模式识别

度量Metric

信息论Information Theory简介

决策树Decision tree

吴建鑫

南京大学计算机系 & 人工智能学院，2020

目标

- ✓ 理解和掌握度量的基本知识
- ✓ 掌握~~了解~~常见的度量
- ✓ 掌握信息论的基本概念
- ✓ 掌握决策树的基本知识

- ✓ 提高目标
  - 进一步能通过独立阅读、了解distance metric learning
  - 进一步能通过独立阅读、了解ensemble of decision tree和random forest

度量

Metric

深度学习=表示学习

特征的表示和比较

- 两个重要的任务：
  - 特征的表示：特征抽取后，如何表示为数学化或者计算机可以理解的数据形式？
    - 到目前为止：所有数据均表示为一个连续的实数值的向量$x \in \mathbb{R}^d$
  - 特征的比较：比较两个点的相似性
    - 在NN、线性分类器、SVM中到目前为止是用欧式距离
    - 在概率方法中，如高斯分布和KDE，也是欧式距离
- 对这些数据（实数向量、可以计算距离或相似程度），称为metric data
- 但是：还有很多其他类型的数据

更多的数据类型

- ✓ 标记数据Nominal data
  - 如数据1,2,3分别表示苹果、梨和香蕉
  - 不是连续的实数值、也不可以比较大小（1 < 2代表苹果不如梨吗？）、不可以比较相似性
- ✓ 时间序列数据time series data
  - 如一个序列(63,64,62)是单个样例，表示某人今天早中晚测量的体重；(61,65)是第二天早晚的体重
  - 不是向量，测量次数不等，如何比较？
- ✓ …
- ✓ 后续章节将针对不同数据的模式识别进行介绍

更多的度量

- 目前已用
  - 不相似程度或距离：欧式距离
  - 相似程度：内积或者RBF核
  - 两种紧密关联
- 但是，数据的不同特点要求使用不同的度量

- 那么，什么是度量metric？

Metric

- ✓ 一个度量d必须满足：对任意向量$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$
  - 非负nonnegative：$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \geq 0$
  - 自反：$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 0$当且仅当$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$
  - 对称symmetric：$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = d(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})$
  - 三角不等式triangle inequality：$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + d(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \geq d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$
- ✓ 欧式距离满足这些条件吗？

$d^2(x,y)=(x-y)^T \underline{dig}(x-y)$

每一维 权重

从欧式距离到度量学习

- ✓ Euclidean distance: 欧氏 $d^2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$
- ✓ Mahalanobis distance: 马氏 $d^2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$
  - Σ是数据的协方差矩阵 (不一定对角，非对角表示维与维不独立)
  - 练习：若对数据进行白化操作，则原空间中的马氏距离等价于自化变化以后新空间的欧式距离
- ✓ 进一步推广：可以用一个半正定的矩阵A代替Σ^{-1}
  - $d_A^2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T A(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$
  - A半正定，存在G，使得$A = G^T G$ (G不一定是方阵)
  - 因此，$d_A^2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \|G\boldsymbol{x}-G\boldsymbol{y}\|_2^2$ （如A不正定，？）
  - 那么，如何设置A的值？可以使用标记信息！
    - 进一步阅读：distance metric learning度量学习

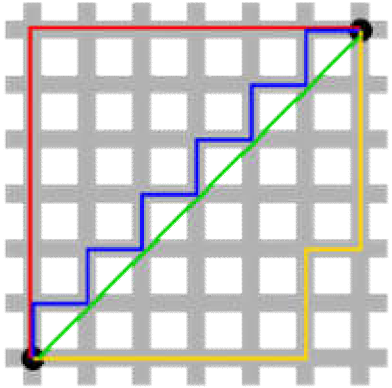
绝对值：$(-0.3)^{\pi}$ ×

$(0.3)^{\pi}$ 有意义

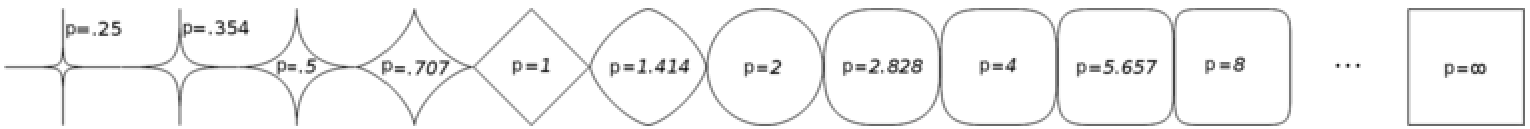
固定形式的distance

✓ Minkowski distance：$d_p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \left(\sum_{i=1}^{d}|x_i - y_i|^{p}\right)^{\frac{1}{p}}$

- $p \geq 1$时是metric
- $p = 2$时是欧式距离
- 重要 $p = 1$：$\sum_{i=1}^{d}|x_i - y_i|$，称为Manhattan distance曼哈顿距离，或者city block distance
- 若$p < 1$，不是metric（举例？）
  - 但是有时仍然可以用来比较两样例



图片来自英文Wiki



Norm、distance、similarity

✓ 一个向量$\boldsymbol{x}$的p norm（或者L_p norm）：

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{d} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

- 限制条件：$p \geq 1$
  - $\cancel{\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max(|x_1|, \ldots, |x_d|)}$ max(|X1|, …, |Xd|)

✓ 距离和长度的关系：$d_p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_p$

✓ 从距离（不相似度）到相似度，例如

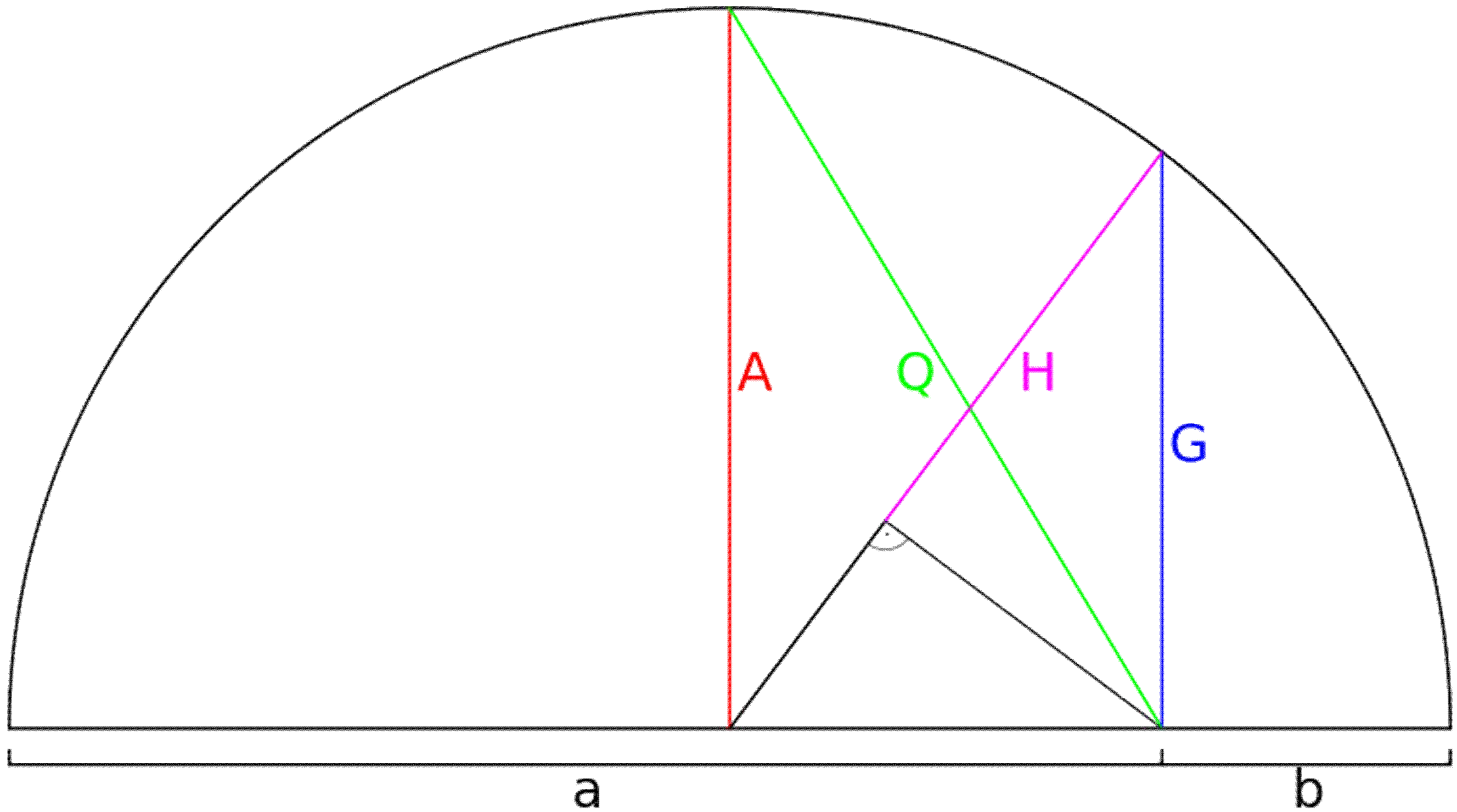
$$\cancel{\exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_p)}$$

exp(-γ ||x-y||p)

幂平均函数

✓ 幂平均power mean (generalized mean) function

- $M_p(x_1,\ldots,x_n) = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^p\right)^{\frac{1}{p}}$ 要求 $x_i > 0$
- 对p在整个实数轴上都有定义(有些通过极限定义)
  - $M_{-\infty} = \min(x_1,\ldots,x_n)$
  - M_{-1} --调和平均harmonic mean 已经用过
  - $M_0 = \sqrt[n]{x_1 x_2 \cdots x_n}$ -- 几何平均
  - M_1 --算术平均
  - M_2 --root mean square
  - $M_{\infty} = \max(x_1,\ldots,x_n)$
- 若$p < q$，则$M_p(x_1,\ldots,x_n) \le M_q(x_1,\ldots,x_n)$



若考虑两个实数a和b，

则$M_p(a,b)$可以视为比较他们的相似程度

图片来自英文Wiki

幂平均核power mean kernel

$$M_p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{d} M_p(x_i, y_i)$$

- ✓ 当$p \leq 0$时，以上函数为Mercer核
- ✓ 属于加性核additive kernel
  - $p=0$， $\sqrt{x_i y_i}$ -- Hellinger’s Kernel
  - $p=-1$， $\frac{2x_i y_i}{x_i+y_i}$ -- χ^2核
  - $p=-\infty$， $\min(x_i, y_i)$ --histogram intersection核（直方图相交？）
- ✓ 当特征是直方图时，加性核效果极佳
- ✓ 进一步阅读：关于加性核

Nominal data

标记数据

标记数据的比较

- ✓ 标记数据Nominal data
  - 如数据1,2,3分别表示苹果、梨和香蕉，怎么比较？
- ✓ 基本思想：相同则为1，否则为0，即两个标记数据 x和y的相似度为$\mathbb{I}(x=y)$

  指示函数
- ✓ 度量化
  - 设标记数据可以取m个不同的值，标记为$\{1,2,\ldots,m\}$
  - 将标记数据$x=i$转换成一个向量$\begin{array}{ccc} \big(\mathbf{0}_{i-1} & 1 & \mathbf{0}_{d-i}\big) \\ <i & i & >i \end{array}$
  - 假设x，y转换为$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}$，那么$\mathbb{I}(x=y)=$？ $x^T y$
  - SVM即可用该方法处理标记数据

转换为向量的优点：① 内积易优化，可视为 metric data
② 适用于SVM

缺点：维度变高，但稀疏向量内积计算开销小

从度量化到直方图

- 可以看成，度量化的过程是将一个标记数据转化成为一个所有可能取值的直方图
  - 一个直方图histogram是对一个集合中元素的计数
  - 若$x = i$，其度量化的结果$\boldsymbol{x}$为m个bin的直方图
  - 第i个bin值为1，表示有一个样例取值为i
  - 其余所有bin为0，表示没有任何样例取这些值
  - 是一个有效的对集合$\{x\}$的直方图吗？
- 那么，假设有两组数据，直方图分别为$\boldsymbol{x}$和$\boldsymbol{y}$
  - 应该怎么计算其相似性？两个直方图的相似性
  - $\cancel{\min(x_i, y_i)}$! $\sum \min(x_i, y_i)$

信息论（极）简介

A (very) brief introduction to the information theory

从直方图到概率分布

- ✓ 在非参数估计中，我们怎么估计一个分布？
  - 最早从直方图开始
- ✓ 那么我们怎么比较两个分布呢？
  - 假设p和q是两个离散分布，那么HIK可以用吗？怎么用？
  - 如果是连续分布呢？有没有理论上完备的方法？
  - 信息论！Information theory

传送一段信息的最优编码长度:信息量

信息information

- 描述一个随机变量需要多少信息?
  - 假设用bit来作为信息的单位
  - 信息量=0 若离散变量满足$P(x=2)=1$，$P(x\neq 2)=0$?
  - 若离散变量是{1，2，3，4}上的均匀uniform分布?

    需要2个bit
- 熵entropy
  - H非负 $H=-\sum_{i=1}^{m} \cancel{P_i \log_2 P_i}$ $P_i \log_2 P_i$ （m个离散可能取值，各为P_i）
  - 如果$P_i=0$?
    - 定义$0\log_2 0=0$!，因为$\lim_{x\to 0} x\log_2 x=0$ 定义$0\log_2 0=0$
  - 什么时候最大? 什么时候最小?
    - 均匀分布的时候最大，$\cancel{\log_2 m}$ $\log_2 m$
    - 单点分布最小，0

Differential entropy

✓ 如果分布是连续的？ $-\int p(x)\ln(p(x))\,dx$

h(x)可以<0 $h(x) = \cancel{-\int p(x)\ln(p(x))dx}$

- 自然对数，单位是nat（奈特） $\frac{1}{2}\ln(2\pi e\sigma^2)$ 若 $\sigma^2 < \frac{1}{2\pi e}$，则h(x)<0

h(x)与μ无关

- 若$X \sim N(\mu,\sigma^2)$，则$h(X) = \frac{1}{2}\cancel{\ln(2\pi e\sigma^2)}$ nats

h(x)与pdf形状有关，是不确定性的度量

✓ 在所有$\boxed{\text{均值和方差固定}}$的$\boxed{\text{连续分布}}$中，高斯分布具有最大的熵

- 或者说，不确定性uncertainty最大

Joint, conditional entropy

✓ $H(X,Y) = -\sum_x \sum_y P(x,y) \cancel{\log_2 P(x,y)}$ $\log_2 P(x,y)$

(x,y)一起考虑的信息量

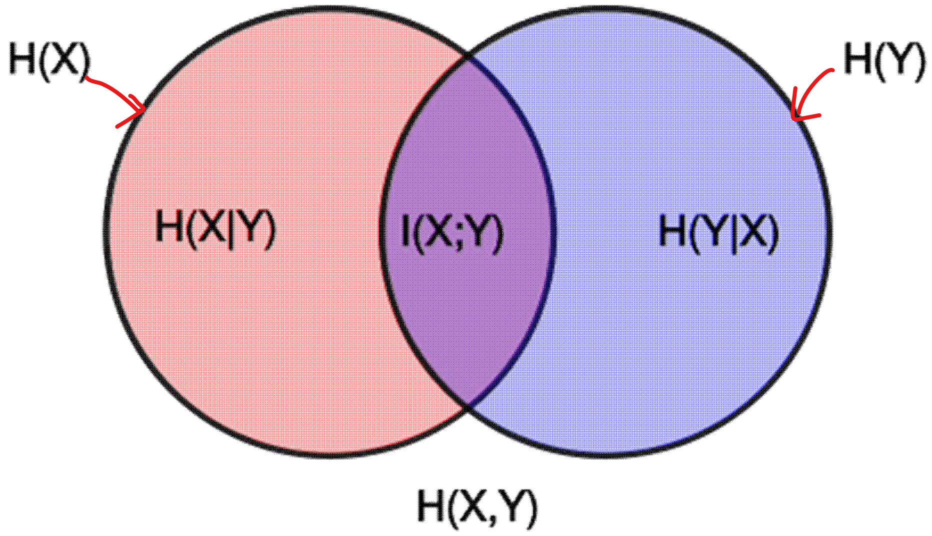
✓ $h(X,Y) = -\int p(x,y)\cancel{\ln p(x,y)}dxdy$ $\ln p(x,y)$

✓ $H(X|Y) = \sum_y p(y) H(X|Y=y) = \sum_{x,y} P(x,y)\log_2 \frac{P(y)}{P(x,y)} = -\sum_{x,y} P(x,y)\log_2 \frac{P(x,y)}{P(y)}$

✓ $h(X|Y) = -\int p(x,y)\ln p(x|y)dxdy = -\int p(x,y) ln \frac{p(x,y)}{p(y)} dxdy$

已知y, X还有多少信息量

各种熵之间的关系



用“描述长度”来记忆

- $H(X,Y) = H(Y) + H(X|Y)$
- $H(X,Y) = H(X) + H(Y|X)$
- $H(X|Y) \leq H(X)$
- $H(Y|X) \leq H(Y)$

问题

- $H(X|Y) = H(Y|X)$? 不一定
- 那么$I(X;Y)$代表什么？

  X,Y的共同信息

图片来自英文Wiki

互信息Mutual information

- 如果X和Y互相独立，即$p(x,y)=p(x)p(y)$，或者 $P(x,y)=P(x)P(y)$

  $I(X;Y)=\begin{cases} 0, & X对预测Y无用 \\ large, & X对预测Y很有用 \end{cases}$

  - 上面的图应该怎么画？
  - $I(X;Y)$表示X和Y共同的那部分信息

$$I(X;Y)=H(X)-H(X|Y)=\sum_{x,y}p(x,y)\overset{\log_2}{\cancel{\log_2}}\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}$$

x,y地位相等

$$=H(Y)-H(Y|X)$$

- $I(X;Y)=I(Y;X)$?
- 可以粗略的看成相似程度或者相关程度

KL散度

✓ Kullback-Leibler divergence：两个离散分布P和Q

$$D_{KL}(P||Q)=\sum_i P_i \overset{\log 2}{\cancel{\log_2}} \frac{P_i}{Q_i}$$

- $D_{KL}(P||Q) \geq 0$，等号当且仅当$\forall i, P_i = Q_i$时成立
- $I(X;Y) = D_{KL}(\underset{}{\overset{\text{联合分布}}{p(x,y)}}||\overset{\text{边际分布}}{p(x)p(y)})$
- 可以粗略看成"距离"，但不是 metric
- 但是，KL散度对称吗？不对称

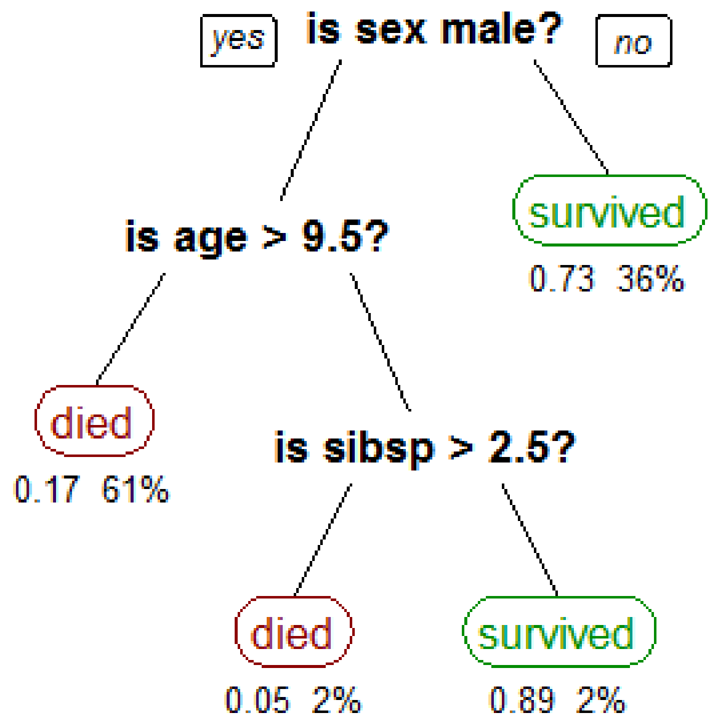
实用

决策树

分类
回归
…

Decision Tree

Titanic survivors



- 该判断模型是树tree
- 每次根据一个数据（称为属性）分成若干部分
- 当不可再分时（叶节点），给出一个决策decision
  - 通常输出的决策是标记数据
  - 可以输出一个概率分布

配偶 兄弟姐妹

图片来自英文Wiki。Sibsp: number of spouses or siblings aboard

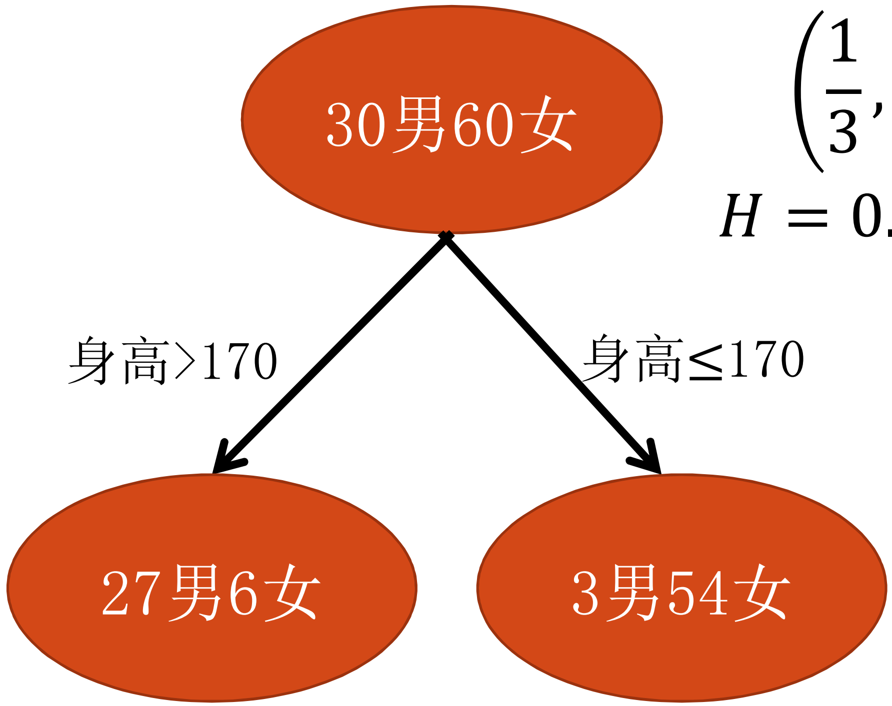
①怎么分
②什么时候不分
③怎么预测

那么，选哪个属性来分？

- ✓ 问题的输出是标记数据， 有m个可能的值
- ✓ 如果当前节点一共包含n个样例，记为集合T
- ✓ 其对应样例的grountruth输出是集合y_T
- ✓ 计算$H(y_T)$ - 当前节点的不纯度impurity
- ✓ 对每一个属性j (循环)
  - 其不同值将当前节点数据分为若干子集$T_1, T_2, \ldots$
  - 计算每个子集的entropy：$H(y_{T_k})$和比例w_k
  - 计算按此属性分开后的平均不纯度 $\sum_k w_k H(y_{T_k})$ 条件熵
  - Information gain信息增益：$H(y_T) - \sum_k w_k H(y_{T_k})$
- ✓ 选择信息增益最大的那个属性

递归执行

示意图：判断性别



$$\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)$$

$$H = 0.9183$$

$$\left(\frac{9}{11},\frac{2}{11}\right) \quad w_1 = \frac{33}{90}$$

$$H_1 = 0.6840$$

$$\left(\frac{1}{19},\frac{18}{19}\right) \quad w_2 = \frac{57}{90}$$

$$H_2 = 0.2975$$

Information gain:
0.4791

$$H - (w_1 H_1 + w_2 H_2)$$

其他问题

- ✓ 信息增益是一种选择的方法，其他方法很多
  - 在数据挖掘课程中讲述，这里不讲
- ✓ 但是，可以想象可能存在的其余问题？
  - 分到什么程度为止？即，什么时候不再分了？
  - 如果某属性有100个可能的取值，分100个嘛？
  - 其中有连续属性怎么办？
  - 计算和存储复杂度是多少？
  - …

进一步的阅读

- ✓ 如果对本章的内容感兴趣，可以参考如下文献
  - Distance metric learning： http://www.cse.ohio-state.edu/~kulis/pubs/ftml_metric_learning.pdf
  - 加性核： [W5] in http://cs.nju.edu.cn/wujx/publication.htm
  - 信息论：Elements of Information Theory, 2nd edition, http://www.amazon.com/Elements-Information-Theory-Telecommunications-Processing/dp/0471062596
  - Information Theory, Inference, and Learning Algorithms, by David MacKay, http://www.inference.phy.cam.ac.uk/itila/book.html
- ✓ Random forest: http://stat-www.berkeley.edu/users/breiman/RandomForests/cc_home.htm