

# Метрические методы - продолжение

Виктор Владимирович Китов

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

I семестр 2015 г.

## Метод парзеновского окна

- Метод парзеновского окна:

$$\hat{f}(x) = \arg \max_{y \in Y} \sum_{n=1}^N \mathbb{I}[y_n = y] K \left( \frac{\rho(x, x_n)}{h(x)} \right)$$

- Выбор  $h(x)$ :
  - $h(x) = \text{const}$
  - $h(x) = \rho(x, z_K)$  где  $z_K$  -  $K$ -й ближайший сосед.
    - лучше для неравномерно распределенных объектов
    - для  $K(z) = \mathbb{I}[z \leq 1]$  и  $h(x) = \rho(x, z_K)$  приводит к методу  $K$ -ближайших соседей.

## Сложность алгоритма ближайших соседей

- Сложность обучения  $O(1)$ 
  - нужно просто запомнить новый объект
- Сложность предсказания  $O(N)$ 
  - нужно посчитать расстояние от  $x$  до всех объектов обучающей выборки
- Варианты упрощения поиска:
  - уменьшить число объектов обучающей выборки
    - удалить шумы (editing)
    - удалить неинформативные объекты (condensing)
  - структурировать признаковое пространство и просматривать только потенциально полезные его части
    - LAESA, KD-tree, ball-tree

# Содержание

- 1 Уменьшение числа объектов обучающей выборки
- 2 Структурирование признакового пространства

## Понятие отступа

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

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

- отступ отрицательный  $\Leftrightarrow$  объект  $x_i$  был неправильно классифицирован
- величина отступа показывает, насколько классификатор уверен, что объект  $x_i$  может быть отнесен к истинному классу  $c_i$

## Удаление шумов

### Основная идея

Шумы - это объекты, сильно выбивающиеся из закономерности, определяемой методом ближайших соседей. То есть их можно определить как

$$\{x_i : M(x_i, c_i) < -\delta\}$$

для достаточно большого  $\delta > 0$ .

### Алгоритм 1: Фильтрация шумовых наблюдений

**для каждого**  $x_i, c_i$  в обучающей выборке  $TS$ :  
рассчитать  $M(x_i, c_i)$

**вернуть** отфильтрованную обучающую выборку:  
 $T' = \{(x_i, c_i) : M(x_i, c_i) \geq -\delta\}$

Может потребоваться несколько итераций алгоритма.

## Удаление неинформативных наблюдений

### Основная идея

Неинформативные наблюдения - это такие наблюдения, которые не добавляют информации о классе при их учете.

- Обычно неинформативных наблюдений - большинство для выборок большого объема с простой разделяющей кривой.

#### Алгоритм 2: Фильтрация неинформативных наблюдений

**для каждого** класса  $c = 1, 2, \dots, C$ : # добавить самый репрезента-

$x(c) = \arg \max_{x_i: c_i=c} \{M(x_i, c_i)\}$  # тивный представитель

Инициализировать множество эталонов:  $\Omega = \{x(c), c = 1, 2, \dots, C\}$

**повторять, пока** точность существенно улучшается:

$x_j = \arg \min_{x_i \in TS \setminus \Omega} M(x, \Omega)$  # присоединили объект

$\Omega = \Omega \cup x_j$  # с наименьшим отступом

**вернуть**  $\Omega$

# Содержание

- 1 Уменьшение числа объектов обучающей выборки
- 2 Структурирование признакового пространства**



# Структурирование признакового пространства

- LAESA:
  - отсев заведомо слишком далеких объектов, чем найденный
- Иерархическое упорядочивание объектов через систему простых вложенных фигур
  - KD-trees - вложенные прямоугольники
  - ball-trees - вложенные шары
- Комментарии:
  - вложенность понимается в том смысле, что дочерние фигуры совместно содержат все объекты родительской фигуры
  - метод ближайших соседей перестает быть онлайн-овым, т.к. структура признакового пространства оптимизируется под TS.
  - мера близости должна удовлетворять неравенству треугольника

## LAESA - инициализация

- Выделяем систему  $P$  опорных объектов  $z_1, z_2, \dots, z_P$  из объектов  $TS$ :
  - $z_1$  выбирается случайным образом
  - для  $p = 2, 3, \dots, P$ :  $z_p = \arg \max_{x \in TS} \sum_{i=1}^{p-1} \rho(z_i, x)$
- Основное используемое свойство:
  - 1 по неравенству треугольника:  

$$\rho(x, x') \geq |\rho(x', z_p) - \rho(z_p, x)|$$
  - 2 поскольку  $p = 1, 2, \dots, P$  - любое, то справедлива оценка снизу на расстояние:

$$\rho(x, x') \geq G(x') = \max_{p=1,2,\dots,P} |\rho(x', z_p) - \rho(z_p, x)| \quad (1)$$

- 3 Поскольку  $x' \in \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ , то все  $\rho(x', z_k)$  в (1) можно посчитать заранее.

# LAESA - алгоритм

- Обозначения:

- $x$  - объект, для которого требуется найти ближайшего соседа.
- $\Omega$  - множество объектов-потенциальных кандидатов для ближайшего соседа

- Алгоритм:

- $\Omega = TS$
- находим расстояния  $d_i = \rho(x, z_i)$
- текущий ближайший сосед  $x_{n.n.} = \arg \min_{z_i} \rho(x, z_i)$ ,  
 $d_{n.n.} = \rho(x, x_{n.n.})$
- для каждого  $x' \in \Omega$  оцениваем расстояние снизу:  
 $\rho(x, x') \geq G(x') = \max_{p=1,2,\dots,P} |\rho(x', z_k) - \rho(z_k, x)|$
- отсеиваем заведомо неподходящие объекты:  
 $\Omega = \Omega \setminus \{x' \in \Omega : G(x') \geq d_{n.n.}\}$
- находим следующего кандидата  $\tilde{x} = \arg \min_{x' \in \Omega} G(x')$
- если  $\rho(x, \tilde{x}) < \rho(x, x_{n.n.})$ ,
  - то  $x_{n.n.} = \tilde{x}$ ,  $d_{n.n.} = \rho(x, \tilde{x})$ , переход на шаг 5.
  - иначе  $\Omega = \Omega \setminus \{\tilde{x}\}$ , переход на шаг 6.

## Комментарии по LAESA

- Требования по памяти:  $PN$
- Оптимальное  $P$  - баланс между сложностью расчета  $G(x')$  и сложностью расчета  $\rho(x, x')$ .
- Для метода  $K$  ближайших соседей - поддерживать список не 1, а  $K$  ближайших кандидатов в алгоритме.

# KD-tree

- Построение субоптимального дерева:

построить\_узел\_дерева(condition ,  $\Omega$ ):

**если**  $|\Omega| < n_{min}$ :

**вернуть** лист с приписанными объектами  $\Omega$

**иначе**:

найти признак с наибольшим разбросом на  $\Omega$ :

$$i = \arg \max_i \sigma(\{x_n^i : x_n \in \Omega\})$$

найти медиану на  $\Omega$ :  $\mu = \text{median}(\{x_n^i : x_n \in \Omega\})$

**вернуть** внутреннюю вершину с двумя потомками:

левый потомок=

$$\text{построить\_узел\_дерева}(x^i < \mu, \{x_k \in \Omega : x_k^i < \mu\})$$

правый потомок=

$$\text{построить\_узел\_дерева}(x^i \geq \mu, \{x_k \in \Omega : x_k^i \geq \mu\})$$

## KD-tree

- сложность  $O(DN \log_2 N)$ , поскольку на уровне  $h$  с  $k$  внутренними вершинами:
  - $|\Omega_1| = n_1, \dots, |\Omega_k| = n_k, n_1 + n_2 + \dots + n_k \leq N$
  - требуется посчитать  $\sigma$  для  $D$  признаков - сложность  $O(D(n_1 + \dots + n_k)) \leq O(DN)$
- требуется повторить процедуру для каждого уровня  $h = 1, 2, \dots, H, H \leq \lceil \log_2 N \rceil$ , поскольку каждый раз число наблюдений в листе делится пополам и дерево сбалансированное
- геометрически эффективнее брать не медиану, а среднее, но дерево может оказаться несбалансированным.
- глубина  $O(\log N)$  для сбалансированного случая, а для несбалансированного в наихудшем случае глубина  $O(N)$

## KD-tree: расстояние до прямоугольника

- Каждой вершине дерева соответствует гиперпрямоугольник. Расстояние до вершины = расстоянию до гиперпрямоугольника.
- Расстояние от  $x = [x^1, \dots, x^D]^T$  до прямоугольника  $\{(h_1, \dots, h_D) : h_d^{min} \leq h_d \leq h_d^{max}\}$  считается как  $\rho(x, z)$ , где  $z$  - ближайшая на прямоугольнике точка со следующими координатами:

$$z^d = \begin{cases} h_d^{min} & x^d < h_d^{min} \\ x^d & h_d^{min} \leq x^d \leq h_d^{max} \\ h_d^{max} & x^d > h_d^{max} \end{cases}$$

## KD-tree: поиск ближайшего соседа

- Для интересующего объекта  $x$  находим лист дерева, которому он принадлежит:
  - для текущей вершины смотрим дискриминантный признак  $x^i$  и порог вершины  $\mu$
  - если  $x^i < \mu$ , переходим к левому потомку, иначе - к правому, пока не дойдем до листа.
- Полным перебором среди всех объектов в листе определяем ближайшего соседа



## KD-tree: поиск ближайшего соседа

- Обходим все дерево, переходя к вершине-предку и считая расстояния до всех потомков данной вершины-предка
  - если расстояние до вершины больше расстояния до текущего ближайшего соседа - пропускаем соответствующую вершину
  - если нет, то делаем проверки для вложенных вершин-потомков
  - если нашли более близкий объект, то обновляем текущего ближайшего соседа и расстояние до него.

# Ball trees

- Вложенная система шаров, каждой вершине дерева приписан шар.
- Вложенность: все объекты из  $TS$ , попавшие в родительский шар, попадут в один и только один из дочерних шаров.
- Характеристики шара:
  - центр  $c$
  - объекты, приписанные к шару  $z_1, z_2, \dots, z_K$
  - радиус  $R = \max_j \|z_j - c\|$

## Ball tree: рекурсивная генерация

- для родительского шара  $Ball(c, \Omega)$  (с центром  $c$  и приписанными объектами  $\Omega$ ):
  - выбрать  $c_1 = \arg \max_{z_i \in \Omega} \|z_i - c\|$
  - выбрать  $c_2 = \arg \max_{z_i \in \Omega} \|z_i - c_1\|$
  - разбить объекты  $\Omega$  на 2 группы:

$$\Omega_1 = \{z_i : \|z_i - c_1\| < \|z_i - c_2\|\}$$

$$\Omega_2 = \{z_i : \|z_i - c_2\| \leq \|z_i - c_1\|\}$$

- сопоставить родительскому шару 2 дочерних:  $Ball(c_1, \Omega_1)$  и  $Ball(c_2, \Omega_2)$ .

## Ball tree: расстояние до шара

По неравенству треугольника для любого  $z \in B = \text{Ball}(c, R)$  :

$$\rho(x, c) \leq \rho(x, z) + \rho(z, c)$$

откуда следует, что

$$\rho(x, z) \geq \rho(x, c) - \rho(z, c) \geq \rho(x, c) - R$$

Эта нижняя граница достигается для  $z \in B$ , лежащего между  $x$  и  $c$  на расстоянии  $R$  от центра.

## Комментарии

- Для применения LAESA, KD-tree и ball-tree мера близости  $\rho(x, z)$  должна удовлетворять неравенству треугольника.
- Чем выше  $D$ , тем менее эффективно структурирование пространства.
  - оно рассчитано разделять объекты на геометрически компактные группы
  - при больших  $D$  почти все объекты становятся одинаково далекими друг от друга
  - в KD-tree: близость по отдельным координатам не гарантирует близости по остальным.
- Для больших  $D$  ball-tree работает эффективнее, чем KD-tree, за счет того, что шары более точно оценивают нижнюю границу для расстояния до точек, чем прямоугольники.

## Подробности методов

Более подробное описание отдельных методов см. в

- Statistical Pattern Recognition. 3rd Edition, Andrew R. Webb, Keith D. Copsey, John Wiley&Sons Ltd., 2011, раздел 4.2.
- Воронцов К.В. Курс лекций. Метрические методы классификации и регрессии.