Vorlesung Wissensentdeckung

Klassifikation und Regression: nächste Nachbarn

Katharina Morik, Claus Weihs

Informatik LS 8
Computergestützte Statistik
Technische Universität Dortmund

28.04.2009

Gliederung

Globale und lokale Modelle

- Lineare Modelle finden eine trennende Hyperebene.
- Die durch $\vec{\beta}$ angegebene Hyperebene wurde durch alle Beispiele bestimmt.
- Deshalb sind lineare Modelle globale Modelle.
- Klassifiziert man ein Beispiel nur anhand der Beispiele seiner Umgebung, spricht man von einem lokalen Modell.
- Nächste Nachbarn sind ein lokales Modell.

Nächste Nachbarn

- Das kNN-Modell betrachtet nur noch die k nächsten Nachbarn eines Beispiel $\vec{x}$:

$$\hat{f}(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})} y_i \tag{1}$$

- Die Nachbarschaft $N_k(\vec{x})$ wird durch ein Abstandsmaß, z.B. den Euklidschen Abstand bestimmt.
- Es gibt maximal $\frac{N}{k}$ Nachbarschaften und in jeder bestimmen wir den Durchschnitt (1).

Regression und Klassifikation

Gleichung (1) gibt als Regressionsfunktion den Mittelwert der y_i zurück.

$$\hat{f}(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})} y_i$$

Wie schon bei den linearen Modellen können wir durch einen Schwellwert aus der Regression eine Klassifikation machen:

$$\hat{y} = \begin{cases} 1, & falls\ \hat{f}(\vec{x}) \geq 0,5 \\ 0, & sonst \end{cases}$$

Die grünen und roten Datenpunkte werden in Nachbarschaften gruppiert

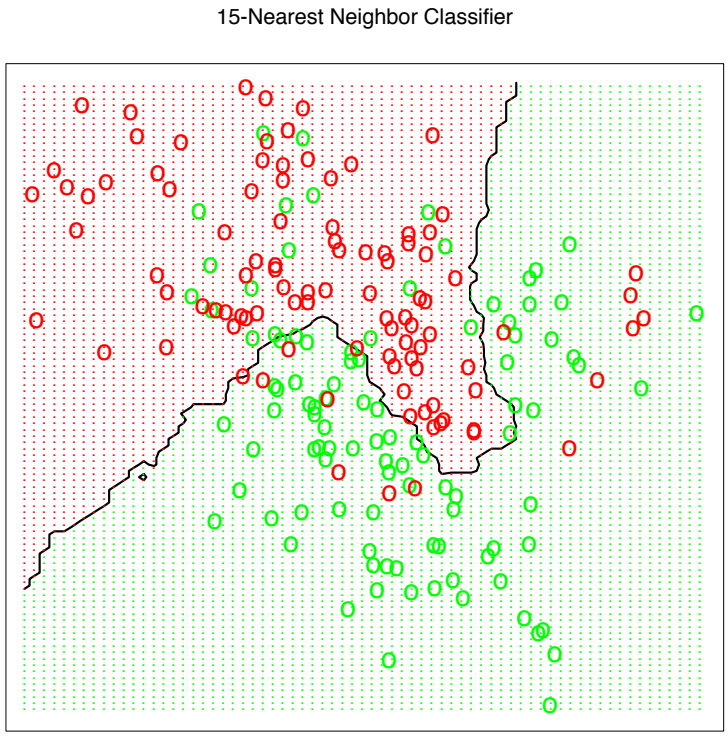


Figure 2.2: *The same classification example in two dimensions as in Figure 2.1. The classes are coded as a binary variable* (GREEN $= 0$, RED $= 1$) *and then fit by* 15*-nearest-neighbor averaging as in (2.8). The predicted class is hence chosen by majority vote amongst the* 15*-*

Bei k=1 wird nur auswendig gelernt.

- Falls $\vec{x} = \vec{x}' \rightarrow y = y'$, gibt es bei $k = 1$ keinen Trainingsfehler.
- Wenn allein der Trainingsfehler das Optimierungskriterium ist, würden wir stets $k = 1$ nehmen und nur auswendig lernen.
- Vermutlich ergibt das auf den Testdaten einen großen Fehler!

Overfitting

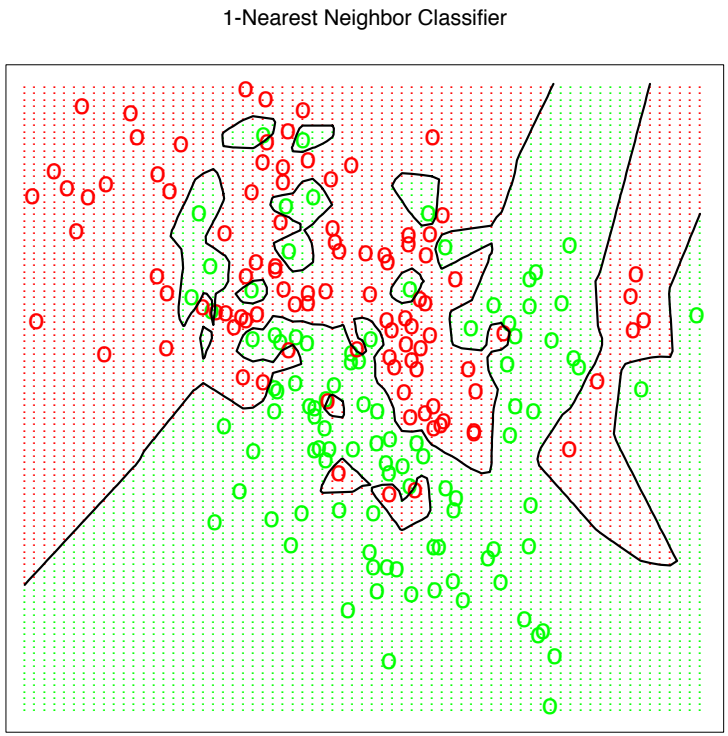


Figure 2.3: *The same classification example in two dimensions as in Figure 2.1. The classes are coded as a binary variable* (GREEN $= 0$, RED $= 1$), *and then predicted by* 1*-nearest-neighbor classification.*

Training- und Testfehler bei verschiedenen k

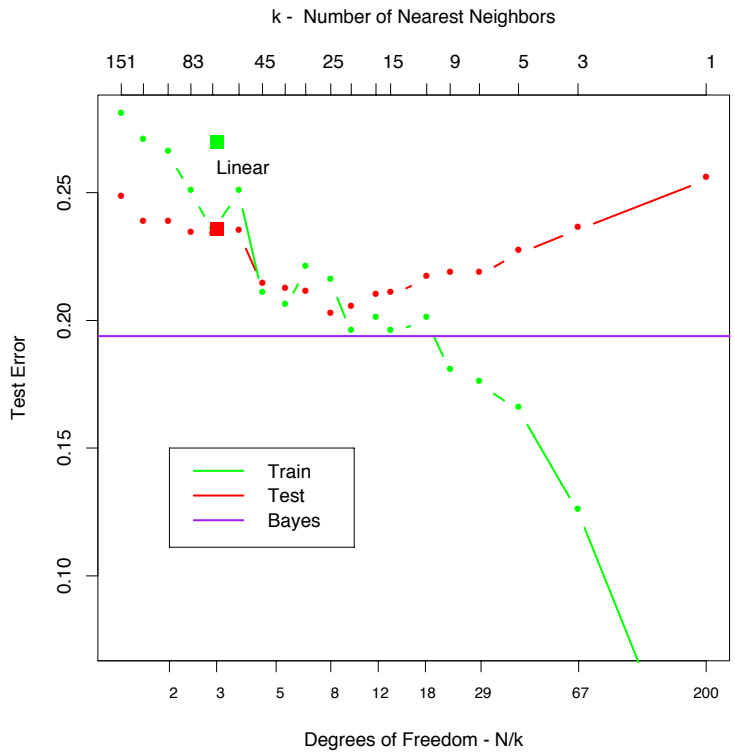


Figure 2.4: *Misclassification curves for the simulation example used in Figures 2.1, 2.2 and 2.3. A single training sample of size* 200 *was used, and a test sample of size* $10,000$. *The red curves are test and the green are training error for* k*-nearest-neighbor classification. The results for linear regression are the bigger green and red dots at three degrees of freedom. The purple*

Erwartungswert von Y bei k Nächsten Nachbarn

- Der Erwartungswert von Y, $E(Y) = \sum_{i=1}^{N} y_i p_i$, geht bei linearen Modellen in den Fehler ein: $EPE(\hat{f}) = E(Y - \hat{f}(X))^2$.
- kNN verwendet den Erwartungswert von Y direkt zur Vorhersage, allerdings beschränkt auf die Nachbarschaft $E(Y) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})}^{k} y_i$.
- Für die Vorhersage sind wir an bedingten Wahrscheinlichkeiten interessiert $P(Y|X = \vec{x})$.
- Bei kNN wird die bedingte Wahrscheinlichkeit auf die Nachbarschaft begrenzt $E(Y|\vec{x}_i \in N_k(\vec{x}))$.
- Gerechnet wird dies mit Hilfe Gleichung (1).

Asymptotisches Ergebnis zu kNN

- Wenn k/N gegen 0 und N, k gegen ∞ konvergieren, konvergiert auch $\hat{f}(x)$ gegen $E(Y|X = x)$. (Hastie/etal/2001, S. 19)
- Haben wir also schon (wieder) den perfekten Lernalgorithmus gefunden?

Fluch der hohen Dimension bei kNN

- Die Dichte der Beispiele ist proportional zu $N^{\frac{1}{p}}$.
- Schon bei $p = 10$ brauchen wir 80% der möglichen Werte jedes Attributs X_i, um wenigstens 10% der Daten in einer Nachbarschaft gesehen zu haben!
- Die Dichte der Datenpunkte in der Nachbarschaft ist bei hoher Dimension furchtbar spärlich.
  - $N^{\frac{1}{p}}$ ist bei 100 Beispielen und $p = 10$ nur $100^{1/10} = \sqrt[5]{10}$.
  - Wenn 100 Beispiele bei $p = 1$ einen dichten Raum ergeben, muss man für die selbe Dichte bei $p = 10$ schon 100^{10} Beispiele sammeln: $100^{1/1} = 100, 100^{10 \cdot \frac{1}{10}} = 100$

Bias und Varianz bei kNN

- Wenn man die richtige, dicht besetzte Nachbarschaft hat, verzerrt kNN die Vorhersage nicht (kleiner Bias).
- Wenn - wie bei hohen Dimensionen - die Nachbarschaft wild variiert, schwankt auch die Güte der Vorhersage (große Varianz).

Bias und Varianz – bildlich

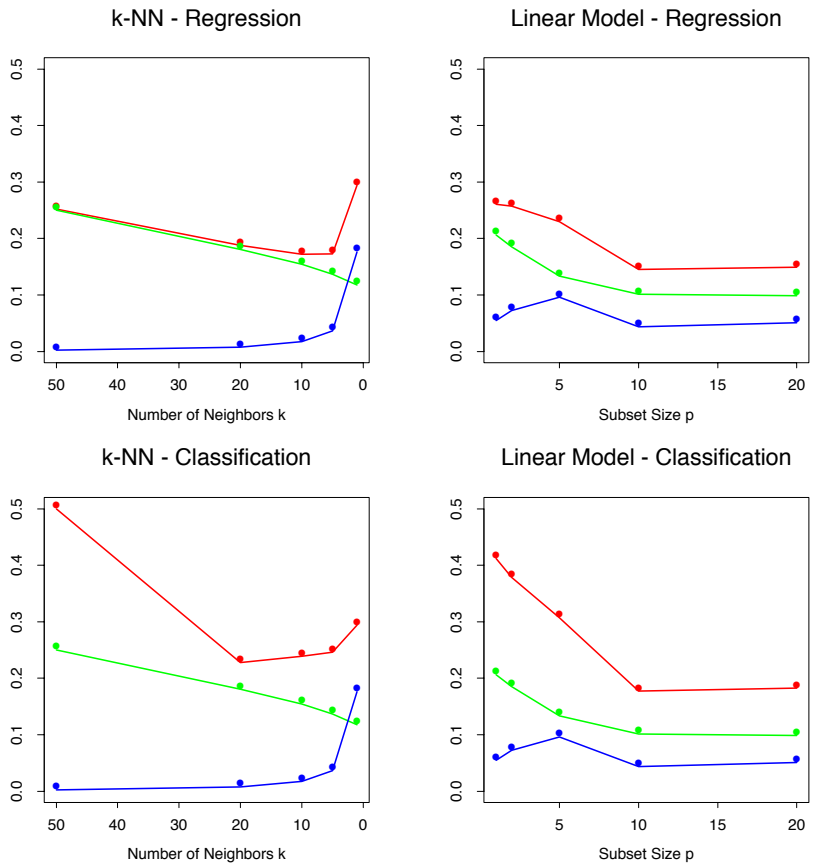


Figure 7.3: *Prediction error (red), squared bias (green) and variance (blue) for a simulated example. The top row is regression with squared error loss; the bottom row is classification with* 0–1 *loss. The models are k-nearest neighbors (left) and best subset regression of size p (right). The variance and bias curves are the same in regression and classi-*

Bias, Varianz und Modellkomplexität – bildlich

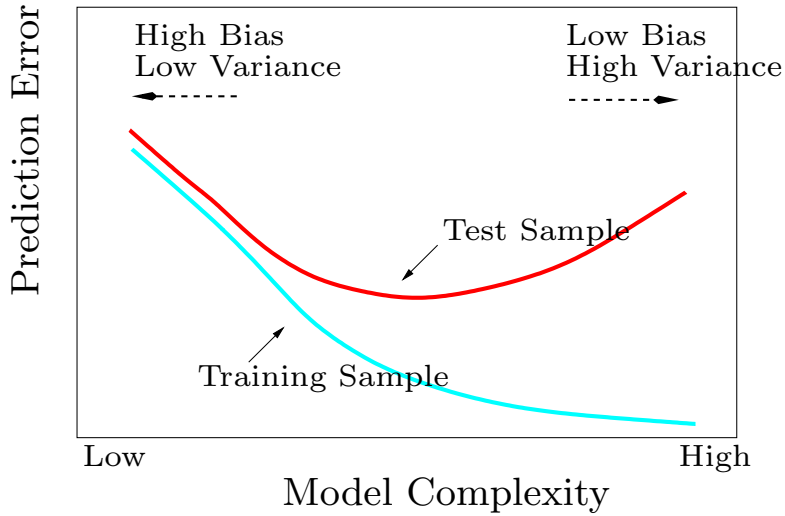


Figure 7.1: *Behavior of test sample and training sample error as the model complexity is varied.*

- Dieser Zusammenhang von Training-/Testfehler und Komplexität bestimmt alle Lernverfahren.
- Kreuzvalidierung lasst abschätzen, wie gut das Modell zu den Daten passt (Modellselektion).

Was wissen Sie jetzt?

- Sie kennen den Fluch der hohen Dimension bei kNN: kleiner Bias, aber hohe Varianz.
- Bei linearen Modellen war es umgekehrt: kleine Varianz, aber hoher Bias (falls die Annahme des linearen Zusammenhangs von X, Y nicht stimmt).

Ähnlichkeit – Maße

- Ähnlichkeit oder Distanz sollte stets Werte in $[0, 1]$ haben.
- $dist(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = 1 - sim(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$
- Eine Metrik erfüllt die Bedingungen
  1. $Metrik(x, x) = 0$
  2. $Metrik(x_1, x_2) = Metrik(x_2, x_1)$
  3. $Metrik(x_1, x_3) \leq Metrik(x_1, x_2) + Metrik(x_2, x_3)$

sim: Ähnlichkeit für einzelne Attribute

Numerische Attribute: Sei max_j der höchste Wert von X_j und min_j der niedrigste, sei $x_{i,j}$ der Wert des j-ten Attributs in der i-ten Beobachtung, dann ist z.B.

$$sim_j(x_{1,j}, x_{2,j}) = 1 - \frac{|x_{1,j} - x_{2,j}|}{max_j - min_j}$$

ein Ähnlichkeitsmaß für X_j.

Nominale Attribute: Ganz einfach:

$$sim_j(x_{1,j}, x_{2,j}) = \begin{cases} 1 & falls \quad x_{1,j} = x_{2,j} \\ 0 & sonst \end{cases}$$

Sim: Ähnlichkeit der Beispiele als Kombination der Attributähnlichkeiten

Im einfachsten Fall mitteln wir die Einzelähnlichkeiten:

$$Sim(\vec{x_1}, \vec{x_2}) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^{p} sim(x_{1,j}, x_{2,j})$$

Vielleicht sind einige Attribute wichtiger als andere?

$$Sim(\vec{x_1}, \vec{x_2}) = \frac{\sum_{j=1}^{p} w_j sim(x_{1,j}, x_{2,j})}{\sum_{j=1}^{p} w_j}$$

Vielleicht ist der quadratische Abstand besser?

$$Sim(\vec{x_1}, \vec{x_2}) = 1 - \sum_{j=1}^{p} w_j (x_{1,j} - x_{2,j})^2$$

Wie bestimmt man w_j?

Funktionsapproximation

- Die beiden vorgestellten Verfahren zu maschinellem Lernen, lineare Modelle und k-nächste Nachbarn, sind Instanzen der Funktionsapproximation.
- Gegeben sind die Trainingsbeispiele $\mathcal{T}$, gesucht ist eine Funktion

$$f_\theta(\vec{x}) = \sum_{k=1}^{K} h_k(\vec{x})\theta_k$$

.
- Dabei gibt es Parameter θ, die abzuschätzen sind, bei den linearen Modellen ist dies β.
- Darüber hinaus können die Daten transformiert werden in einen Raum, der für das Lernen besser geeignet ist: $h_k(\vec{x})$.
- Optimiert wird ein Qualitätskriterium, z.B. wird eine Verlustfunktion minimiert oder die Wahrscheinlichkeit maximiert.

Wege der Funktionsapproximation

Verlustfunktion: Fehler minimieren als Abstand zwischen wahrem Wert und Ergebnis der gelernten Funktion, z.B. $RSS(\theta)$ minimieren. Das haben wir bisher gesehen.

Likelihood: Wahrscheinlichkeit der wahren Werte maximieren! Das schauen wir uns jetzt an.

Maximum Likelihood

Gegeben eine Verteilung $Pr_\theta(y)$ und eine Stichprobe dieser Verteilung $y_1, ..., y_N$, ist die logarithmierte Wahrscheinlichkeit:

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log Pr_\theta(y_i) \tag{2}$$

Genau das θ, das y_i am wahrscheinlichsten macht, ist gut – $L(\theta)$ maximieren!

- Wir können dafür eine Verteilung annehmen, da wir die wahre Verteilung nicht kennen.
- Meist ist die Normalverteilung eine gute Annahme.

Normalverteilung $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$

normalverteilt

Eine Zufallsvariable X heißt **normalverteilt** mit den Parametern μ, σ, wenn sie die Dichtefunktion

$$g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{1}{2}((x-\mu)/\sigma)^2} \tag{3}$$

besitzt.

Normalverteilung

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ heißt **Normalverteilung**, der Graph ihrer Dichtefunktion wird Gaußsche Glockenkurve genannt.

Bei linearen Modellen ist die Maximum Likelihood gleich der Minimierung von RSS

Wir wollen θ schätzen, so dass die richtige Ausprägung von Y auch die wahrscheinlichste ist, gegeben X, θ. Unter der Annahme der Normalverteilung:

$$Pr(Y|X,\theta) = \mathcal{N}(f_\theta(X), \sigma^2)$$

Nun entspricht die log-likelihood der Daten gerade $RSS(\theta)$:

$$\begin{aligned} L(\theta) &= \sum_{i=1}^{N} log(\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y_i - f_\theta(\vec{x}_i)}{\sigma})^2}) \\ &= C_2 + C_1 \cdot \sum_{i=1}^{N} (y_i - f_\theta(\vec{x}_i))^2 \end{aligned}$$

Wie das?

Herleitung von $L(\theta) = RSS(\theta) \cdot C_1 + C_2$ bei Normalverteilung

$$
\begin{aligned}
L(\theta) &= \sum_{i=1}^{N} log(\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y_i - f_\theta(\vec{x}_i)}{\sigma})^2}) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \left(log(1) - log(\sigma\sqrt{2\pi}) + log(e^{-\frac{1}{2}(\frac{y_i - f_\theta(\vec{x}_i)}{\sigma})^2}) \right) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \left(0 - log(\sigma) - log(\sqrt{2\pi}) - \frac{1}{2}(\frac{y_i - f_\theta(\vec{x}_i)}{\sigma})^2 \right) \\
&= \underbrace{-N \cdot log(\sigma) - \frac{N}{2} log(2\pi)}_{=:C_2} \underbrace{- \frac{1}{2\sigma^2}}_{=:C_1} \sum_{i=1}^{N} (y_i - f_\theta(\vec{x}_i))^2 \\
&= RSS(\theta) \cdot C_1 + C_2
\end{aligned}
$$

N, σ sind konstant für einen Datensatz.

Log-likelihood bei nominalem Y ist Entropie

Cross-Entropie

Sei Y eine Zufallsvariable, die als Werte die Namen von K verschiedenen Klassen annimmt.

$Pr(Y = y_k|X = \vec{x}) = p_{k,\theta}(\vec{x}), k = 1, ..., K$

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{N} log(p_{y_i,\theta}(\vec{x}_i)) \tag{4}$$

Wenn man $L(\theta)$ maximiert, passt θ gut zu den Daten im Sinne der Likelihood.

Modellselektion

- Wir haben zwei Modellklassen gesehen: lineare Modelle und Nächste Nachbarn.
- Bei der Verallgemeinerung zur Funktionsapproximation haben wir außerdem Basisfunktionen zur Vorverarbeitung gesehen, die ebenfalls Modellklassen induzieren.
- Wie wählen wir nun Modelle aus?

Verfahren zur Modellselektion

- Kreuzvalidierung für verschiedene Modelle – das mit dem geringsten durchschnittlichen Fehler nehmen! (Minimierung der Verlustfunktion jetzt auf der Ebene der Modelle)
- Direkt anhand der a posteriori Wahrscheinlichkeit Modelle vergleichen. (Maximierung der Wahrscheinlichkeit jetzt auf der Ebene der Modelle)
  - Bayes Information Criterion
  - Minimum Description Length

Kreuzvalidierung zur Modellselektion

Gegeben eine Klasse von Modellen $f(\vec{x}, \alpha)$, wobei α ein Modell der Klasse indiziert, eine Verlustfunktion $L(y, f(\vec{x}, \alpha))$, N Beispiele und eine Aufteilung der Beispiele in K Partitionen mit der Indexfunktion $\kappa : \{1, ..., N\} \rightarrow \{1, ..., K\}$, die für jede Beobachtung die zugehörige Partition angibt.

Kreuzvalidierung für alle Modelle:

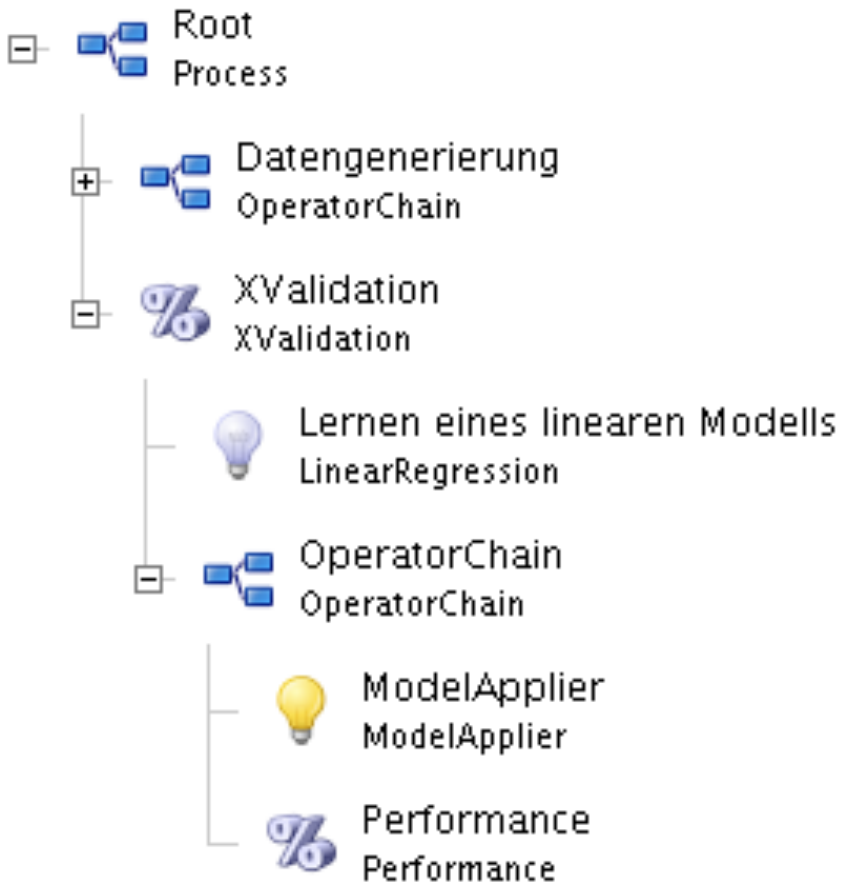
- Lasse die $\kappa(i)$-te Partition aus,
- lerne das α-te Modell: $\hat{f}^{-\kappa(i)}(\vec{x}, \alpha)$.
- rechne den Fehler aus:

$$CV(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(y_i, \hat{f}^{-\kappa(i)}(\vec{x}_i, \alpha))$$

- Minimiere $CV(\alpha)$, wähle also das Modell mit dem geringsten Verlust.

Modellselektion über Kreuzvalidierung praktisch

In RapidMiner wird die Kreuzvalidierungsschleife schon angeboten.



Es geht aber auch anders...

Bayes Statistik

A posteriori Wahrscheinlichkeit

Gegeben eine beliebige Einteilung von X in Klassen $y_1, y_2, ..., y_K$ und eine Beobachtung $\vec{x} \in X$. Die Wahrscheinlichkeit von y_j unter der Bedingung, dass $\vec{x}$ beobachtet wird, ist

$$Pr(y_j|\vec{x}) = \frac{Pr(y_j)Pr(\vec{x}|y_j)}{Pr(\vec{x})} \tag{5}$$

$Pr(y_j)$ ist die **a priori** Wahrscheinlichkeit der Klasse. $Pr(y_j|\vec{x})$ ist die **a posteriori** Wahrscheinlichkeit der Klasse.

Bayes Modellselektion

Gegeben eine Menge von Modellen $\mathcal{M}_m, m = 1, ..., M$ mit entsprechenden Parametern θ_m, Trainingsdaten $\mathcal{T}$ und eine Verteilung $Pr(\theta_m|\mathcal{M}_m)$, dann ist die a posteriori Wahrscheinlichkeit eines Modells

$$Pr(\mathcal{M}_m|\mathcal{T}) \sim Pr(\mathcal{M}_m) \cdot Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_m)$$

Gegeben dass $Pr(\mathcal{M}_l|\mathcal{T}) \neq 0, Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_l) \neq 0, Pr(\mathcal{M}_l) \neq 0$:

Zum Vergleich zweier Modelle $\mathcal{M}_j, \mathcal{M}_l$ berechnen wir den Quotienten:

$$\frac{Pr(\mathcal{M}_m|\mathcal{T})}{Pr(\mathcal{M}_l|\mathcal{T})} = \frac{Pr(\mathcal{M}_m)}{Pr(\mathcal{M}_l)} \cdot \frac{Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_m)}{Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_l)}$$

Ist das Ergebnis > 1, nehmen wir $\mathcal{M}_m$, sonst $\mathcal{M}_l$.

Approximieren der a posteriori Wahrscheinlichkeit

Wenn alle Modelle a priori gleich wahrscheinlich sind, müssen wir nur $Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_i)$ approximieren.

- Mit Maximum Likelihood schätzen wir $\hat{\theta}_i$.
- Die Anzahl freier Parameter in $\mathcal{M}_i$ nennen wir d_i. Das ist z.B. die Dimension der Beispiele, kann aber wegen $h_k(\vec{x})$ oder einiger Eigenschaften des Lernverfahrens auch etwas anderes sein.
- Als Wahrscheinlichkeit nähern wir an:

$$log\ Pr(\mathcal{T}|\mathcal{M}_i) = log\ Pr(\mathcal{T}|\hat{\theta}_i, \mathcal{M}_i) - \frac{d_i}{2} \cdot log\ N + O(1) \quad (6)$$

Maximale a posteriori Wahrscheinlichkeit und BIC

Bayes Informationskriterium

Sei d die Anzahl der Parameter eines Modells und N die Anzahl der Beispiele, dann ist das Bayes Informationskriterium BIC

$$BIC = -2\ loglik + (log\ N) \cdot d \tag{7}$$

Dabei ist $loglik = \sum_{i=1}^{N} \log Pr_{\hat{\theta}}(y_i)$.

BIC als Qualitätskriterium bei Likelihood Maximierung wählt eher einfache Modelle. Unter einer Gaußschen Verteilung und bei bekannter Varianz σ^2 rechnen wir

$$-2\ loglik \sim \sum_i \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sigma^2}$$

Die Wahl des Modells mit kleinstem BIC entspricht der Wahl des Modells mit größter a posteriori Wahrscheinlichkeit.

Relative Qualität der Modelle per BIC

- Die Wahl des Modells mit kleinstem BIC ist zuverlässig. Gegeben eine Familie von Modellen, darunter das richtige, konvergiert die Wahrscheinlichkeit, dass BIC das richtige wählt, gegen 1, wenn die Anzahl der Beispiele gegen ∞ konvergiert.
- Wenn wir für jedes Modell $\mathcal{M}_m, m = 1, ..., M$ den BIC ausrechnen, können wir (wie bei Kreuzvalidierung auch) die Modelle relativ zueinander bewerten, hier:

$$\frac{e^{-\frac{1}{2} \cdot BIC_m}}{\sum_{l=1}^{M} e^{-\frac{1}{2} \cdot BIC_l}} \tag{8}$$

Minimum Description Length

Ein Modell kodiert eine Menge von Beispielen. Wir können Nachrichten so kodieren, dass keine Nachricht Präfix einer anderen ist, z.B.

Nachricht	z1	z2	z3	z4
Code	0	10	110	111

Wir wollen den kürzesten Code für die häufigste Nachricht. Der Code des Beispiels ist optimal, wenn $Pr(z1) = 1/2$, $Pr(z2) = 1/4$, $Pr(z3) = 1/8$, $Pr(z4) = 1/8$.
Wieso das?

Shannon/Weaver Theorem

Code-Länge als Entropie

Wählen wir die Code-Länge l_i einer Nachricht z_i als

$$l_i = -log_2 Pr(z_i)$$

so ist die durchschnittliche Nachrichtenlänge

$$length \geq -\sum Pr(z_i) log_2(Pr(z_i)) \tag{9}$$

Wenn $p_i = A^{-l_i}$, wobei A die Anzahl der verwendeten Zeichen ist, gilt sogar die Gleichheit (s. Beispiel):
$Pr(z_1) = 1/2 = 2^{-1} = A^{-l_1}, A = 2, l_1 = 1$

Minimum Description Length zur Modellselektion

Gegeben ein Modell $\mathcal{M}$ mit Parametern θ und Beispiele $\mathcal{T} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$, der Empfänger kennt alle $\mathbf{X}$ und soll die $\mathbf{y}$ empfangen. Dazu müssen wir den Unterschied zwischen Modell und wahren Werten sowie die Modellparameter übermitteln.

Prinzip der Minimum Description Length MDL

Wähle immer das Modell mit der kürzesten Nachrichtenlänge!

$$length = -log\ Pr(\mathbf{y}|\theta, \mathcal{M}, \mathbf{X}) - log\ Pr(\theta|\mathcal{M}) \tag{10}$$

Eigenschaften von MDL

- Bei normalverteilten y, θ, wenn wir $\mathbf{X}$ zur Einfachheit weglassen, sehen wir den Einfluss von σ:

$$length = log\ \sigma + \frac{(y-\theta)^2}{\sigma^2} + \frac{\theta^2}{2}$$

- Je kleiner σ desto kürzer die Nachricht und einfacher das Modell!

Bezug zwischen MDL und BIC

- Wenn wir die Länge (Gleichung 10) minimieren

$$length = -log\ Pr(\mathbf{y}|\theta, \mathcal{M}, \mathbf{X}) - log\ Pr(\theta|\mathcal{M})$$

  maximieren wir auch die a posteriori Wahrscheinlichkeit (vgl. Gleichung 5) $Pr(\mathbf{y}|\mathbf{X})$.
- Mit Hilfe des BIC haben wir Modelle für die Funktionsapproximation durch Maximum Likelihood ausgewählt: das Modell mit dem kleinsten BIC entspricht dem Modell mit größter a posteriori Wahrscheinlichkeit.
- Also kann man das Modell mit der kleinsten Code-Länge (MDL-Prinzip) auch durch die Minimierung des BIC finden.

Was wissen Sie jetzt?

- Funktionsapproximation optimiert eine Qualitätsfunktion.
  - Fehlerminimierung, z.B. RSS, MSE
  - Maximierung der Likelihood, z.B. durch Approximation der a posteriori Wahrscheinlichkeit
    - Fehlerminimierung RSS entspricht Maximum Likelihood, falls Normalverteilung gegeben (Regression).
- Für die Modellselektion kann man
  - die Kreuzvalidierung mit Fehlerminimierung und
  - die Kriterien nach Bayes (BIC, MDL) nutzen.