Machine learning

Non parametric classification

Corso di Laurea Magistrale in Informatica

Università di Roma Tor Vergata

Prof. Giorgio Gambosi

a.a. 2021-2022

Non parametrico: siamo in ambito probabilistico, non facciamo ipotesi sulla distribuzione

Probabilistic classification methods recap

The application of probabilistic classifier requires that the (at least approximate) knowledge of a suitable distribution is derived from the training set

- the class conditional distribution $p(C_k|\mathbf{x})$ for each class C_k in the discriminative case, where an item $\mathbf{x}$ shall be assigned to C_i if

$$i = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\ p(C_k|\mathbf{x})$$

- the class conditional distribution $p(\mathbf{x}|C_k)$ (and the prior distribution $p(C_k)$) for each class C_k in the generative (bayesian) case, where an item $\mathbf{x}$ shall be assigned to C_i if

$$i = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\ p(\mathbf{x}|C_k)p(C_k)$$

quella che usiamo per predire la classe

Assunto dell'approccio parametrico (softmax o logistic regression)

↳ sigmoide con argomento = combinazione lineare delle feature

The type of probability distribution is assumed to be known: the value of a suitable set of coefficients must be derived. For example,

- $p(C_k|\mathbf{x})$ is assumed to be of the type $\dfrac{e^{\mathbf{w}_k^T\overline{\mathbf{x}}}}{\sum_i e^{\mathbf{w}_i^T\overline{\mathbf{x}}}}$ in the case of softmax (a discriminative method)
- $p(\mathbf{x}|C_k)$ is assumed to be of the type $\mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k)$ in the case of gaussian discriminant analysis (a generative method)

↳ anche in Naive Bayes, dove è categorica (ricorda i documenti)

In both case, an estimate of parameter values (either $\mathbf{w}_k$ or $\boldsymbol{\theta}_k$) is performed for all classes. Different approaches to parameter estimation:

Maximum likelihood :

- In the discriminative case, the likelihood of the target is considered $\mathbf{w}^{ML} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmax}}\ p(\mathbf{t}|\mathbf{X}, \mathbf{w})$: prediction is performed as $\underset{k}{\operatorname{argmax}}\ p(C_k|\mathbf{x}, \mathbf{w}^{ML})$
- In the generative case, for each class C_k, the likelihood of the subset $\mathbf{X}_k$ of items belonging the class is instead maximized, that is $\boldsymbol{\theta}_k^{ML} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmax}}\ p(\mathbf{X}_k|\boldsymbol{\theta}_k)$: prediction is performed as $\underset{k}{\operatorname{argmax}}\ p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_k^{ML})p(C_k)$

Maximum a posteriori : Similar to the previous one:

- In the discriminative case, the posterior of the parameters wrt to training set $\mathbf{w}^{MAP} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmax}}\, p(\mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{t})$: prediction is performed as $\underset{k}{\operatorname{argmax}}\, p(C_k|\mathbf{x}, \mathbf{w}^{MAP})$
- In the generative case, for each class C_k, the posterior of the parameters wrt the items in the class $\boldsymbol{\theta}_k^{MAP} = \underset{\boldsymbol{\theta}_k}{\operatorname{argmax}}\, p(\boldsymbol{\theta}_k|\mathbf{X}_k)$ is maximized: prediction is performed as $\underset{k}{\operatorname{argmax}}\, p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_k^{MAP})p(C_k)$

Bayesian estimate : This approach directly express the predictive distribution as

$$p(C_k|\mathbf{x}, \mathbf{X}, \mathbf{t}) = \int_{\mathbf{w}} p(C_k|\mathbf{x}, \mathbf{w}) p(\mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{t}) d\mathbf{w}$$

In generale:

Definiamo un modello e poi facciamo qualcosa

Non parametric approach

$\forall \mathbf{x}$, se vogliamo vedere $p(\mathbf{x}|C_2)$ devo considerare il rapporto con $\mathbf{x}$ di tutti gli elementi di C_1 e così via ...

No knowledge whatsoever of the probabilities is assumed.

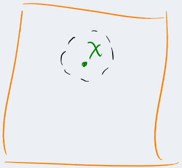
- The class distributions $p(\mathbf{x}|C_i)$ are directly from data.
- In previous cases, use of (parametric) models for a synthetic description of data in $\mathbf{X}, \mathbf{t}$
- In this case, no models (and parameters): training set items explicitly appear in class distribution estimates.
- Denoted as non parametric models: indeed, an unbounded number of parameters is used

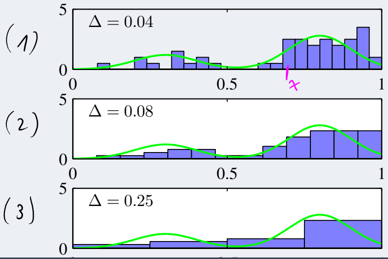
vuol dire che ho tanti parametri quanti sono i dati.

Histograms

- Elementary type of non parametric estimate
- Domain partitioned into m d-dimensional intervals (bins)
- The probability $P_{\mathbf{x}}$ that an item belongs to the bin containing item $\mathbf{x}$ is estimated as $\frac{n(\mathbf{x})}{n}$, where $n(\mathbf{x})$ is the number of element in that bin
- The probability density in the interval corresponding to the bin containing $\mathbf{x}$ is then estimated as the ratio between the above probability and the interval width $\Delta(\mathbf{x})$ (tipically, a constant Δ)

$$p_H(\mathbf{x}) = \frac{\frac{n(\mathbf{x})}{N}}{\Delta(\mathbf{x})} = \frac{n(\mathbf{x})}{N\Delta(\mathbf{x})}$$





Dobbiamo valutare:

$$p(\mathbf{x}|C_k)\forall k$$

possiamo prendere un campione di una distribuzione, ci serve un modo per assegnare un valore di probabilità ad ogni elemento:

$$S : z\ p(x)$$

non vogliamo ipotizzare che la distribuzione sia Gaussiana.
La probabilità sarà più alta dove gli elementi del campione tendono ad addensarsi (intuitivamente), quindi possiamo usare un istogramma: partizione dello spazio dei possibili valori in contenitori o intervalli (bins) ad ognuno dei quali associamo il numero di elementi dell'insieme che vi cadono dentro.

Ora, abbiamo una situazione come (1) e vorremmo una stima della probabilità di x (rosa). La probabilità sarà circa data dal numero di elementi caduti nell bin diviso il numero totale di elementi.

La densità di probabilità sarà la probabilità divisa per il volume, in questo caso l'ampiezza del bin.

Perché è "rozza":
- la divisione dello spazio è predefinita, ho diviso nei bin ed ho contato quanti elementi sono in ogni bin e messo da parte, per poi stimare le probabilità degli x
- se un x cade vicino al bordo fra due rettangoli, come mi comporto.

Posso fare l'istogramma più fitto, facendo tendere la dimensione a 0, ma se li rendo piccoli la maggior parte saranno vuoti, quindi se stimo x in un bin la probabilità è 0. Sarebbe meglio stimare la probabilità di x guardando all'intorno di x (verde) nel piano.

Kernel density estimators

- Probability that an item is in region $\mathscr{R}(\mathbf{x})$, containing $\mathbf{x}$

$$P_{\mathbf{x}} = \int_{\mathscr{R}(\mathbf{x})} p(\mathbf{z}) d\mathbf{z}$$

Vediamo quanti elementi sono in $\mathcal{R}(\mathbf{x})$, ma stiamo ipotizzando ancora come è fatta la regione

- Given n items $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n$, the probability that k among them are in $\mathscr{R}(\mathbf{x})$ is given by the binomial distribution

$$p(k) = \binom{n}{k} P_{\mathbf{x}}^k (1 - P_{\mathbf{x}})^{n-k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} P_{\mathbf{x}}^k (1 - P_{\mathbf{x}})^{n-k}$$

- Since $E[k] = nP_{\mathbf{x}}$ and $\sigma_k^2 = nP_{\mathbf{x}}(1 - P_{\mathbf{x}})$, by the binomial distribution properties, we have that, for what concerns the ratio $r = \frac{k}{n}$,

$$E[r] = \frac{1}{n} E[k] = P_{\mathbf{x}} \qquad \sigma_r^2 = \frac{1}{n^2} \sigma_k^2 = \frac{P_{\mathbf{x}}(1 - P\mathbf{x})}{n}$$

- $P_{\mathbf{x}}$ is the expected fraction of items in $\mathscr{R}(\mathbf{x})$, and the ratio r is an estimate. As $n \to \infty$ variance decreases and r tends to $E[r] = P_{\mathbf{x}}$, we assume

$$r = \frac{k}{n} \simeq P_{\mathbf{x}}$$

↳ più è grande n e più la stima è buona.

Ci interessa la densità di probabilità $P_{\mathbf{x}}$

- Let the volume of $\mathscr{R}(\mathbf{x})$ be sufficiently small. Then, the density $p(\mathbf{x})$ is almost constant in the region and

$$P_{\mathbf{x}} = \int_{\mathscr{R}(\mathbf{x})} p(\mathbf{z}) d\mathbf{z} \simeq p(\mathbf{x})V$$

  where V is the volume of $\mathscr{R}(\mathbf{x})$
- since $P_{\mathbf{x}} \simeq \dfrac{k}{n}$, it then derives that $p(\mathbf{x}) \simeq \dfrac{k}{nV}$

per stimare $p(\mathbf{x}|C)$:
- vediamo dove cade x
- prendiamo una regione e vediamo quanti elementi ci cadono
- rapportiamo k (n° di elementi che vi cadono) col n° di elementi di C

cerco la V più piccola

Two alternative ways to exploit the relation $p(\mathbf{x}) \simeq \frac{k}{nV}$ to estimate $p(\mathbf{x})$ for any $\mathbf{x}$:

1. Fix V and derive k from data (kernel density estimation)
2. Fix k and derive V from data (K-nearest neighbor).

It can be shown that in both cases, under suitable conditions, the estimator tends to the true density $p(\mathbf{x})$ as $n \to \infty$.

Kernel density estimation: Parzen windows

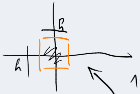
Devo fissare la regione (volume V)

dimensione

- Region associated to a point $\mathbf{x}$: hypercube with edge length h (and volume h^{d}) centered on $\mathbf{x}$.
- Kernel function $k(\mathbf{z})$ (Parzen window) used to count the number of items in the unit hypercube centered on the origin $\mathbf{0}$

$$k(\mathbf{z}) = \begin{cases} 1 & |z_i| \le 1/2 \qquad i = 1, \ldots, d \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$d=2$

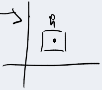


1 se il punto è dentro, 0 altrimenti.

- as a consequence, $k\left(\dfrac{\mathbf{x}-\mathbf{x}'}{h}\right) = 1$ iff $\mathbf{x}'$ is in the hypercube of edge length h centered on $\mathbf{x}$
- the number of items in the hypercube is then

$$K = \sum_{i=1}^{n} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right)$$

traslazione su ogni punto $\mathbf{x}$



aggiusto in base al lato del quadrato (rende unitario, scala)

$$K = \sum_{i=1}^{n} k(\mathbf{x})$$

supponiamo di avere

$h = 1 \Rightarrow$

Kernel density estimation: Parzen windows

- The estimated density is

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{nV} \sum_{i=1}^{n} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) \Rightarrow \sim \frac{K}{nV}$$

- $V \sim h^d$
- K: valore della Σ

- Since

$$k(\mathbf{z}) \geq 0 \qquad \text{and} \qquad \int k(\mathbf{z})d\mathbf{z} = 1$$

it derives

$$k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) \geq 0 \qquad \text{and} \qquad \int k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) d\mathbf{x} = h^d$$

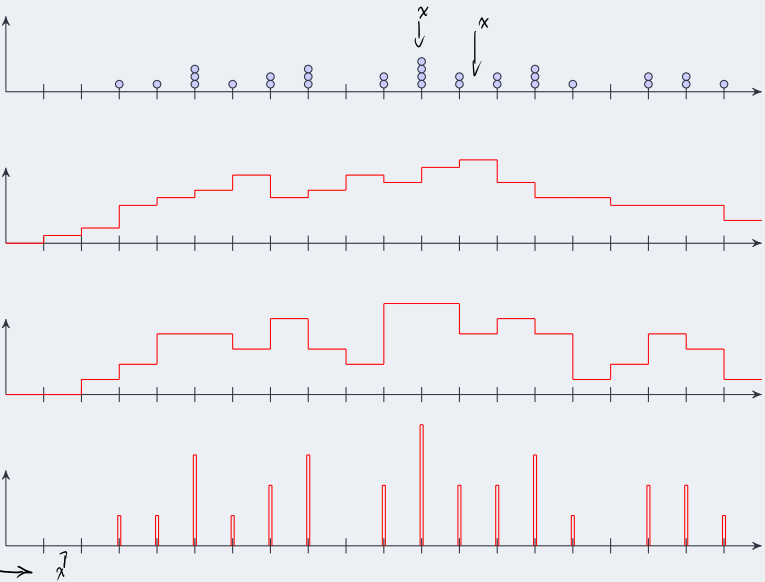
As a consequence, it results that $p_n(\mathbf{x})$ is a probability density.

Clearly, the window size has a relevant effect on the estimate

```
Ho ovviato a qualche problema dell'istorgramma:
  - se un punto è sul bordo non succede che non tengo conto di cose vicine, vado a centrare direttamente sul
  punto
```

Kernel density estimation: Parzen windows

istogramma →



∀ punto: dà la probabilità stimata per quel punto

è 0 per tutti questi x

h è una scelta progettuale: troppo grande ⇒ uniforme

Cambia la distribuzione con h.

Molto in piccolo (ε) ⇒ accade cosa avviene anche per l'istogramma

Kernels and smoothing

Perfezioniamo il metodo

Drawbacks

1. discontinuity of the estimates

la stima di probabilità salta (vedi grafico). La vorremmo più continua.

2. items in a region centered on $\mathbf{x}$ have uniform weights: their distance from $\mathbf{x}$ is not taken into account

entrambe i punti valgono 1, ma la vicinanza dovrebbe aumentare la probabilità.

Solution. Use of smooth kernel functions $\kappa_h(u)$ to assign larger weights to points nearer to the origin.

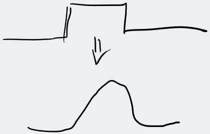
Assumed characteristics of $\kappa_h(u)$:

$$\int \kappa_h(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 1$$

$$\int \mathbf{x}\kappa_h(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 0$$

$$\int \mathbf{x}^2\kappa_h(\mathbf{x})d\mathbf{x} > 0$$

Lavoriamo sulla forma della finestra:

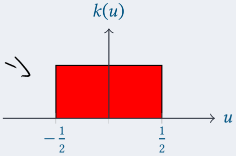


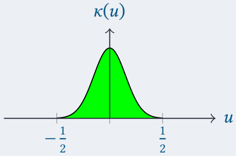
il salto da 1 a 0 non è netto

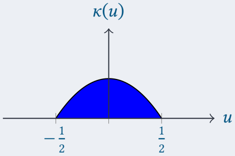
Usually kernels are based on smooth radial functions (functions of the distance from the origin)

1. gaussian $\kappa(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2}\frac{u^2}{\sigma^2}}$, unlimited support → qualunque elemento del train set porta contributo
2. Epanechnikov $\kappa(u) = 3\left(\frac{1}{2} - u^2\right)$, $|u| \leq \frac{1}{2}$, limited support
3. ...

originale →







resulting estimate:

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n} \kappa\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h}\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \kappa_h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$

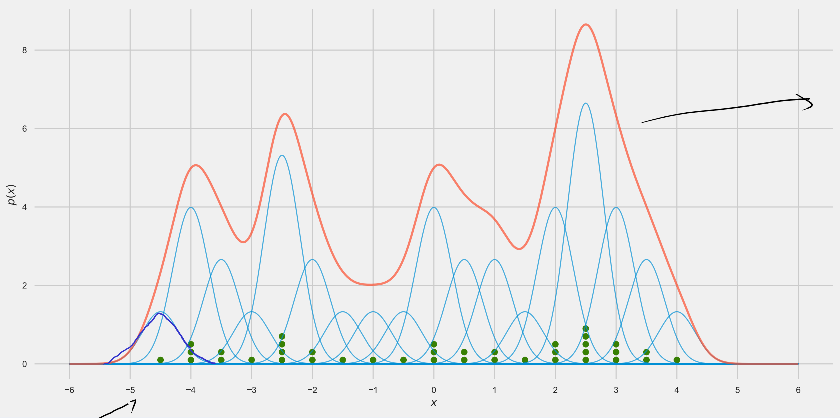
considero h=1

è una funzione ≠ dalla soglia

Kernels and smoothing

Il fascio di curve azzurre sono le diverse funzioni smooth.

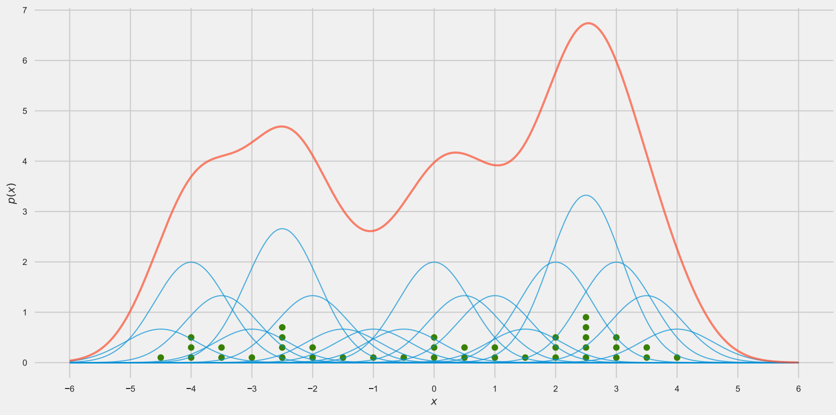
$h = 1$



somma delle n° di curve in ogni punto

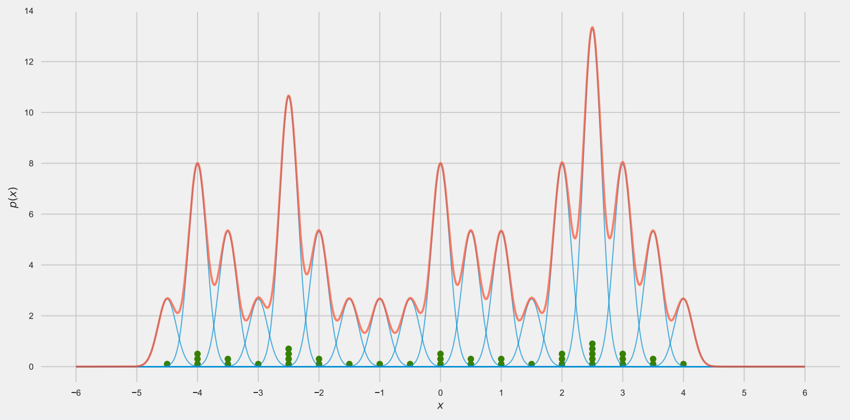
finestre centrate sui punti e "moltiplicate" per il n° di punti tende ad essere più uniforme, mediando su intervalli più grandi.

$h = 2$



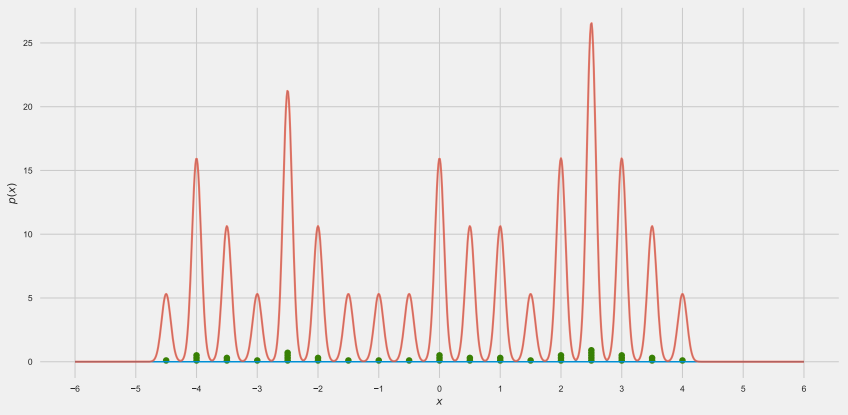
Kernels and smoothing

$h = .5$



Kernels and smoothing

$h = .25$



Parzen windows and classification

- Parzen windows provide a way to estimate $p(\mathbf{x})$ for any $\mathbf{x}$, given a set of points $\mathbf{X}$
- They can be applied to classify an item $\mathbf{x}$ by estimating $p(\mathbf{x}|C_k)$ for all classes, by referring to the sets $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_k$ of items in the training set belonging to each class
- According to bayesian classification, $\mathbf{x}$ is predicted to the class with index

$$\begin{aligned}
\underset{i}{\operatorname{argmax}}\; p(\mathbf{x}|C_i)p(C_i) &= \underset{i}{\operatorname{argmax}}\; \frac{1}{n_i h^d}\sum_{i=1}^{n_i} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right)p(C_i) = \\
&= \underset{i}{\operatorname{argmax}}\; \frac{1}{n h^d}\sum_{i=1}^{n_i} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) \\
&= \underset{i}{\operatorname{argmax}}\; \sum_{i=1}^{n_i} k\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right)
\end{aligned}$$

- that is, an item is assigned to the class with most (weighted by the kernel) points near $\mathbf{x}$, that is in an hypercube of edge size h with center $\mathbf{x}$

Density estimation through kNN

La regione che consideriamo è la più piccola (attorno ad $\mathbf{x}$) che prende k elementi. La forma è un'ipersfera

- The region around $\mathbf{x}$ is extended to include k items
- The estimated density is

$$p(\mathbf{x}) \simeq \frac{k}{nV} = \frac{k}{nc_d r_k^d(\mathbf{x})}$$

where:

- c_d is the volume of the d-dimensional sphere of unitary radius
- $r_k^d(\mathbf{x})$ is the distance from $\mathbf{x}$ to the k-th nearest item (the radius of the smallest sphere with center $\mathbf{x}$ containing k items)

  ↳ raggio elevato alla d

È comodo perché evidenzia il ruolo che ha il raggio.

- To estimate $p(C_i|\mathbf{x})$ in order to classify $\mathbf{x}$, let us consider a hypersphere of volume V with center $\mathbf{x}$ containing k items from the training set
- Let k_i be the number of such items belonging to class C_i. Then, the following approximation holds:

$$p(\mathbf{x}|C_i) = \frac{k_i}{n_i V}$$

  where n_i is the number of items in the training set belonging to class C_i
- Similarly, for the evidence,

$$p(\mathbf{x}) = \frac{k}{nV}$$

- And, for the prior distribution,

$$p(C_i) = \frac{n_i}{n}$$

- The class posterior distribution is then

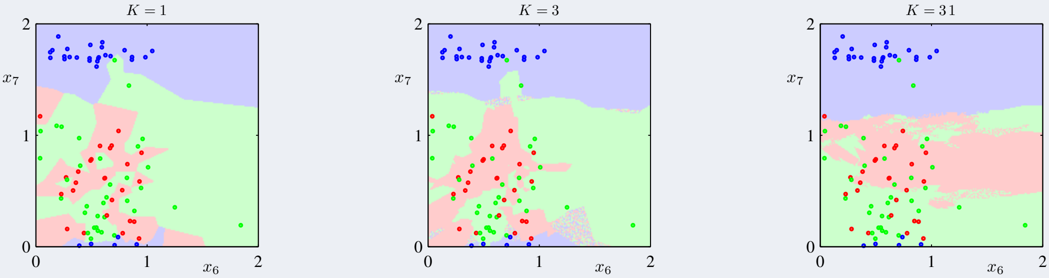
$$p(C_i|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|C_i)p(C_i)}{p(\mathbf{x})} = \frac{\frac{k_i}{n_i V}\cdot\frac{n_i}{n}}{\frac{k}{nV}} = \frac{k_i}{k} \implies$$

Consideriamo la sfera più piccola dove entrano k elementi del training set suddivisi nelle diverse classi.
k_i e' il n° di elementi $\in C_i$

i k più vicini come distanza euclidea ad $\mathbf{x}$

assegnamo alla classe per cui k_i e' più grande $\Rightarrow$ che ha più elementi che cadono nella regione

- Simple rule: an item is classified on the basis of similarity to near training set items
- To classify $\mathbf{x}$, determine the k items in the training nearest to it and assign $\mathbf{x}$ to the majority class among them
- A metric is necessary to measure similarity.



i K elementi più vicini al punto saranno del colore della regione.

Complessità algoritmica: devo considerare TUTTE le distanze da x $\Rightarrow$ no soluzioni $O(n)$ per n elementi. Posso costruire strutture di dati come alberi per migliorare, siamo fuori dal ML.

- kNN is a simple classifier which can work quite well, provided it is given a good distance metric and has enough labeled training data: it can be shown that it can result within a factor of 2 of the best possible performance as $n \to \infty$
- subject to the curse of dimensionality: due to the large sparseness of data at high dimensionality, items considered by kNN can be quite far away from the query point, and thus resulting in poor locality.

Sono tecniche semplici, generali ma costose perché non c'è una visione complessa del training set: il modello intermedio da una rappresentazione sintetica del training set. Il confronto del punto da classificare è con d coefficienti $< n$.

Tutto vale se è definita una funzione di distanza, quindi se i punti non sono in uno spazio 2D ma può anche valere una distanza che rispetti gli assiomi ma sia diversa.

È pesantemente soggetto al "curse of dimensionality": se l'insieme è di dimensione elevata i dati sono molto sparsi e quindi, con le Pazner Window possiamo ritrovarci delle finestre vuote.
Con kNN le finestre non sono mai vuote ma per farci entrare qualcosa occorre coprire una dimesione molto ampia, allora l'ipotesi iniziale che la regione sia sempre la stessa diventa sempre più remota.

Il metodo diventa quindi più "traballante": se devo guardare ad una regione grande, dove magari la distribuzione di probabilità cambia equivale a dire che stiamo facendo un'approssimazione abbastanza improtante.