

# Лекция 20

## Метрические методы классификации

Е. А. Соколов  
ФКН ВШЭ

21 марта 2021 г.

### 1 Классификатор $k$ ближайших соседей

Рассмотрим задачу классификации:  $\mathbb{Y} = \{1, \dots, K\}$ . Пусть дана обучающая выборка  $X = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$  и функция расстояния  $\rho : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \rightarrow [0, \infty)$ . Мы не будем требовать, чтобы функция расстояния являлась метрикой — достаточно, чтобы она была симметричной и неотрицательной. Не будем строить модель на этапе обучения, а вместо этого просто запомним обучающую выборку. Пусть теперь требуется классифицировать новый объект  $u$ . Расположим объекты обучающей выборки  $X$  в порядке неубывания расстояний до  $u$ :

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

где через  $x_u^{(i)}$  обозначается  $i$ -й сосед объекта  $u$ . Алгоритм  *$k$  ближайших соседей* ( $k$  nearest neighbours,  $k$ NN) относит объект  $u$  к тому классу, представителей которого окажется больше всего среди  $k$  его ближайших соседей:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k [y_u^{(i)} = y]. \quad (1.1)$$

#### §1.1 Метод парзеновского окна

Проблема формулы (1.1) состоит в том, что она никак не учитывает расстояния до соседей. Действительно, если рассматривается 7 ближайших соседей, и для объекта  $u$  ближайшие два объекта находятся на расстоянии  $\rho(u, x) \approx 2$ , а остальные — на расстоянии  $\rho(u, x) \geq 100$ , то было бы логично обращать внимание только на первые два объекта. Чтобы добиться этого, можно ввести веса в модель:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k w(i, u, x_u^{(i)}) [y_u^{(i)} = y]. \quad (1.2)$$

Веса можно делать затухающими по мере роста номера соседа  $i$  (например,  $w(i, u, x) = \frac{k+1-i}{k}$ ), но лучше использовать расстояния при их вычислении. Это делается в *методе парзеновского окна*:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k K \left( \frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) [y_u^{(i)} = y], \quad (1.3)$$

где  $K$  — это ядро,  $h$  — ширина окна.

## 2 Ядровая регрессия

В методе  $k$  ближайших соседей (1.3) мы, по сути, максимизировали взвешенную долю правильных ответов среди соседей при предсказании константой  $y$ . Иными словами, мы старались в каждой точке пространства выбрать такое значение модели, которое было бы оптимально для некоторой окрестности этой точки.

Попробуем воспользоваться этим соображением, чтобы обобщить подход на задачу регрессии. Будем выбирать в каждой точке такой ответ, который лучшим образом приближает целевую переменную для  $k$  ближайших соседей:

$$a(u) = \arg \min_{c \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^k K \left( \frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) (c - y_u^{(i)})^2.$$

Можно в явном виде выписать решение оптимизационной задачи:

$$a(u) = \frac{\sum_{i=1}^k K \left( \frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) y_u^{(i)}}{\sum_{i=1}^k K \left( \frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right)} \quad (2.1)$$

Данную модель иногда называют формулой Надарая-Ватсона.

## 3 Оптимальность метода kNN

Рассмотрим задачу бинарной классификации в вероятностной постановке — будем считать, что в каждой точке пространства определена вероятность положительного класса  $p(y = +1 | x)$ . Допустим, мы хотим сделать предсказание для объекта  $u$ . Будем считать, что размер обучающей выборки стремится к бесконечности — в этом случае для ближайшего к  $u$  объекта  $x_u$  из выборки распределение  $p(y = +1 | x_u)$  слабо отличается от  $p(y = +1 | u)$  (мы предполагаем, что функция распределения непрерывна по  $u$ ). Для простоты предположим, что эти распределения совпадают:  $p(y = +1 | x_u) = p(y = +1 | u)$ . Вероятность ошибки метода одного ближайшего соседа равна

$$\begin{aligned} p_{1nn} &= p(y = +1 | x_u)(1 - p(y = +1 | u)) + (1 - p(y = +1 | x_u))p(y = +1 | u) = \\ &= 2p(y = +1 | u)(1 - p(y = +1 | u)). \end{aligned}$$

Оптимальный байесовский классификатор будет выдавать в точке  $u$  прогноз

$$k_* = \arg \max_{k \in \mathbb{Y}} p(y = k | u).$$

Вероятность ошибки оптимального классификатора равна

$$p_{\text{bayes}} = 1 - p(y = k_* | u).$$

Отсюда можно вывести, что

$$p_{1nn} = 2p(y = k_* | u)(1 - p(y = k_* | u)) \leq 2(1 - p(y = k_* | u)) = 2p_{\text{bayes}}.$$

Мы показали, что асимптотически вероятность ошибки метода одного ближайшего соседа в худшем случае в два раза больше, чем вероятность ошибки оптимального классификатора. Это утверждение можно показать строго; более того, оно верно не только для бинарной классификации. Например, для многоклассовой классификации выполнено

$$p_{\text{1nn}} \leq 2p_{\text{bayes}} - \frac{K}{K-1} p_{\text{bayes}}^2.$$

Из данных рассуждений следует, что если бы в любой задаче нам было доступно неограниченное количество данных, то было бы достаточно применить метод одного ближайшего соседа — он близок по качеству к оптимальному, и нет необходимости в других моделях.

## 4 Расстояния между текстами

Основной параметр, от которого зависит качество метрических методов — это функция расстояния  $\rho(x, z)$ . Если она выбрана правильно, то kNN может заменить любую другую модель. Для примера рассмотрим способы измерения расстояний для текстовых данных.

Тексты можно закодировать с помощью мешка слов. В этом случае каждый текст представляется в виде вектора длины  $d$  (размер словаря), и  $i$ -й элемент этого вектора равен  $x_i = \frac{c_i}{\sum_{k=1}^d c_k}$ , где  $c_i$  — доля вхождений  $i$ -го слова в документ. После этого расстояние между текстами можно измерять, например, через косинус между их векторами:

$$\rho(x, z) = \frac{\langle x, z \rangle}{\|x\| \|z\|}.$$

Такой подход никак не учитывает, что различные слова могут быть близки друг к другу по смыслу. Например, фразы «Obama speaks to the media in Illinois» и «The President greets the press in Chicago» после удаления артиклей и предлогов не будут иметь общих слов, но при этом несут один и тот же смысл. Фраза «The band gave a concert in Japan» тоже не содержит общих слов, но теперь её слова по смыслу отличаются от слов из первых двух фраз.

Одна из мер сходства смыслов слов — это расстояние между их представлениями (например, word2vec). Обозначим такое расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м словами словаря через  $c(i, j)$ .

Теперь мы можем определить расстояние между текстами. Будем считать, что из  $i$ -го слова в тексте  $x$  в  $j$ -е слово текста  $z$  «перетекает» некоторое количество  $t_{ij}$  смысла. Чем меньше похожи эти слова, тем сложнее перемещать смысл между ними — а именно, сложность такого перемещения зададим как  $c(i, j)t_{ij}$ . Расстояние будет равно минимальной сложности перемещения всех слов первого текста в слова

второго:

$$\begin{cases} \rho(x, z) = \min_{t_{ij}} \sum_{i,j=1}^d t_{ij} c(i, j) \\ \sum_{j=1}^d t_{ij} = x_i; \\ \sum_{i=1}^d t_{ij} = z_j; \\ t_{ij} \geq 0. \end{cases}$$

Данную задачу можно решать, например, алгоритмами поиска максимального потока минимальной стоимости.

## 5 Методы поиска ближайших соседей

### §5.1 Точные методы

Разберем методы поиска ближайших соседей для евклидовой метрики. Будем рассматривать задачу поиска одного ближайшего соседа, все методы несложно обобщаются на случай с  $k > 1$ .

Если просто перебирать все объекты обучающей выборки, выбирая наиболее близкий к новому объекту, то получаем сложность  $O(\ell d)$ .

Можно выбрать подмножество признаков, и сначала вычислить расстояние только по этим координатам. Оно является нижней оценкой на полноценное расстояние, и если оно уже больше, чем текущий наилучший результат, то данный объект можно больше не рассматривать в качестве кандидата в ближайшего соседа. Такой подход является чисто эвристическим и не гарантирует сублинейной сложности по размеру обучения.

**kd-деревья.** Одной из структур данных, позволяющих эффективно искать ближайших соседей к заданной точке, является *kd-дерево*. Оно разбивает пространство на области (каждая вершина производит разбиение по определенной координате), и каждый лист соответствует одному объекту из обучающей выборки. Обходя это дерево определенным образом, можно найти точку из обучения, ближайшую к заданной. Если размерность пространства небольшая (10-20), то данный подход позволяет находить ближайшего соседа за время порядка  $O(\log \ell)$ .

Экспериментально было установлено, что в пространствах большой размерности сложность поиска ближайшего соседа в kd-дереве сильно ухудшается и приобретает линейный порядок сложности [1].

### §5.2 Приближенные методы

Есть два способа борьбы с высокой сложностью поиска ближайших соседей при большом числе признаков:

1. Запоминать не всю обучающую выборку, а лишь ее представительное подмножество. Существует большое число эвристических алгоритмов для отбора эталонных объектов (например, STOLP).
2. Искать  $k$  ближайших соседей приближенно, то есть разрешать результату поиска быть чуть дальше от нового объекта, чем  $k$  его истинных соседей. Ниже мы подробно разберем этот подход.

Опишем метод приближенного поиска ближайших соседей LSH (locality-sensitive hashing). Его идея заключается в построении такой хэш-функции для объектов выборки, которая с большой вероятностью присваивает одинаковые значения близким объектам и разные значения отдаленным объектам. Дадим формальное определение.

**Опр. 5.1.** Семейство функций  $\mathcal{F}$  называется  $(d_1, d_2, p_1, p_2)$ -чувствительным, если для всех  $x, y \in \mathbb{X}$  выполнено:

- Если  $\rho(x, y) \leq d_1$ , то  $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}[f(x) = f(y)] \geq p_1$ .
- Если  $\rho(x, y) \geq d_2$ , то  $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}[f(x) = f(y)] \leq p_2$ .

Здесь под вероятностью  $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}$  понимается равномерное распределение на всех функциях семейства  $\mathcal{F}$ .

Отметим, что определение имеет смысл лишь если  $d_1 \leq d_2$  и  $p_1 \geq p_2$ .

**Пример.** Рассмотрим пример семейства хэш-функций для меры Джаккарда, которое носит название MinHash. Пусть объекты представляют собой множества, являющиеся подмножествами универсального упорядоченного множества  $U = \{u_1, \dots, u_n\}$ . Выберем перестановку  $\pi$  на элементах этого множества, и определим хэш-функцию  $f_\pi(A)$  так, чтобы она возвращала номер первого элемента в данной перестановке, входящего в  $A$ :

$$f_\pi(A) = \min\{\pi(i) \mid u_i \in A\}.$$

Это преобразование можно интерпретировать следующим образом. Будем считать, что элементы наших множеств — это слова. Перестановка  $\pi$  задает *степени важности* слов (чем меньше  $\pi(i)$ , тем важнее  $i$ -е слово). Например, если мы решаем задачу классификации текстов на научные и ненаучные, то предлоги и союзы должны иметь малый уровень важности, а слова «аннотация», «бустинг», «переобучение» — высокий уровень важности, поскольку их наличие свидетельствует о научности текста. Описанная хэш-функция возвращает для документа уровень важности самого важного слова в нем — в нашем примере это означает, что мы находим самое «научное» слово в тексте, и характеризуем документ именно этим словом.

Покажем, что множество всех MinHash-функций  $\mathcal{F} = \{f_\pi \mid \pi \in \text{Sym}(U)\}$  является  $(d_1, d_2, p_1, p_2)$ -чувствительным.

Сначала докажем следующее утверждение: вероятность того, что случайно выбранная функция  $f_\pi \in \mathcal{F}$  будет принимать одинаковые значения на двух заданных множествах  $A$  и  $B$ , равна коэффициенту Джаккарда  $\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = 1 - \rho_J(A, B)$  этих двух множеств. Разобьем элементы  $u$  универсального множества  $U$  на три типа:

1.  $u \in A, u \in B$ .
2.  $u \in A, u \notin B$  или  $u \notin A, u \in B$ .
3.  $u \notin A, u \notin B$ .

Обозначим число объектов первого типа через  $p$ , а число объектов второго типа — через  $q$ . Заметим, что через  $p$  и  $q$  можно выразить коэффициент Джаккарда для множеств  $A$  и  $B$ :  $1 - \rho_J(A, B) = \frac{p}{p+q}$ .

Вероятность того, что значения случайно выбранной хэш-функции будут одинаковыми на множествах  $A$  и  $B$ , равна вероятности того, что в случайно выбранной перестановке множества  $U$  элемент первого типа встретится раньше элемента второго типа; элементы третьего типа на значение хэш-функции никак не влияют. Последняя же вероятность равна  $\frac{p}{p+q}$ . Утверждение доказано.

Пусть расстояние Джаккарда между двумя множествами  $\rho_J(A, B)$  не превосходит  $d_1$ . Тогда для коэффициента Джаккарда выполнено  $1 - \rho_J(A, B) \geq 1 - d_1$ , а значит, для вероятности  $p_1$  того, что случайно выбранная функция из  $\mathcal{F}$  даст одинаковые хэши для этих множеств, выполнено  $p_1 \geq 1 - d_1$ . Отсюда получаем, что  $\mathcal{F}$  является  $(d_1, d_2, 1 - d_1, 1 - d_2)$ -чувствительным семейством.

**Композиция хэш-функций.** Семейство хэш-функций уже можно использовать для поиска ближайших соседей. Выберем случайную хэш-функцию  $f$ , создадим таблицу  $T$ , и разместим каждый объект обучающей выборки  $x$  в ячейке  $f(x)$  этой хэш-таблицы<sup>1</sup>. Пусть теперь требуется найти  $k$  ближайших соседей для объекта  $u$ . Вычислим для него хэш  $f(u)$ , возьмем все объекты из соответствующей ячейки хэш-таблицы, и вернем из них  $k$  ближайших к  $u$ . Однако, как правило, разница между вероятностями  $p_1$  и  $p_2$  оказывается не очень большой, поэтому либо истинные  $k$  ближайших соседей не окажутся в ячейке  $f(u)$ , и результат будет далек от оптимального, либо в эту ячейку попадет слишком много лишних объектов, и тогда поиск окажется слишком трудозатратным.

Чтобы увеличить разницу между вероятностями  $p_1$  и  $p_2$ , можно объединять несколько простых хэш-функций из семейства в одну сложную. Выберем для этого  $m$  функций  $f_1, \dots, f_m$  из  $\mathcal{F}$  и построим новую функцию  $g_1(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$ . Повторим процедуру  $L$  раз и получим  $L$  таких функций  $g_1(x), \dots, g_L(x)$ . Для каждой функции  $g_i(x)$  создадим свою хэш-таблицу  $T_i$ , и поместим каждый объект обучающей выборки  $x$  в ячейку  $g_i(x)$  этой таблицы. Чтобы найти  $k$  ближайших соседей для нового объекта  $u$ , выберем объекты из ячеек  $g_1(x), \dots, g_L(x)$  таблиц  $T_1, \dots, T_L$  соответственно, и вернем  $k$  наиболее близких из них.

Данный алгоритм имеет два параметра: число базовых функций в одной композиции  $m$ , и число таких композиций  $L$ . Увеличение параметра  $m$  приводит к уменьшению вероятности того, что два непохожих объекта будут признаны схожими. Действительно, для того, чтобы значения композиции совпали на двух объектах, необходимо, чтобы совпали значения  $m$  базовых хэш-функций. Если расстояние между этими объектами велико, т.е.  $\rho(x, y) \geq d_2$ , то вероятность совпадения значений  $m$

<sup>1</sup>Поскольку множество значений хэш-функции может быть большим, обычно таблица  $T$  сама является хэш-таблицей.

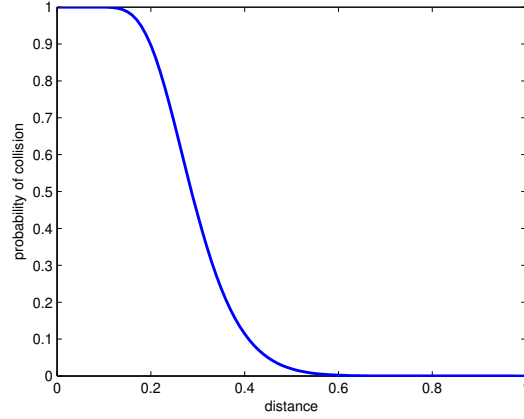


Рис. 1. Пример зависимости вероятности того, что два объекта будут признаны алгоритмом как схожие, от расстояния между этими объектами.

базовых функций не будет превышать  $p_2^m$ . В то же время чрезмерное увеличение параметра  $m$  может привести к тому, что практически все объекты попадут в разные ячейки хэш-таблицы, и для новых объектов не будет находится ни одного соседа.

Увеличение же параметра  $L$  приводит к увеличению вероятности того, что два схожих объекта будут действительно признаны схожими. Действительно, объект  $x$  будет рассмотрен нашим алгоритмом как кандидат в  $k$  ближайших соседей для  $u$ , если хотя бы один из хэшей  $g_1(x), \dots, g_L(x)$  совпадет с хэшем  $g_1(u), \dots, g_L(u)$  соответственно. Если объекты  $x$  и  $u$  действительно схожи, то есть  $\rho(x, u) \leq d_1$ , то вероятность того, что они будут признаны схожими, больше или равна  $1 - (1 - p_1)^L$  (в случае  $m = 1$ ). В то же время чрезмерное увеличение параметра  $L$  приведет к тому, что для нового объекта будет рассматриваться слишком много кандидатов в  $k$  ближайших соседей, что приведет к снижению эффективности алгоритма.

Итоговый алгоритм является  $(d_1, d_2, 1 - (1 - p_1^m)^L, 1 - (1 - p_2^m)^L)$ -чувствительным. Вид зависимости вероятности коллизии от расстояния между объектами приведен на рис. 1 (для  $m = 10, L = 20$ ). Видно, что описанный способ композиции базовых хэш-функций позволяет добиться того, что вероятность коллизии двух объектов как функция от расстояния имеет резкий скачок в определенной точке (в нашем примере 0.7). За счет выбора параметров  $L$  и  $m$  можно менять положение точки скачка, а также регулировать сложность алгоритма. На практике эти параметры выбирают с помощью кросс-валидации.

Отметим также, что биты хэшей  $g_1(u), \dots, g_L(u)$  можно использовать как признаки, над которыми будет запускаться метод  $k$  ближайших соседей.

**Теоретические гарантии.** Будем говорить, что алгоритм решает задачу поиска  $s$ -ближайшего соседа, если для нового объекта  $u$  он с вероятностью  $1 - \varepsilon$  возвращает объект выборки, удаленный от  $u$  не более чем в  $s$  раз сильнее, чем ближайший к  $u$  объект выборки. Существует теоретический результат, который говорит, что можно выбрать параметры  $L$  и  $m$  так, что описанный алгоритм будет решать задачу поиска  $s$ -ближайшего соседа за  $O(d \ell^r \log \ell)$ , где  $r$  для многих функций расстояния имеет порядок  $1/c$  [2].



**Хэш-функции для косинусного расстояния.** Для косинусного расстояния используют следующее семейство функций:

$$\mathcal{F} = \{f_w(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle \mid w \in \mathbb{R}^d\}.$$

Каждая хэш-функция соответствует некоторой гиперплоскости, проходящей через начало координат, и возвращает для каждого вектора либо  $+1$ , либо  $-1$  в зависимости от того, по какую сторону от этой гиперплоскости он находится.

**Хэш-функции для евклидовой метрики.** В данном случае хэш-функция соответствует некоторой прямой в  $d$ -мерном пространстве, разбитой на отрезки длины  $r$ . Функция проецирует объект  $x$  на эту прямую и возвращает номер отрезка, в который попала проекция. Формально, семейство хэш-функций имеет вид

$$\mathcal{F} = \left\{ f_{w,b}(x) = \left\lfloor \frac{\langle w, x \rangle + b}{r} \right\rfloor \mid w \in \mathbb{R}^d, b \in [0, r) \right\}.$$

При этом, в отличие от описанных выше семейств, функции выбираются не равномерно: каждая компонента проекционного вектора  $w$  выбирается из стандартного нормального распределения  $\mathcal{N}(0, 1)$ .

Данное семейство может быть обобщено на расстояния Минковского с  $p \in (0, 2]$ . В этом случае компоненты вектора  $w$  должны выбираться из  $p$ -устойчивого распределения [3]. Например, для  $p = 1$  таковым является распределение Коши.

**LSH forest.** В методе LSH присутствует два параметра: размерность хэша  $m$  и число хэшей  $L$ . Оба следует подбирать под конкретную задачу, и от их выбора может сильно зависеть качество поиска соседей. Один из вариантов решения — алгоритм *LSH forest* [4], в котором предлагается применить каждую хэш-функцию  $g_i$  к выборке и построить префиксное дерево на её выходах. Затем в качестве ближайших соседей для нового объекта объявляются те объекты из выборки, с которыми он оказался в наиболее глубоких листовых вершинах. Такой подход позволяет устранить зависимость от размера хэша и количества хэш-функций и получать хорошее качество при их фиксированных значениях.

**Рандомизированные алгоритмы.** Подходы вроде locality-sensitive hashing достаточно популярны и используются для решения многих задач. Так, *фильтр Блума* позволяет с помощью небольшого числа бит и семейства хэш-функций описать множество и проверять любой элемент на принадлежность ему. Алгоритм *HyperLogLog* может приближенно найти число различных элементов в последовательности, используя хэш-функции. Во всех этих методах используется одна и та же идея: охарактеризовать сложную структуру с помощью некоторого количества случайных признаков, и затем использовать только их для поиска нужной величины.

**Обучение хэшированию.** Рандомизированные методы простые в реализации и применении, но обладают существенным недостатком — никак не зависят от данных и от задачи, для решения которой используются. Легко представить ситуацию, в которой все объекты сосредоточены в небольшом густом облаке, и максимальный угол между двумя объектами составляет 10 градусов. В этом случае большинство хэширующих



гиперплоскостей, генерируемых для косинусного расстояния, будут бесполезны. Было бы разумно выбирать их так, чтобы они попадали в облако объектов.

На решение этой проблемы направлены методы *обучения хэшированию* [5]. Их изложение выходит за рамки этого текста — отметим лишь, что они зачастую позволяют существенно уменьшить число бит в хэше при сохранении точности поиска ближайших соседей.

## Список литературы

- [1] *Weber, R., Schek, H. J., Blott, S.* (1998). A Quantitative Analysis and Performance Study for Similarity-Search Methods in High-Dimensional Spaces. // Proceedings of the 24th VLDB Conference, New York C, 194–205.
- [2] *Andoni, A., Indyk, P.* (2008). Near-optimal hashing algorithms for approximate nearest neighbor in high dimensions. // Communications of the ACM, 51(1), 117.
- [3] *Datar, M., Immorlica, N., Indyk, P., Mirrokni, V. S.* (2004). Locality-sensitive hashing scheme based on p-stable distributions. // Proceedings of the twentieth annual symposium on Computational geometry - SCG '04, 253.
- [4] *Bawa, Mayank and Condie, Tyson and Ganesan, Prasanna* (2005). LSH Forest: Self-tuning Indexes for Similarity Search. // Proceedings of the 14th International Conference on World Wide Web.
- [5] *Wang, J., Liu, W., Kumar, S., Chang, S.-F.* (2015). Learning to Hash for Indexing Big Data - A Survey. <http://arxiv.org/abs/1509.05472>