

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)»

МФТИ • 23 сентября 2022

- 1 Определение расстояний между объектами**
 - Гипотезы компактности или непрерывности
 - Векторные меры близости
 - Беспознаковые способы вычисления расстояний
- 2 Метрические методы классификации**
 - Обобщённый метрический классификатор
 - От ближайшего соседа к потенциальным функциям
 - Задача отбора эталонных объектов
- 3 (Непара)метрические методы регрессии**
 - Ядерное сглаживание (kernel smoothing)
 - Выбор ядра K и ширины окна h
 - Отсев выбросов

Гипотезы непрерывности и компактности

Задачи классификации и регрессии:

X — объекты, Y — ответы;

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

Гипотеза непрерывности (для регрессии):

близким объектам соответствуют близкие ответы.

выполнена:



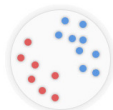
не выполнена:



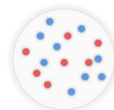
Гипотеза компактности (для классификации):

близкие объекты, как правило, лежат в одном классе.

выполнена:

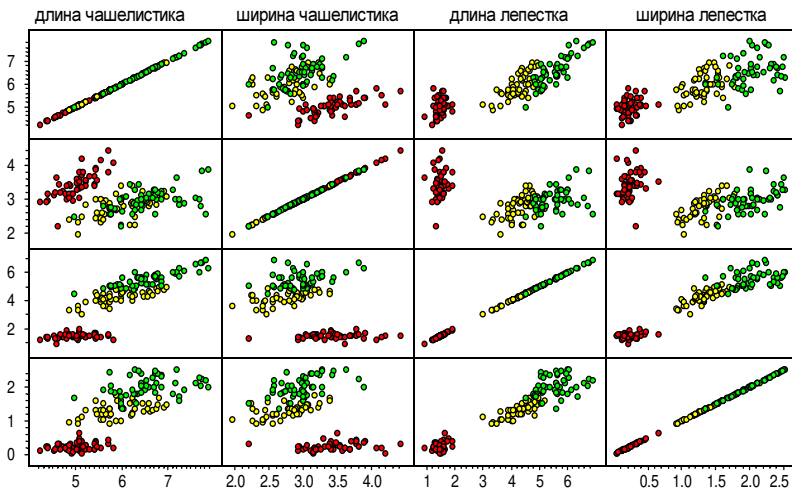


не выполнена:



Пример: задача классификации цветков ириса [Фишер, 1936]

Привычная мера близости — евклидова метрика в \mathbb{R}^2 .



Формализация понятия «близости»

Евклидова метрика и обобщённая метрика Минковского:

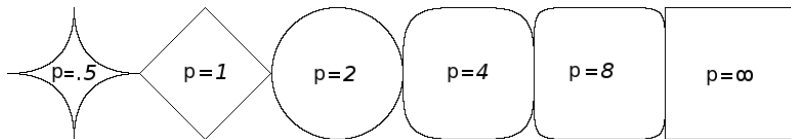
$$\rho(x, x_i) = \left(\sum_{j=1}^n |x^j - x_i^j|^2 \right)^{1/2} \quad \rho(x, x_i) = \left(\sum_{j=1}^n w_j |x^j - x_i^j|^p \right)^{1/p}$$

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

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

w_1, \dots, w_n — веса признаков, которые можно обучать.

Эквидистантные поверхности при различных p :

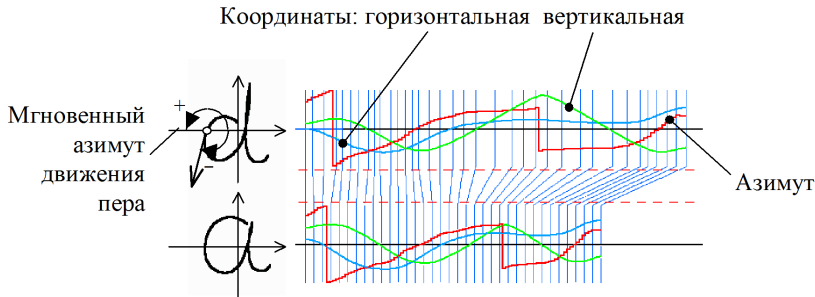


Расстояния между строками / сигналами

Для строк — редакторское расстояние Левенштейна:

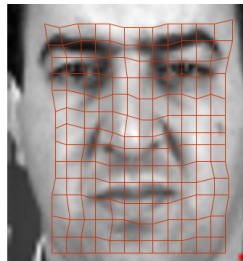
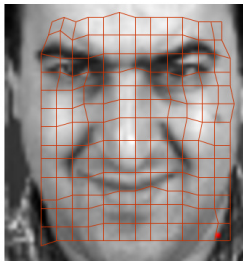
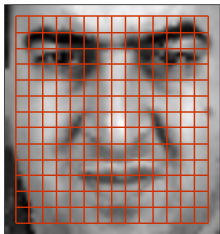
СТGGGCTAAAAGGTCCTTAGCC . . TTTAGAAAAA . GGGCCATTAGGAAATTGC
СТGGGACTAAA . . . CCTTAGCCTATTTACAAAAATGGGCCATTAGG . . . TTGC

Для сигналов — энергия сжатий и растяжений:



Расстояния между изображениями

Расстояние между изображениями на основе выравнивания:



Оценивается энергия растяжения прямоугольной сетки

Обобщённый метрический классификатор

Для произвольного $x \in X$ отранжируем объекты x_1, \dots, x_ℓ :

$$\rho(x, x^{(1)}) \leq \rho(x, x^{(2)}) \leq \dots \leq \rho(x, x^{(\ell)}),$$

$x^{(i)}$ — i -й сосед объекта x среди x_1, \dots, x_ℓ ;

$y^{(i)}$ — ответ на i -м соседе объекта x .

Метрический алгоритм классификации:

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

$w(i, x)$ — вес (степень важности) i -го соседа объекта x , неотрицателен, не возрастает по i .

$\Gamma_y(x)$ — оценка близости объекта x к классу y .

Метод k ближайших соседей (k nearest neighbors, k NN)

$w(i, x) = [i \leq 1]$ — метод ближайшего соседа

$w(i, x) = [i \leq k]$ — метод k ближайших соседей

Преимущества:

- простота реализации (lazy learning);
- параметр k можно оптимизировать по leave-one-out:

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

Недостатки:

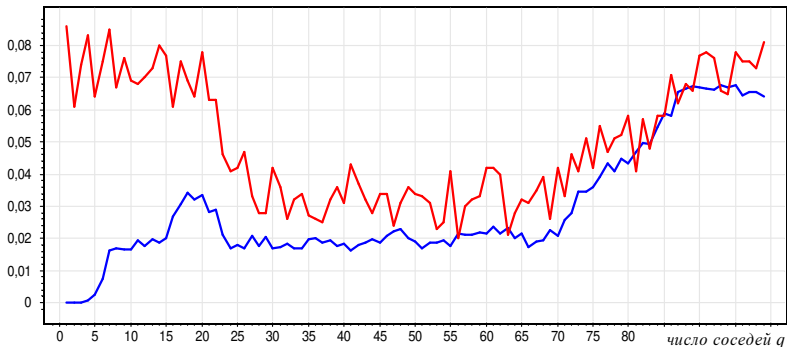
- неоднозначность классификации при $\Gamma_y(x) = \Gamma_s(x)$, $y \neq s$.
- не учитываются значения расстояний



Зависимость LOO от числа соседей

Пример. Задача UCI: Iris.

частота ошибок



- смещённое число ошибок, когда объект учитывается как сосед самого себя
- несмещённое число ошибок LOO

Метод k взвешенных ближайших соседей

$$w(i, x) = [i \leq k] w_i,$$

где w_i — вес, зависящий только от номера соседа;

Возможные эвристики:

$w_i = \frac{k+1-i}{k}$ — линейные 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:

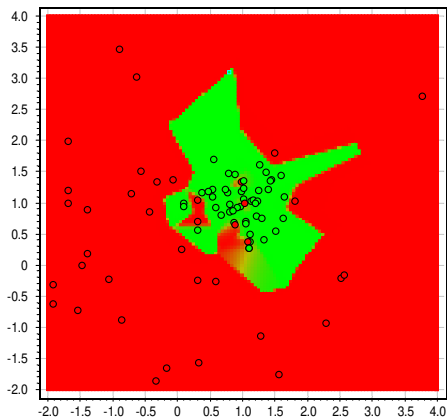
- выбор ширины окна h или числа соседей k
- выбор ядра K

Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 0.05$

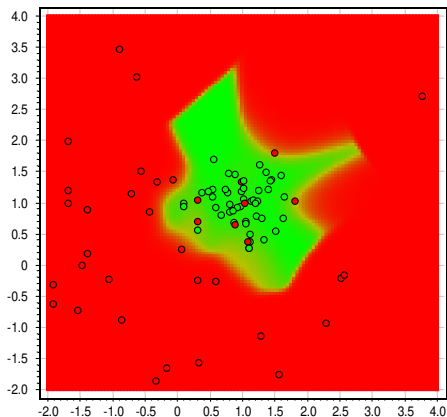


Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 0.2$

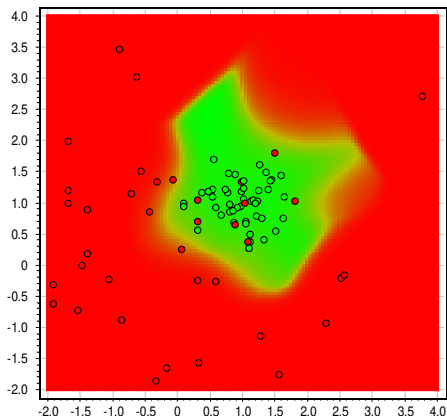


Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 0.3$

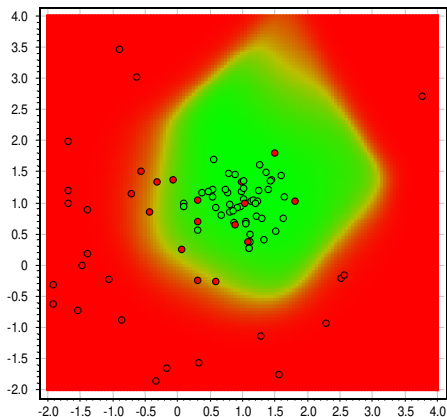


Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 0.5$

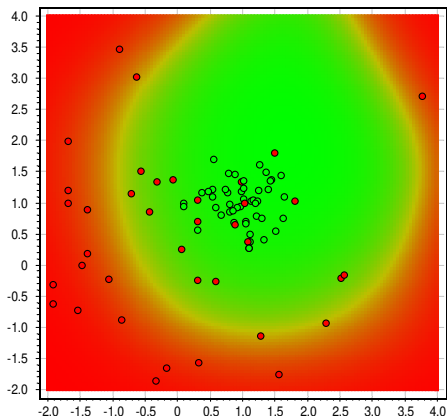


Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 1.0$

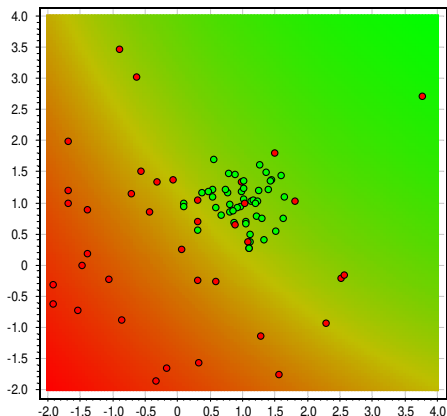


Парzenовское окно фиксированной ширины h

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

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

$h = 5.0$



Метод потенциальных функций

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

Более простая запись (здесь можно не ранжировать объекты):

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

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

Физическая аналогия из электростатики:

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 $Y = \{-1, +1\}$);

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

В задачах классификации нет ограничений ни на K , ни на $|Y|$.

Метод потенциальных функций = линейный классификатор

Два класса: $Y = \{-1, +1\}$.

$$\begin{aligned} a(x; X^\ell) &= \arg \max_{y \in Y} \Gamma_y(x) = \text{sign}(\Gamma_{+1}(x) - \Gamma_{-1}(x)) = \\ &= \text{sign} \sum_{i=1}^{\ell} \gamma_i y_i K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h_i}\right). \end{aligned}$$

Сравним с линейной моделью классификации:

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

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

Полный скользящий контроль CCV

Функционал *полного* скользящего контроля
(complete cross-validation, CCV):

$$CCV(X^L) = \frac{1}{C^L} \sum_{X^\ell \sqcup X^k} \frac{1}{k} \sum_{x_i \in X^k} [a(x_i, X^\ell) \neq y_i],$$

т. е. частота ошибок на контрольной выборке,
усреднённая по всем C^L разбиениям выборки $X^L = X^\ell \sqcup X^k$
на обучающую подвыборку X^ℓ и контрольную X^k .

Замечание 1. При $k = 1$ имеем: $CCV(X^L) = LOO(X^L)$.

Замечание 2. CCV характеризует лишь среднюю частоту ошибок, но не характеризует её дисперсию.

Понятие профиля компактности

Профиль компактности выборки X^L — это функция доли объектов x_i , у которых m -й сосед $x_i^{(m)}$ лежит в другом классе:

$$П(m, X^L) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [y_i \neq y_i^{(m)}]; \quad m = 1, \dots, L-1,$$

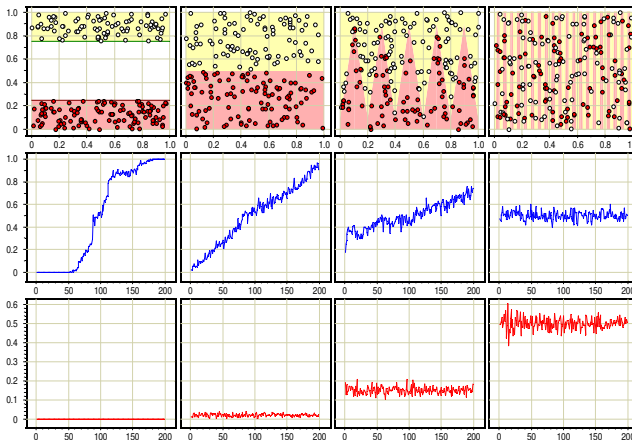
$x_i^{(m)}$ — m -й сосед объекта x_i среди X^L ;

$y_i^{(m)}$ — ответ на m -м соседе объекта x_i .

Теорема (точное выражение CCV для метода 1NN)

$$CCV(X^L) = \sum_{m=1}^k П(m, X^L) \frac{C_{L-1-m}^{\ell-1}}{C_{L-1}^{\ell}}.$$

Профили компактности для серии модельных задач



средний ряд: профили компактности,

нижний ряд: зависимость CCV от длины контроля k .

Свойства профиля компактности и оценки CCV

- Профиль $\Pi(m, X^L)$ формализует гипотезу компактности:

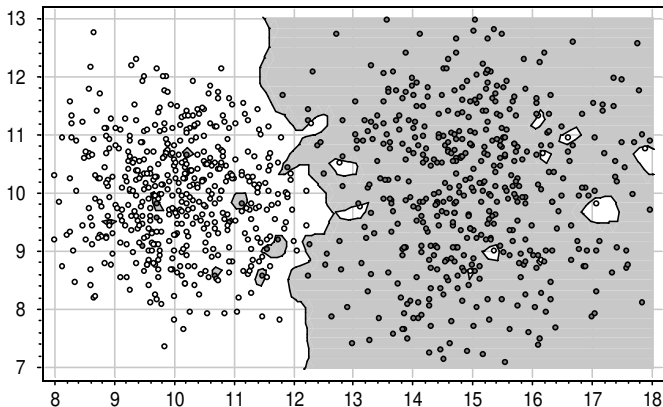
$$\text{CCV}(X^L) = \sum_{m=1}^k \Pi(m, X^L) \gamma_L^\ell(m)$$

- Для CCV \rightarrow min важен только начальный участок профиля, т. к. $\gamma_L^\ell(m) = \frac{C_{L-1-m}^{\ell-1}}{C_{L-1}^\ell}$ убывает экспоненциально по m
- CCV практически не зависит от длины контроля k
- Отбор эталонов** (prototype selection) — как можно меньшего числа объектов с минимальным вкладом Π_i :

$$\text{CCV}(X^L) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \Pi_i, \quad \Pi_i = \sum_{m=1}^k [y_i \neq y_i^{(m)}] \gamma_L^\ell(m)$$

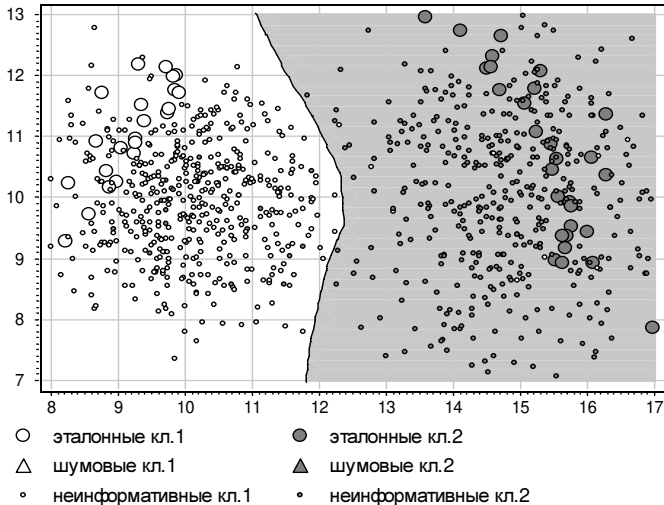
Воронцов К.В., Иванов М.Н. Отбор эталонов, основанный на минимизации функционала полного скользящего контроля. 2009

Модельные данные

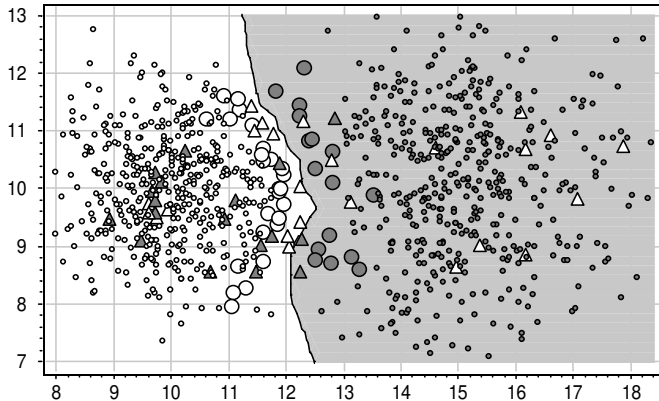


Модельная задача классификации: 1000 объектов.
Алгоритм 1NN

Последовательное жадное добавление эталонных объектов



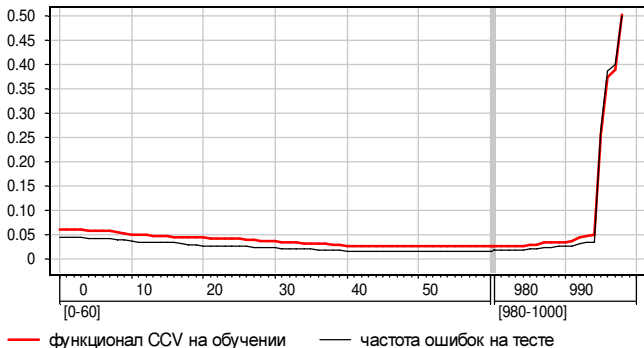
Последовательное жадное удаление не-эталонных объектов



- | | |
|------------------------|------------------------|
| ○ эталонные кл.1 | ● эталонные кл.2 |
| △ шумовые кл.1 | ▲ шумовые кл.2 |
| ◦ неинформативные кл.1 | ◦ неинформативные кл.2 |

Последовательный отсев не-эталонных объектов

Зависимость CCV от числа удаленных неэталонных объектов.



При отборе эталонов по критерию CCV переобучения нет.

Воронцов К.В., Иванов М.Н. Отбор эталонов, основанный на минимизации функционала полного скользящего контроля. 2009

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;
 $y_i = y(x_i)$, $y: X \rightarrow Y$ — неизвестная зависимость;
- $a(x) = f(x, \theta)$ — параметрическая модель зависимости,
 $\theta \in \mathbb{R}^p$ — вектор параметров модели.

- Метод наименьших квадратов (МНК):

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

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

- Недостаток:

надо иметь хорошую параметрическую модель $f(x, \theta)$

Непараметрическая регрессия, формула Надарая–Ватсона

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

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

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:

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

Обоснование формулы Надарая–Ватсона (одномерный случай)

Теорема

Пусть выполнены следующие условия:

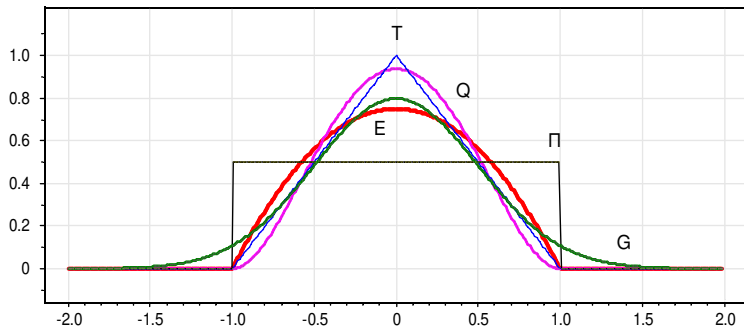
- 1) выборка $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ простая, из распределения $p(x, y)$;
- 2) ядро $K(r)$ ограничено: $\int_0^\infty K(r) dr < \infty$, $\lim_{r \rightarrow \infty} rK(r) = 0$;
- 3) зависимость $E(y|x)$ не имеет вертикальных асимптот:
 $E(y^2|x) = \int_Y y^2 p(y|x) dy < \infty$ при любом $x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

Тогда имеет место сходимость по вероятности:

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

в которой $E(y|x)$, $p(x)$ и $D(y|x)$ непрерывны и $p(x) > 0$.

Часто используемые ядра $K(r)$



$P(r) = [|r| \leq 1]$ — прямоугольное

$T(r) = (1 - |r|) [|r| \leq 1]$ — треугольное

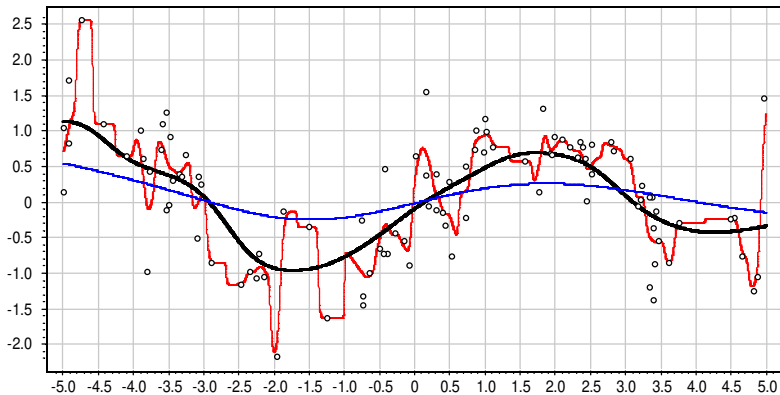
$E(r) = (1 - r^2) [|r| \leq 1]$ — квадратичное (Епанечникова)

$Q(r) = (1 - r^2)^2 [|r| \leq 1]$ — четвертое

$G(r) = \exp(-2r^2)$ — гауссовское

Выбор ядра K и ширины окна h

$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$

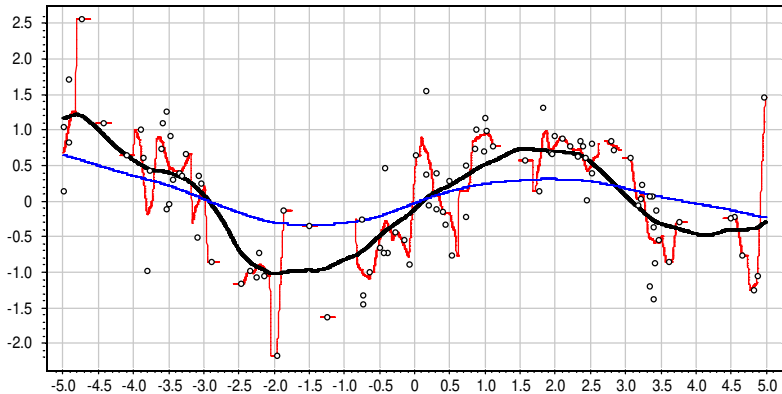


Гауссовское ядро \Rightarrow гладкая аппроксимация

Ширина окна существенно влияет на точность аппроксимации

Выбор ядра K и ширины окна h

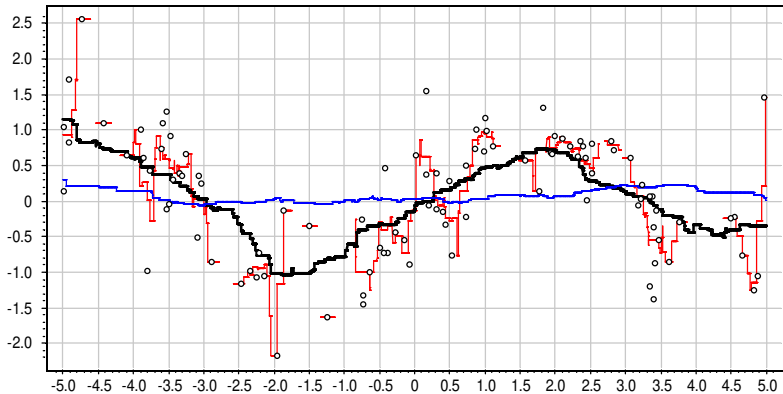
$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, треугольное ядро $K(r) = (1 - |r|) [|r| \leq 1]$



Треугольное ядро \Rightarrow кусочно-линейная аппроксимация
Аппроксимация не определена, если в окне нет точек выборки

Выбор ядра K и ширины окна h

$h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$, прямоугольное ядро $K(r) = [|r| \leq 1]$



Прямоугольное ядро \Rightarrow кусочно-постоянная аппроксимация
Выбор ядра слабо влияет на точность аппроксимации

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.
- Переменная ширина окна по k ближайшим соседям:

$$w_i(x) = K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h(x)}\right), \quad h(x) = \rho(x, x^{(k+1)})$$

где $x^{(k)}$ — k -й сосед объекта x .

- Оптимизация ширины окна по скользящему контролю:

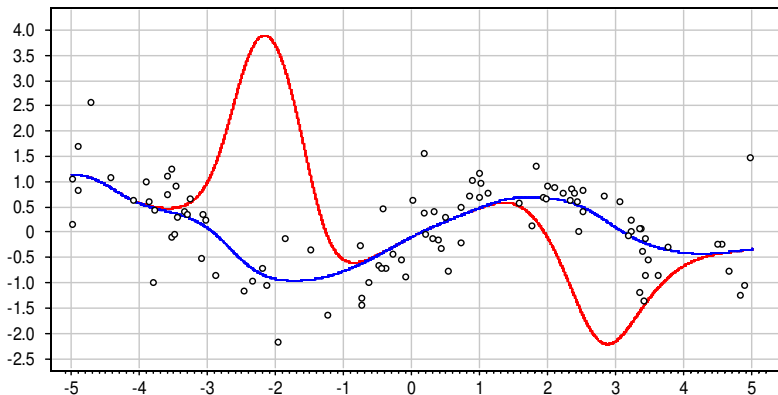
$$\text{LOO}(h, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \left(a_h(x_i; X^\ell \setminus \{x_i\}) - y_i \right)^2 \rightarrow \min_h.$$

Проблема выбросов (эксперимент на синтетических данных)

$\ell = 100$, $h = 1.0$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$

Две из 100 точек — выбросы с ординатами $y_i = 40$ и -40

Синяя кривая — выбросов нет



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 $\varepsilon_i = |a_h(x_i; X^\ell \setminus \{x_i\}) - y_i|$,
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 $\tilde{K}(\varepsilon) = K_Q\left(\frac{\varepsilon}{6 \operatorname{med}\{\varepsilon_i\}}\right)$,
где $\operatorname{med}\{\varepsilon_i\}$ — медиана вариационного ряда ошибок.

Алгоритм LOWESS (LOcally WEighted Scatter plot Smoothing)

Вход: X^ℓ — обучающая выборка;

Выход: коэффициенты γ_i , $i = 1, \dots, \ell$;

инициализация: $\gamma_i := 1$, $i = 1, \dots, \ell$;

повторять

оценки скользящего контроля в каждом объекте:

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

$$\gamma_i := \tilde{K}(|a_i - y_i|), \quad i = 1, \dots, \ell;$$

пока коэффициенты γ_i не стабилизируются;

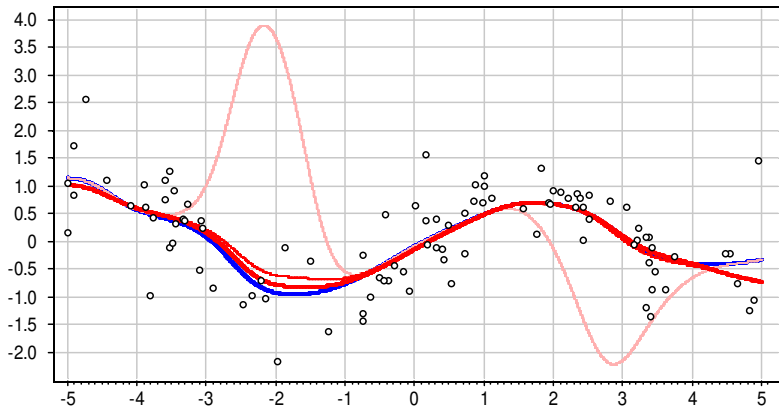
Gary W. Moran. Locally-Weighted-Regression Scatter-Plot Smoothing (LOWESS): a graphical exploratory data analysis technique. 1984

Пример работы LOWESS на синтетических данных

$\ell = 100$, $h = 1.0$, гауссовское ядро $K(r) = \exp(-2r^2)$

Две из 100 точек — выбросы с ординатами $y_i = 40$ и -40

В данном случае LOWESS сходится за несколько итераций:



Резюме

- Метрические методы — простейшие в машинном обучении, обучение сводится к запоминанию выборки (lazy learning)
- Что можно обучать:
 - число ближайших соседей k или ширину окна h
 - веса объектов
 - набор эталонов (prototype selection)
 - метрику (distance learning, similarity learning)
 - в частности, веса признаков в метрике
- Качество обучения зависит от метрики и ширины окна
- Непараметрическая регрессия обходится без модели?
Нет, модельные предположения закладываются в метрику
- Идея отсева выбросов путём перевода ошибки на объекте в его вес применима ко многим задачам машинного обучения