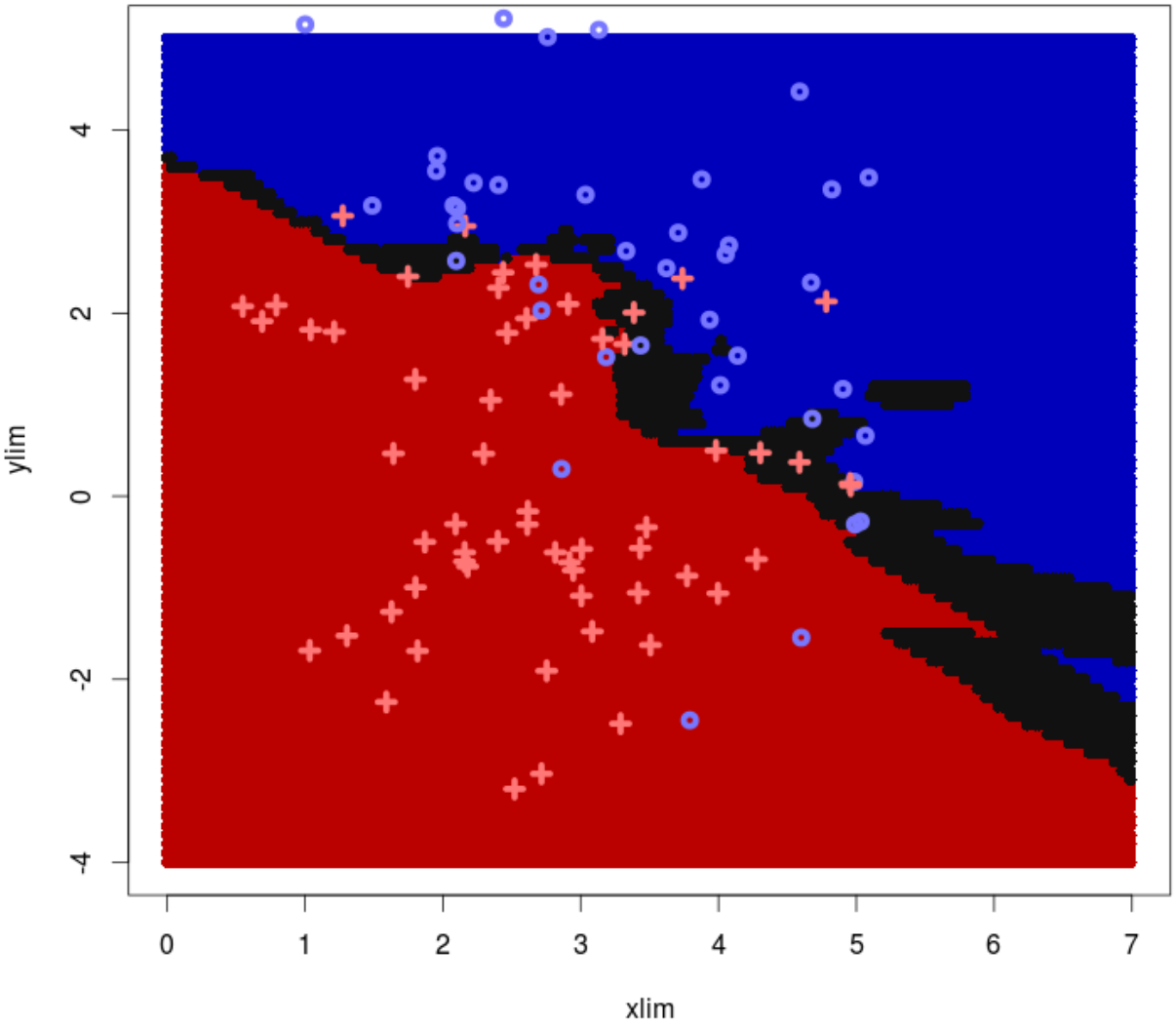
Машинное обучение
Лекция 3. Метрические алгоритмы



https://yandexdataschool.ru/edu-process/courses/machine-learning

Содержание лекции

- Обобщенный алгоритм
- Примеры частных алгоритмов:
  - метод ближайших соседей
  - метод окна Парзена
- Понятие выступа объекта
- Алгоритм отбора эталонов
- Проклятие размерности
- Выбор метрики

Гипотезы

- Задачи классификации и регрессии:
  - X — объекты, Y — ответы;
  - $X_\ell = (x_i, y_i)$ — обучающая выборка;
- Гипотеза компактности (для классификации):
  - Близкие объекты, лежат в одном классе.
- Гипотеза непрерывности (для регрессии):
  - Близким объектам соответствуют близкие ответы.
- Формализация понятия «близости»:
  - Задана функция расстояния $\rho : X \times X \to [0, \infty)$.
- Пример. Евклидово расстояние и его обобщение:

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

Обобщенный алгоритм

- Для заданного $x \in X$ отсортируем 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-тый ближайший сосед объекта x
  - $y^{(i)}$ — ответ на i-ом соседе объекта x

- Метрический алгоритм классификации:

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

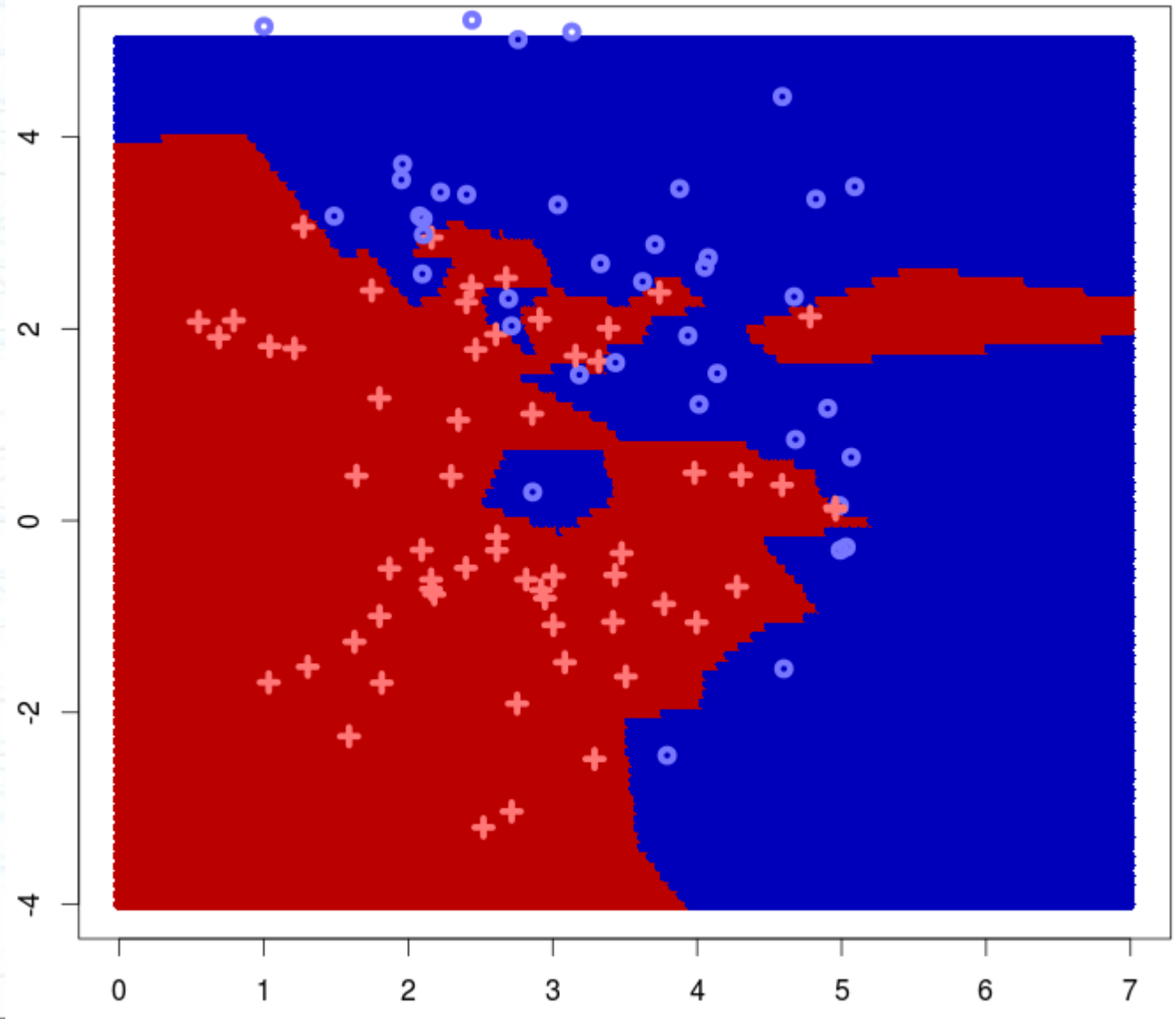
- w (i , x) — вес (степень важности) i -го соседа объекта x, ≥ 0, $\searrow$ по i
- Γ_y (x) — близость объекта x к классу y

Lazy learning

- Это так называемое ленивое обучение, в котором нет этапа тренировки параметров модели. Сразу происходит этап предсказания.
- Подходит для задач, в которых сложно сформулировать набор признаков, но легко сравнивать объекты (пример: сравнительная геномика)
- Недостаток: медленный процесс предсказания

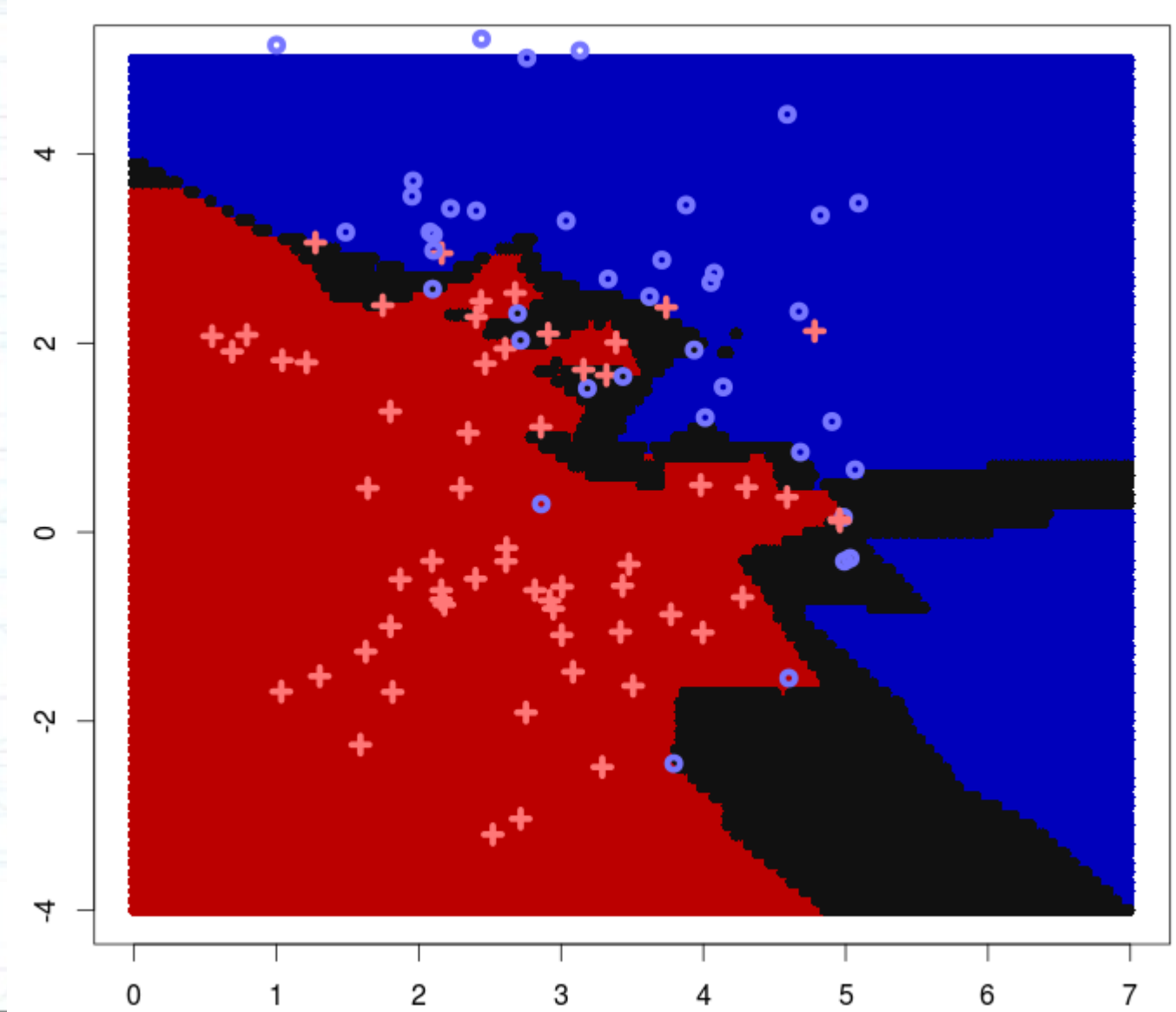
Метод ближайшего соседа

- w(i,x) = 1, если i = 1
- w(i,x) = 0, в противном случае



Метод k ближайших соседей

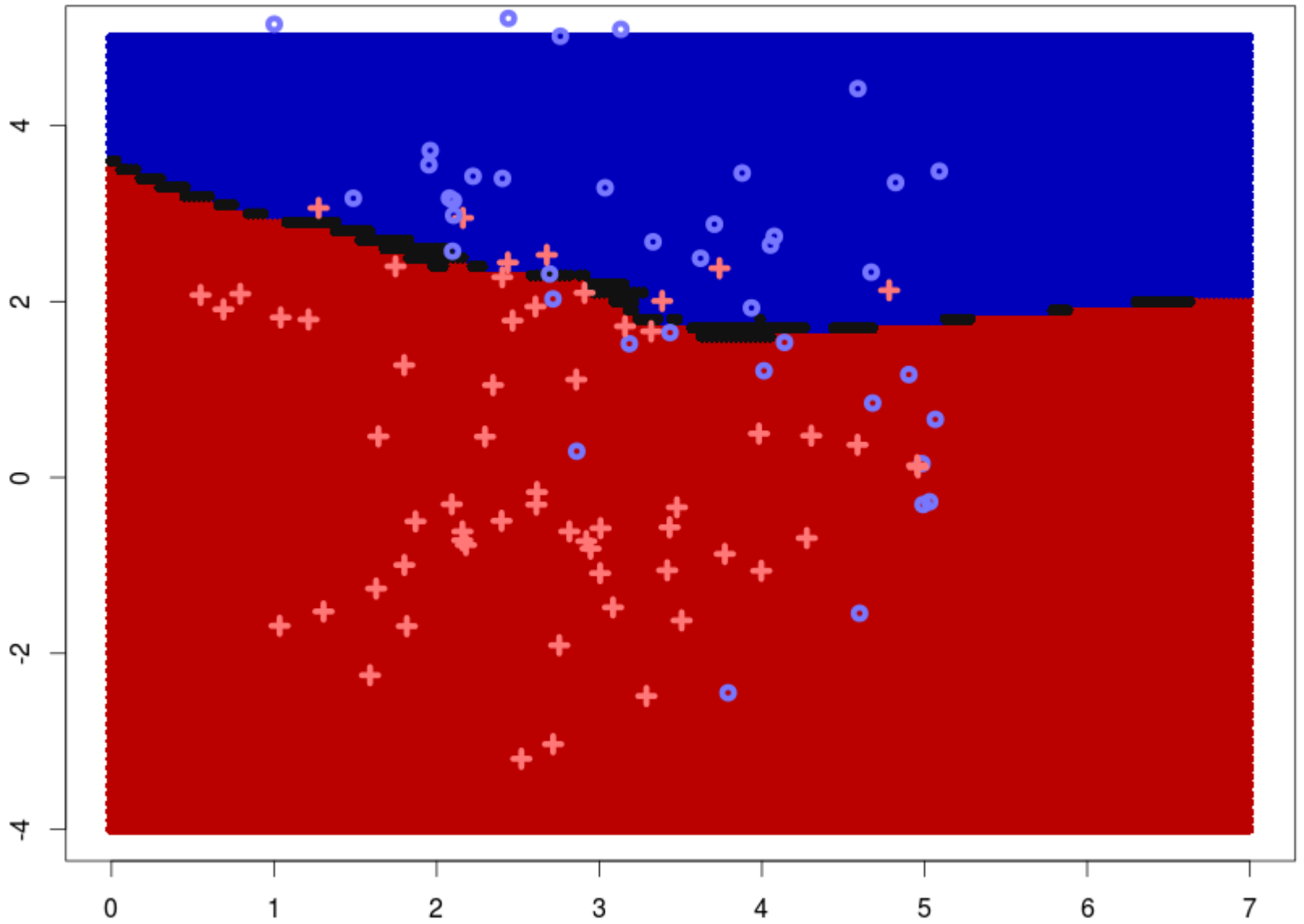
- w(i,x) = 1, если i <= k
- w(i,x) = 0, в противном случае



k = 4

Метод k ближайших соседей

- k = 60



Оптимизация k

- Функционал скользящего контроля (leave-one-out)

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

Метод k взвешенных ближайших соседей

Проблема метода ближайших соседей – близкие и далекие учитываются с одним весом

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

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, $0 < q < 1$;

Проблема. Две ситуации:

1) $\rho(x,x_i) = 1;\ 1.1;\ 1.2;\ 1.3$

2) $\rho(x,x_i) = 1;\ 1.1;\ 50;\ 51$

приведут к одним и тем же весам

Метод окна Парзена

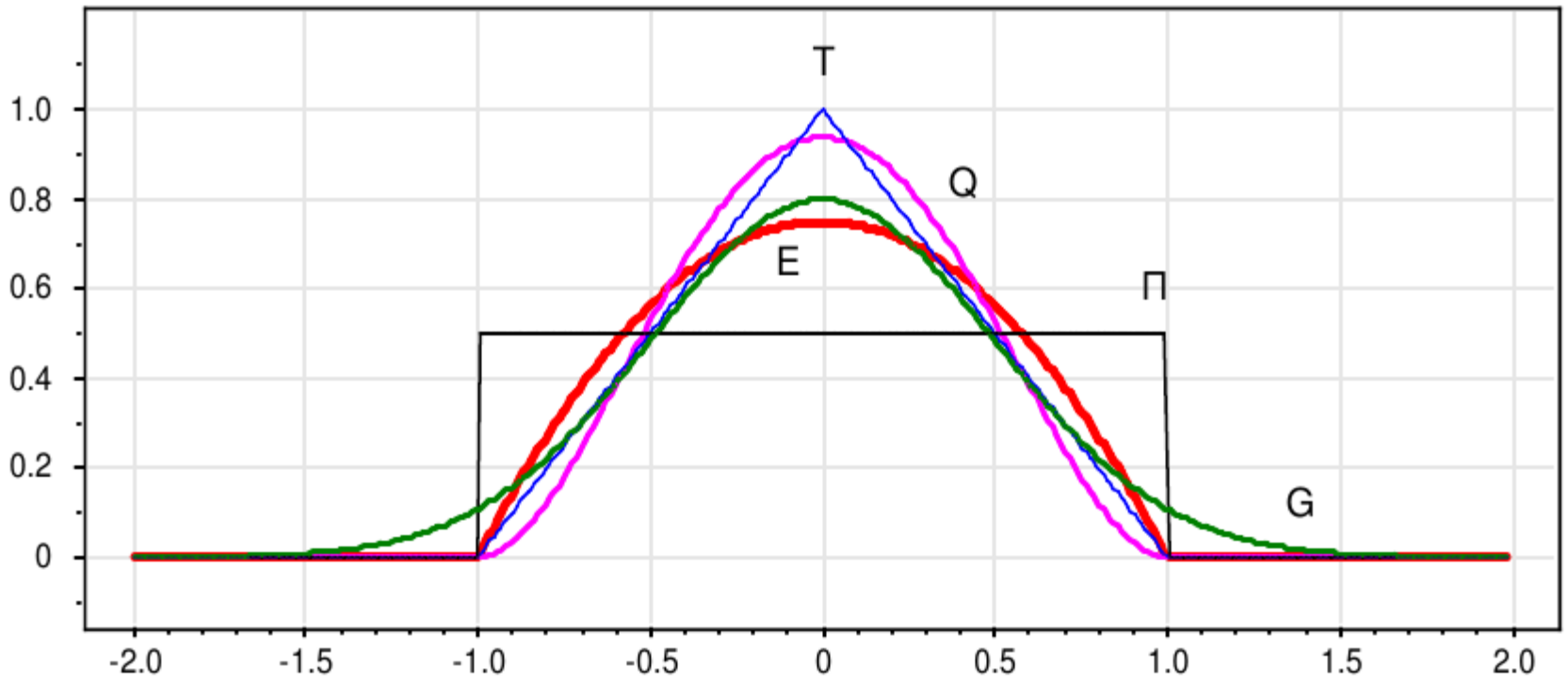
$w(i,x) = K\left(\frac{\rho(x,x^{(i)})}{h}\right)$, где h — ширина окна,

$K(r)$ — ядро, не возрастает и положительно на $[0,1]$

При фиксированной ширине окна качество классификатора сильно зависит от плотности точек.

Выход: положить ширину h равной расстоянию до k-того соседа

Часто используемые ядра



$П(r) = \big[|r| \leqslant 1\big]$ — прямоугольное

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

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

$Q(r) = (1 - r^2)^2\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квартическое

$G(r) = \exp\big(-2r^2\big)$ — гауссовское

Отступ (выступ) объекта

- Пусть классификатор a(x) работает по правилу:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Gamma_y(x)$$

- Отступом (margin) объекта x_i обучающей выборки называется величина

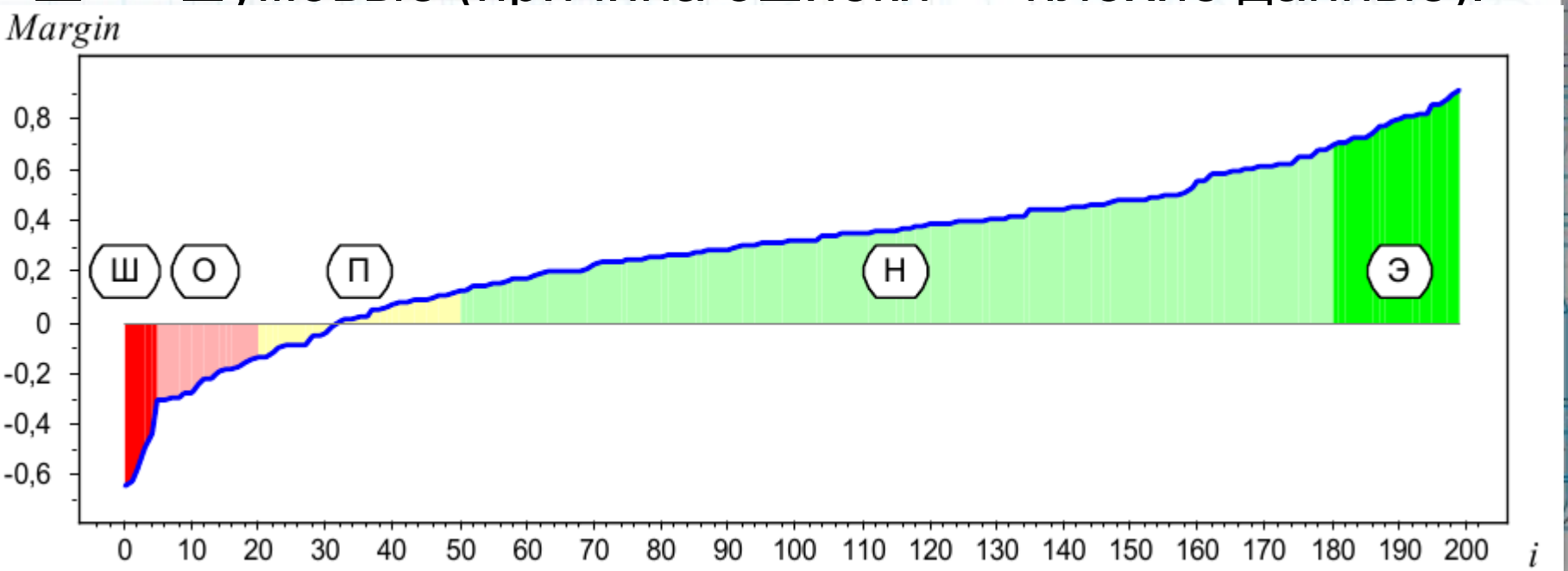
$$M(x_i) = \Gamma_{y_i}(x_i) - \max_{y \in Y \setminus y_i} \Gamma_y(x_i)$$

- Отступ показывает степень типичности объекта: чем больше $M(x_i)$, тем «глубже» x_i в своём классе;

$$M(x_i) < 0 \Leftrightarrow a(x_i) \neq y_i;$$

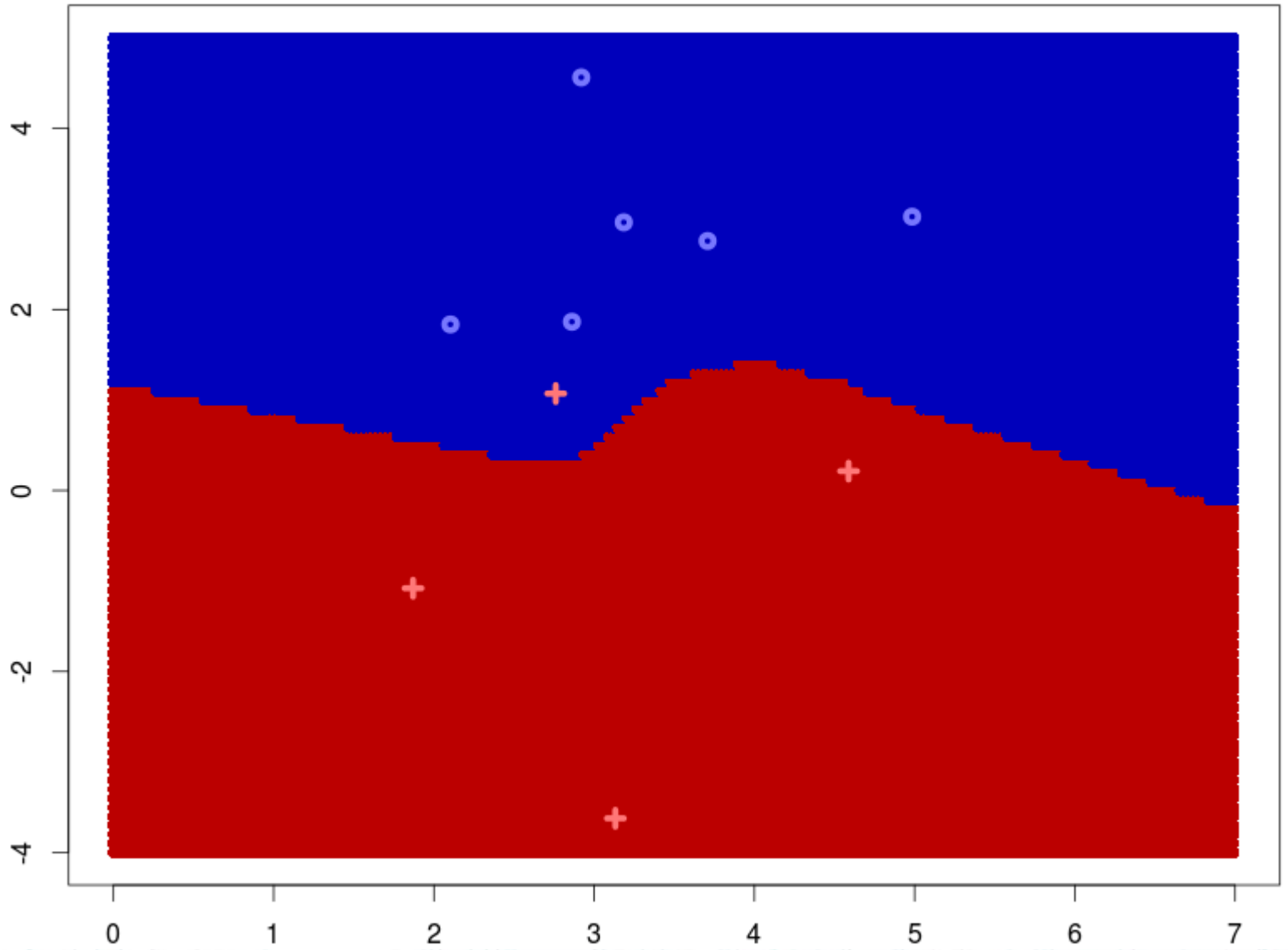
Типы объектов в зависимости от выступа

- 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).



Отступ (выступ) объекта

Вычислите отступы для всех объектов для метода 3NN



Отбор эталонов

- Задача: выбрать оптимальное подмножество эталонов Ω из обучающей выборки. Классификатор будет иметь вид:

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

- Алгоритм STOLP. Три основных этапа:
  - исключить выбросы и, возможно, пограничные объекты;
  - найти по одному эталону в каждом классе;
  - добавлять эталоны, пока есть отрицательные отступы;

Алгоритм STOLP

- Исключаем из X_ℓ выбросы x_i : $M(x_i)<\delta$
- Инициализируем множество эталонов Ω, выбирая по одному элементу из каждого класса с максимальным выступом
- Цикл: пока процент ошибок классификации велик и эталонов Ω не слишком много
  - добавляем в Ω объект с наименьшим выступом

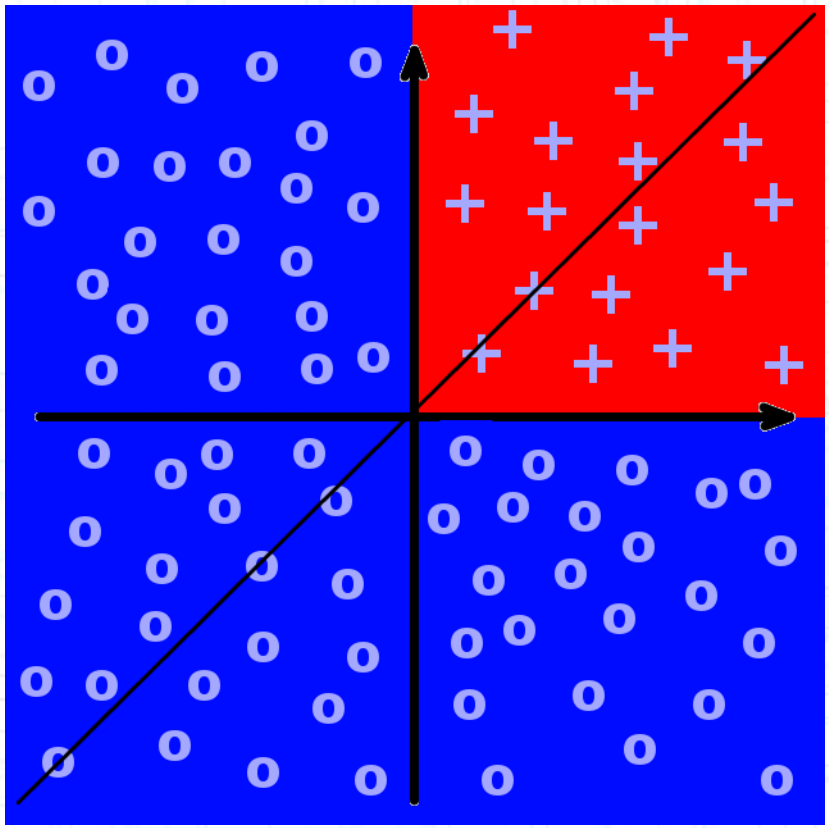
Проклятие размерности

- Проклятие размерности - усреднение значений метрики при большом количестве признаков. Почти до всех ближайших соседей расстояние одинаково
- Почему это происходит:
  - Шар радиуса R имеет объем $V(R) \sim R^D$
  - Объем шара радиуса 0.9 в 20-мерном пространстве составляет всего 12% от объема шара радиуса 1.
    Т.е. 88% точек лежит на сфере: 0.9<R<1

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

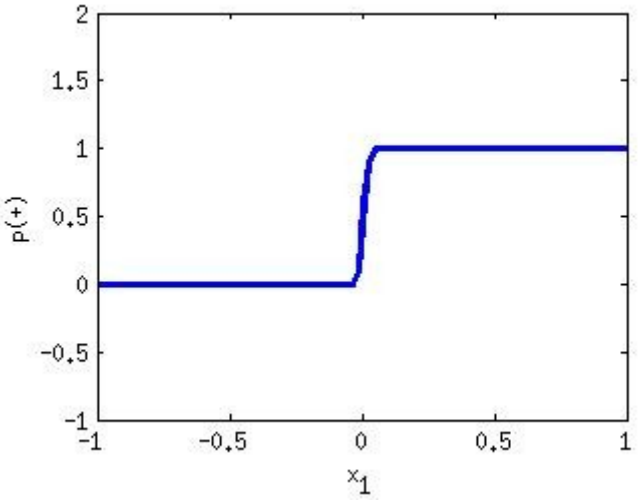
Проклятие размерности
Пример

- Пространство признаков: R^n.
- Класс +: область $x_{1,2}>0$ (остальные координаты произвольны)
- X_ℓ - равномерно распределена

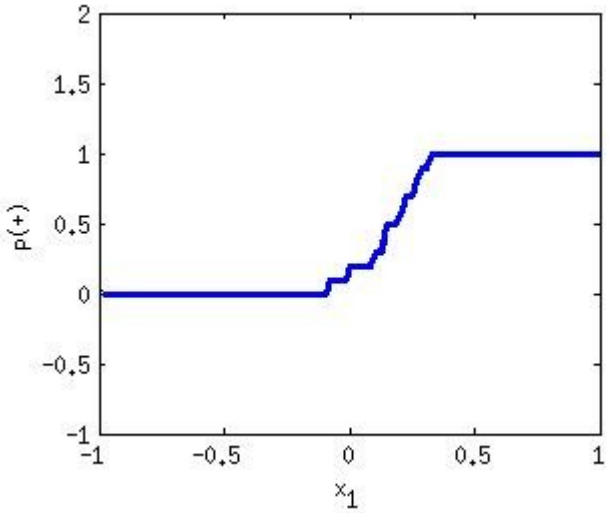


Проклятие размерности
Пример

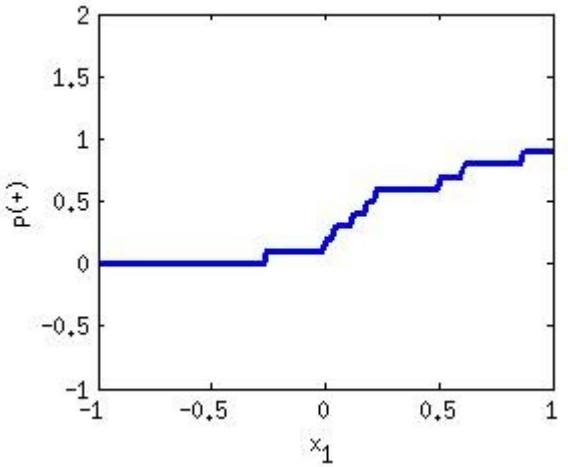
- Метод 10 ближайших соседей. ℓ = 10000
- Относительная частота класса “+” на прямой: $x_1=x_2$, $x_3=0$, $x_4=0$,...



n=2



n=5



n=20

Вывод: для больших размерностей
метрические алгоритмы сглаживают границы областей классов

Выбор 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: $\mathrm{LOO}(j) \to \min$.

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 $\mathrm{LOO}(j, w_j) \to \min$
(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.

Пример необычной метрики

Задача поиска подходящих по цвету вещей