).$$

- $f_j(x) = y_j K\big(\frac{1}{h_j}\rho(x, x_j)\big)$ — новые признаки объекта x
- γ_j — веса линейного классификатора
- $n = \ell$ — число признаков равно числу объектов обучения

Задачи регрессии и метод наименьших квадратов

- X — объекты (часто $\mathbb{R}^n$); Y — ответы (часто $\mathbb{R}$, реже $\mathbb{R}^m$);
  $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка;
  $y_i = y(x_i)$, $y : X \to Y$ — неизвестная зависимость;

- $a(x) = f(x, \alpha)$ — параметрическая модель зависимости,
  $\alpha \in \mathbb{R}^p$ — вектор параметров модели.

- Метод наименьших квадратов (МНК):

$$Q(\alpha, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} w_i \big(f(x_i, \alpha) - y_i\big)^2 \to \min_\alpha,$$

  где w_i — вес, степень важности i-го объекта.

- **Недостаток:**
  надо иметь хорошую параметрическую модель $f(x, \alpha)$

Формула Надарая–Ватсона

Приближение константой $f(x,\alpha)=\alpha$ в окрестности $x \in X$:

$$Q(\alpha; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} w_i(x)\big(\alpha - y_i\big)^2 \to \min_{\alpha\in\mathbb{R}};$$

где $w_i(x) = K\left(\frac{\rho(x,x_i)}{h}\right)$ — веса объектов x_i относительно x;
$K(r)$ — *ядро*, невозрастающее, ограниченное, гладкое;
h — ширина окна сглаживания.

Формула *ядерного сглаживания* Надарая–Ватсона:

$$a_h(x; X^\ell) = \frac{\sum\limits_{i=1}^{\ell} y_i w_i(x)}{\sum\limits_{i=1}^{\ell} w_i(x)} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{\ell} y_i K\left(\frac{\rho(x,x_i)}{h}\right)}{\sum\limits_{i=1}^{\ell} K\left(\frac{\rho(x,x_i)}{h}\right)}.$$

Обоснование формулы Надарая–Ватсона

Теорема

Пусть выполнены следующие условия:

1) *выборка* $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ *простая, из распределения* $p(x, y)$;
2) *ядро* $K(r)$ *ограничено:* $\int_0^\infty K(r)\,dr < \infty$, $\lim\limits_{r\to\infty} rK(r) = 0$;
3) *зависимость* $\mathsf{E}(y|x)$ *не имеет вертикальных асимптот:*
   $\mathsf{E}(y^2|x) = \int_Y y^2 p(y|x)\,dy < \infty$ *при любом* $x \in X$;
4) *последовательность* h_ℓ *убывает, но не слишком быстро:*
   $\lim\limits_{\ell\to\infty} h_\ell = 0$, $\lim\limits_{\ell\to\infty} \ell h_\ell = \infty$.

Тогда имеет место сходимость по вероятности:

$$a_{h_\ell}(x; X^\ell) \xrightarrow{P} \mathsf{E}(y|x) \text{ в любой точке } x \in X,$$

в которой $\mathsf{E}(y|x)$, $p(x)$ *и* $\mathsf{D}(y|x)$ *непрерывны и* $p(x) > 0$.

Выбор ядра K и ширины окна h

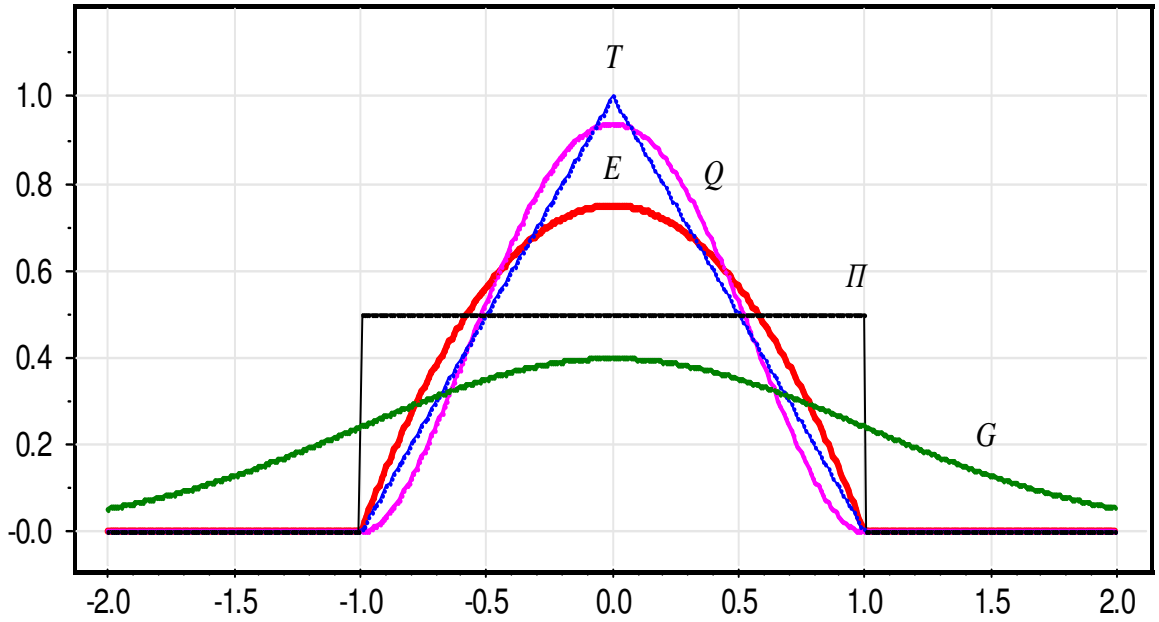
- Ядро $K(r)$
  — существенно влияет на гладкость функции $a_h(x)$,
  — слабо влияет на качество аппроксимации.
- Ширина окна h
  — существенно влияет на качество аппроксимации.
- При неравномерной сетке $\{x_i\}$ — переменная ширина окна:

$$w_i(x) = K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h(x)}\right),$$

  где $h(x) = \rho(x, x^{(k+1)})$, $x^{(k)}$ — k-й сосед объекта x.
- Оптимизация ширины окна по скользящему контролю:

$$\text{LOO}(h, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell}\Big(a_h\big(x_i; X^\ell \setminus \{x_i\}\big) - y_i\Big)^2 \to \min_h.$$

Часто используемые ядра $K(r)$



$E(r) = (1 - r^2)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квадратичное (Епанечникова);
$Q(r) = (1 - r^2)^2\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квартическое;
$T(r) = \big(1 - |r|\big)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — треугольное;
$G(r) = \exp\big(-\frac{1}{2}r^2\big)$ — гауссовское;
$\Pi(r) = \big[|r| \leqslant 1\big]$ — прямоугольное.

Проблема выбросов и локально взвешенное сглаживание

Проблема выбросов: точки с большими случайными ошибками y_i сильно искажают функцию $a_h(x)$

Основная идея:
чем больше величина ошибки $\varepsilon_i = \left|a_h\left(x_i; X^\ell \backslash \{x_i\}\right) - y_i\right|$,
тем больше прецедент (x_i, y_i) похож на выброс,
тем меньше должен быть его вес $w_i(x)$.

Эвристика:
домножить веса $w_i(x)$ на коэффициенты $\gamma_i = \tilde{K}(\varepsilon_i)$,
где $\tilde{K}$ — ещё одно ядро, вообще говоря, отличное от $K(r)$.

Рекомендация:
квартическое ядро $\tilde{K}(\varepsilon) = K_Q\left(\frac{\varepsilon}{6\,\mathrm{med}\{\varepsilon_i\}}\right)$,
где $\mathrm{med}\{\varepsilon_i\}$ — медиана вариационного ряда ошибок.

Алгоритм LOWESS (LOcally WEighted Scatter plot Smoothing)

Вход: X^ℓ — обучающая выборка;
Выход: коэффициенты γ_i, $i = 1, \ldots, \ell$;

1: инициализация: $\gamma_i := 1$, $i = 1, \ldots, \ell$;
2: **повторять**
3: **для всех** объектов $i = 1, \ldots, \ell$
4: вычислить оценки скользящего контроля:

$$a_i := a_h\left(x_i; X^\ell \setminus \{x_i\}\right) = \frac{\sum\limits_{j=1,\, j\neq i}^{\ell} y_j \gamma_j K\left(\frac{\rho(x_i,x_j)}{h(x_i)}\right)}{\sum\limits_{j=1,\, j\neq i}^{\ell} \gamma_j K\left(\frac{\rho(x_i,x_j)}{h(x_i)}\right)};$$

5: **для всех** объектов $i = 1, \ldots, \ell$
6: $\gamma_i := \tilde{K}\left(|a_i - y_i|\right)$;
7: **пока** коэффициенты γ_i не стабилизируются;

Понятие отступа в задачах классификации

Рассмотрим классификатор $a\colon X \to Y$ вида

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Gamma_y(x), \quad x \in X.$$

Определение

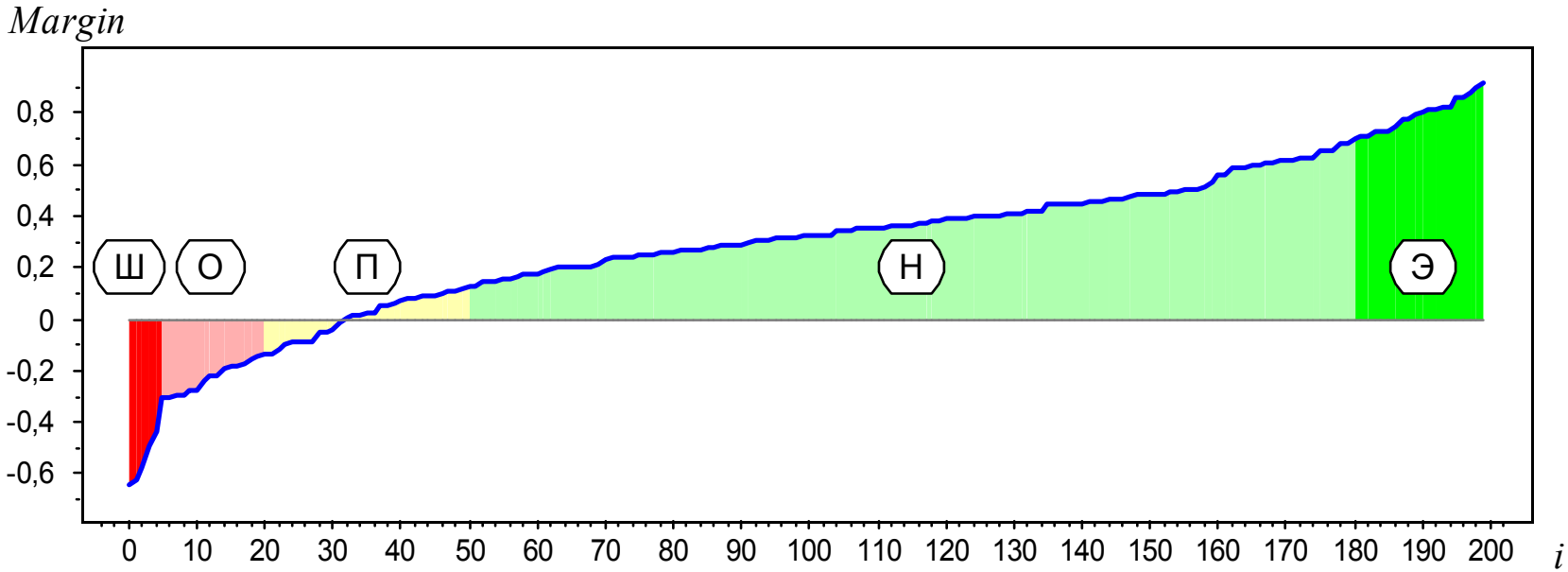
Отступом (margin) объекта $x_i \in X^\ell$ относительно классификатора $a(x)$ называется величина

$$M(x_i) = \Gamma_{y_i}(x_i) - \max_{y \in Y \setminus y_i} \Gamma_y(x_i).$$

- Отступ показывает *степень типичности* объекта: чем больше $M(x_i)$, тем «глубже» x_i в своём классе;
- $M(x_i) < 0 \;\Leftrightarrow\; a(x_i) \neq y_i$;

Типы объектов, в зависимости от отступа

- Э — *эталонные* (можно оставить только их);
- Н — *неинформативные* (можно удалить из выборки);
- П — *пограничные* (их классификация неустойчива);
- О — *ошибочные* (причина ошибки — плохая модель);
- Ш — *шумовые* (причина ошибки — плохие данные).



Отбор эталонов (prototype selection)

Задача: выбрать оптимальное подмножество эталонов $\Omega \subseteq X^\ell$

Классификатор будет иметь вид:

$$a(x;\Omega) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{x^{(i)} \in \Omega} \left[y^{(i)} = y\right] w(i,x),$$

$x^{(i)}$ — i-й сосед объекта x среди Ω;
$y^{(i)}$ — ответ на i-м соседе объекта x;
$w(i,x)$ — произвольная функция веса i-го соседа.

Алгоритм STOLP:

1. исключить выбросы и, возможно, пограничные объекты;
2. найти по одному эталону в каждом классе;
3. добавлять эталоны, пока есть отрицательные отступы;

Алгоритм STOLP

Вход: X^ℓ; параметры δ, ℓ_0;

Выход: Множество опорных объектов $\Omega \subseteq X^\ell$;

1: **для всех** $x_i \in X^\ell$ проверить, является ли x_i выбросом:
2: **если** $M(x_i, X^\ell) < \delta$ **то**
3: $X^{\ell-1} := X^\ell \setminus \{x_i\}$; $\ell := \ell - 1$;
4: Инициализация: взять по одному эталону от каждого класса:
$\Omega := \left\{ \arg\max_{x_i \in X^\ell_y} M(x_i, X^\ell) \;\middle|\; y \in Y \right\}$;
5: **пока** $\Omega \neq X^\ell$;
6: Выделить множество объектов с ошибкой $a(x; \Omega)$:
$E := \{x_i \in X^\ell \setminus \Omega : M(x_i, \Omega) < 0\}$;
7: **если** $|E| < \ell_0$ **то выход**;
8: Присоединить к Ω объект с наименьшим отступом:
$x_i := \arg\min_{x \in E} M(x, \Omega)$; $\Omega := \Omega \cup \{x_i\}$;

Алгоритм STOLP: преимущества и недостатки

Преимущества отбора эталонов:

- сокращается число хранимых объектов;
- сокращается время классификации;
- объекты распределяются по величине отступов;

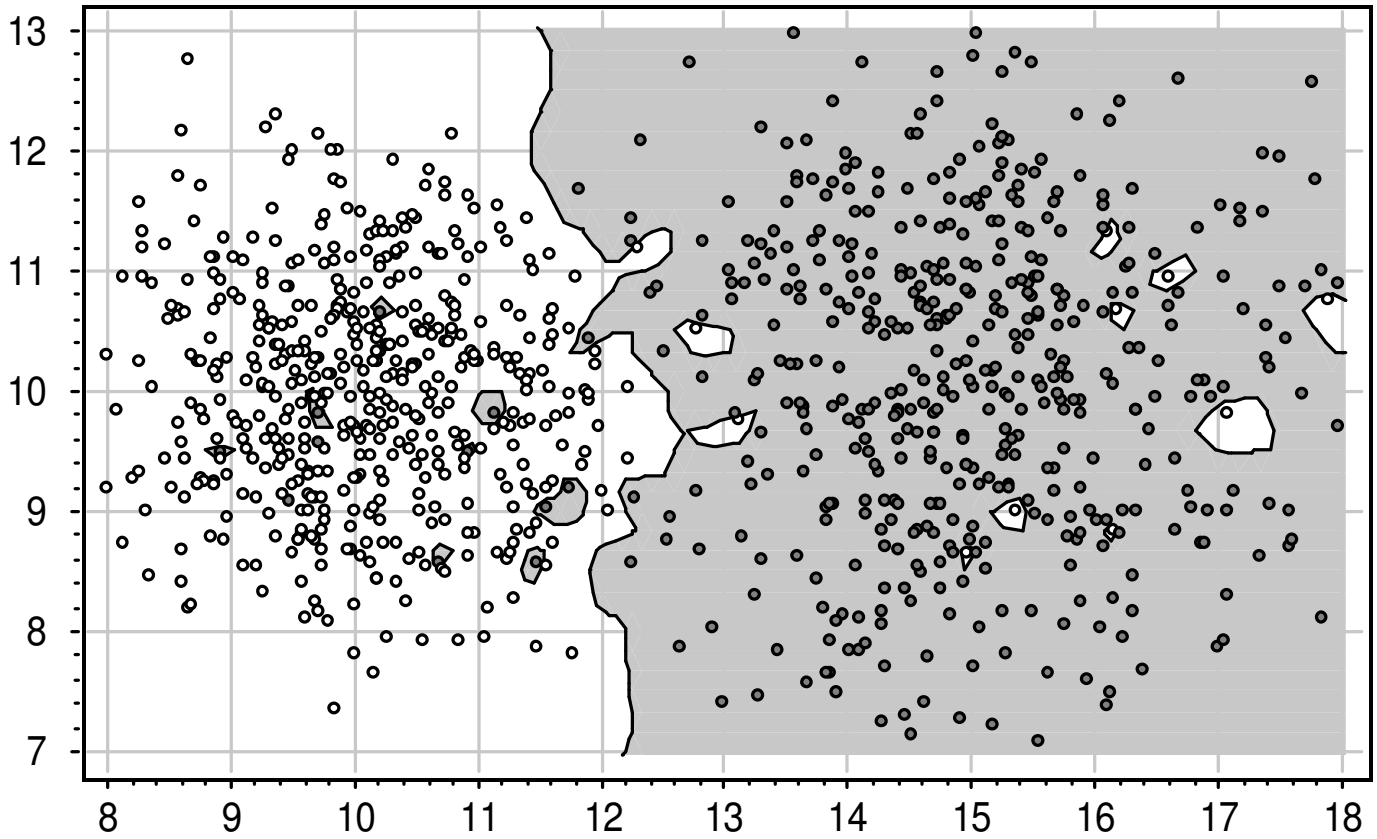
Недостатки алгоритма STOLP:

- необходимость задавать параметр δ;
- относительно низкая эффективность $O(|\Omega|^2\ell)$.

Другие методы отбора эталонов:

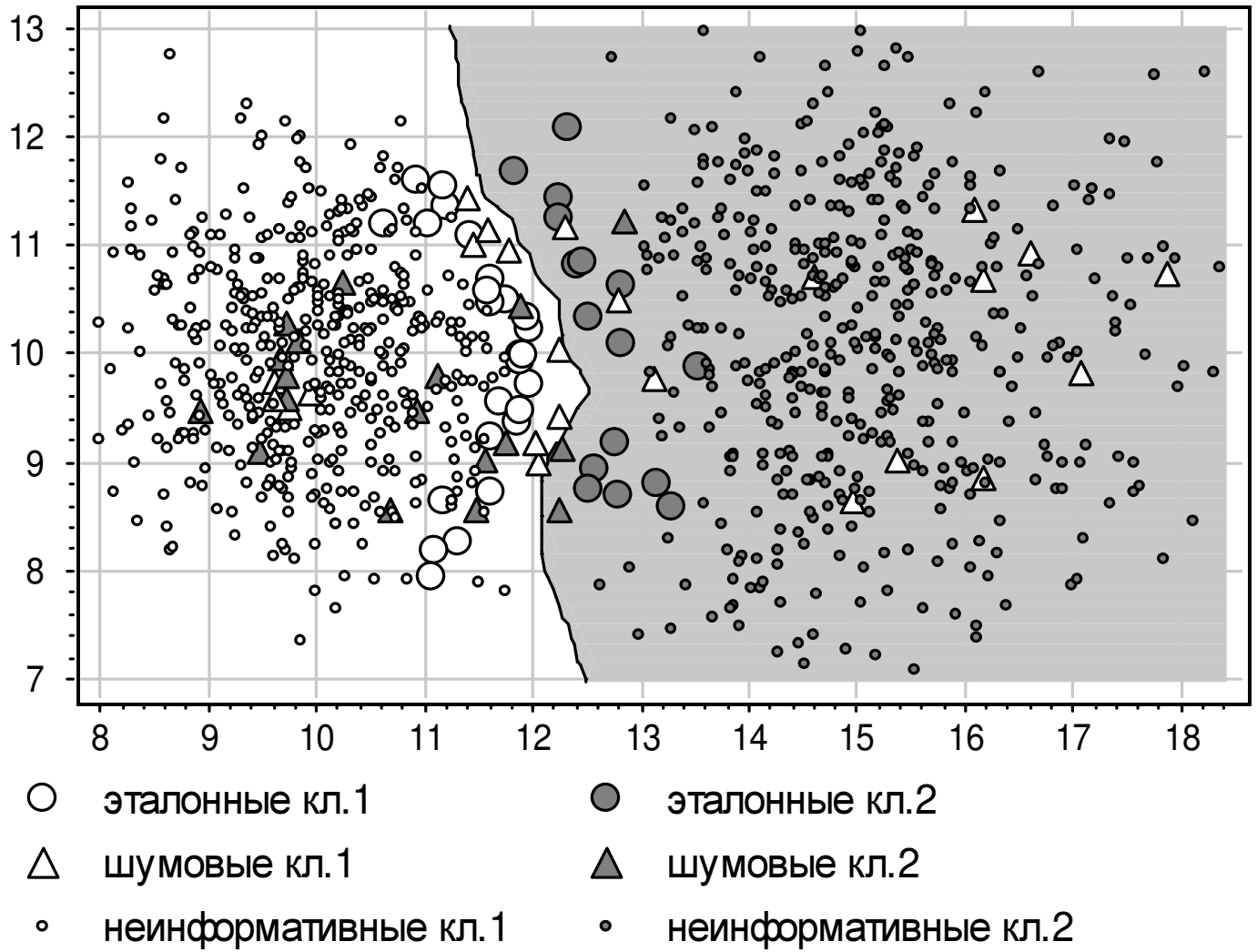
- стратегия последовательного удаления не-эталонов;
- минимизация полного скользящего контроля (CCV);
- FRiS-STOLP на основе оценок *конкурентного сходства*.

Модельные данные



Модельная задача классификации: 1000 объектов.
Алгоритм 1NN

Результат отбора эталонных объектов



Задача выбора метрики

Взвешенная метрика Минковского:

$$\rho(x, x_i) = \left(\sum_{j=1}^{n} w_j \left| f_j(x) - f_j(x_i) \right|^p \right)^{\frac{1}{p}},$$

где w_j — неотрицательные веса признаков, $p > 0$.

В частности, если $w_j \equiv 1$ и $p = 2$, то имеем евклидову метрику.

Роль весов w_j:

1) нормировка признаков;
2) степень важности признаков;
3) отбор признаков (какие $w_j = 0$?);

Жадное добавление признаков

1. А вдруг одного признака уже достаточно?
Расстояние по j-му признаку: $\rho_j(x, x_i) = \left|x^j - x_i^j\right|$.
Выберем наилучшее расстояние: $\text{LOO}(j) \to \min$.

2. Добавим к расстоянию ρ ещё один признак j:

$$\rho^p(x, x_i) := \rho^p(x, x_i) + w_j \rho_j^p(x, x_i), \quad w_j \geqslant 0.$$

Найдём признак j и вес w_j, при которых $\text{LOO}(j, w_j) \to \min$
(два вложенных цикла перебора).

3. Можно корректировать вес признака k, уже вошедшего в ρ:

$$\rho^p(x, x_i) := \rho^p(x, x_i) + w'_k \rho_k^p(x, x_i), \quad w'_k \geqslant -w_k.$$

4. Будем добавлять признаки, пока LOO уменьшается.

Резюме в конце лекции

- Метрические классификаторы — одни из самых простых. Качество классификации определяется качеством метрики.
- Непараметрическая регрессия = ядерное сглаживание применяется, когда нет хорошей параметрической модели
- Что можно обучать:
  — число ближайших соседей k или ширину окна;
  — веса объектов;
  — набор эталонов (prototype selection);
  — метрику (distance learning, similarity learning);
  — веса признаков.
- *Распределение отступов* делит объекты на эталонные, неинформативные, пограничные, ошибки и выбросы.