

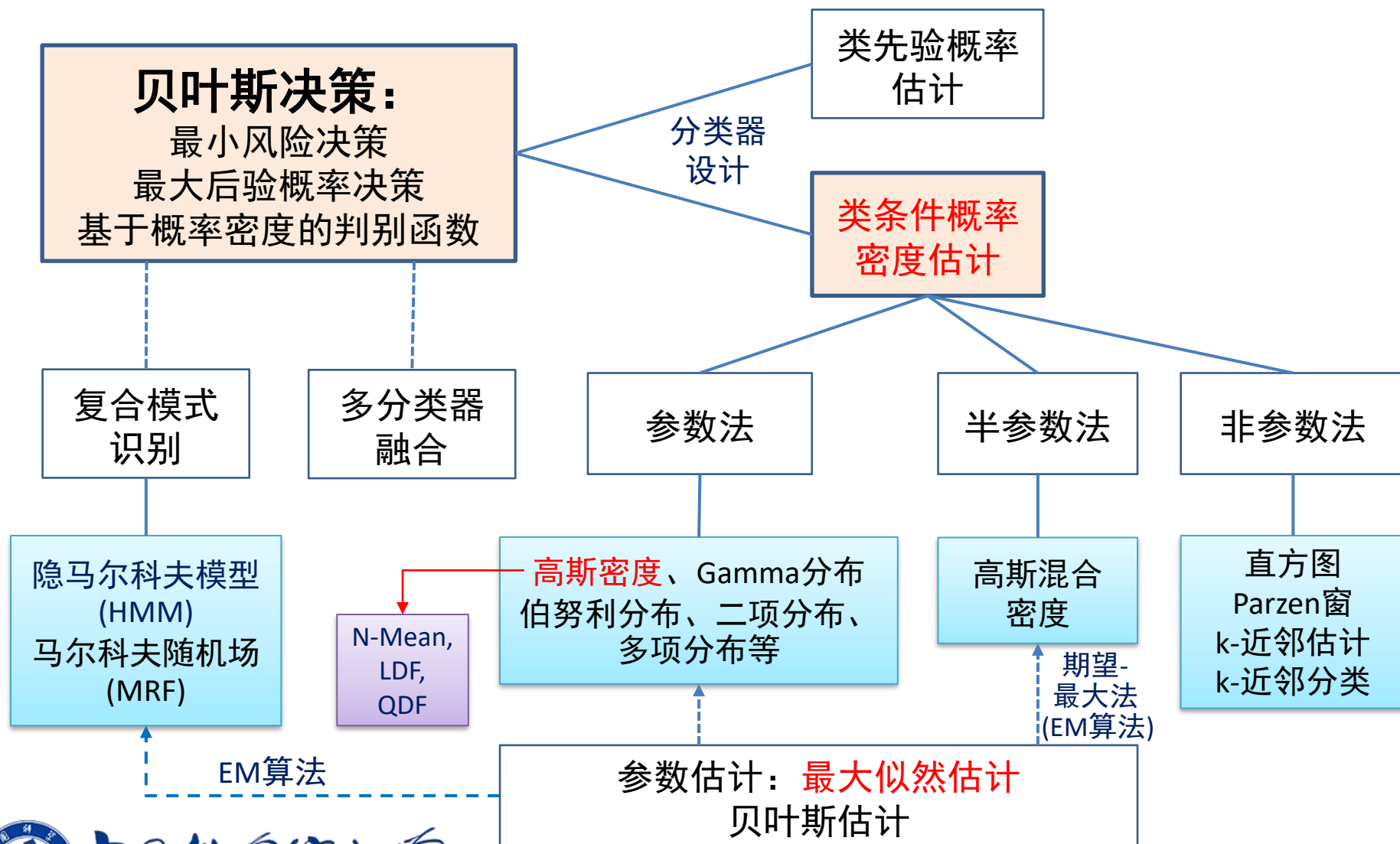
第4章：非参数方法

刘成林(liucl@nlpr.ia.ac.cn)

2022年9月28日

助教：张明亮(zhangmingliang2018@ia.ac.cn)
程 真(chengzhen2019@nlpr.ia.ac.cn)
张 姣(zhangjiao2019@ia.ac.cn)

基于贝叶斯决策的模式分类框架



上次课主要内容回顾

- 特征维数与过拟合
 - 增加特征带来更多判别信息
 - 克服过拟合的方法?
- 期望最大法(EM)
 - 对数似然度对缺失数据的期望
 - EM for Gaussian mixture
- 隐马尔可夫模型(HMM)
 - Three basic problems
 - Viterbi Algorithm (DP)
 - Extensions

提 纲

- 第4章 非参数方法
 - 密度估计
 - Parzen窗方法
 - K近邻(k-NN)估计
 - 最近邻规则
 - 扩展：标签平滑性
 - 距离度量
 - Tangent Distance
 - Approximation by Series Expansion
 - 扩展：

密度估计

- 概率和密度

- 概率：特征空间中一定区域内样本的比率

$$P = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$

- 假设局部区域（体积为 V ，样本数 k ）内等概率密度

$$\int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \simeq p(\mathbf{x})V \quad p(\mathbf{x}) \simeq \frac{k/n}{V}$$

- 如何决定局部区域的大小：随样本数 n 变化

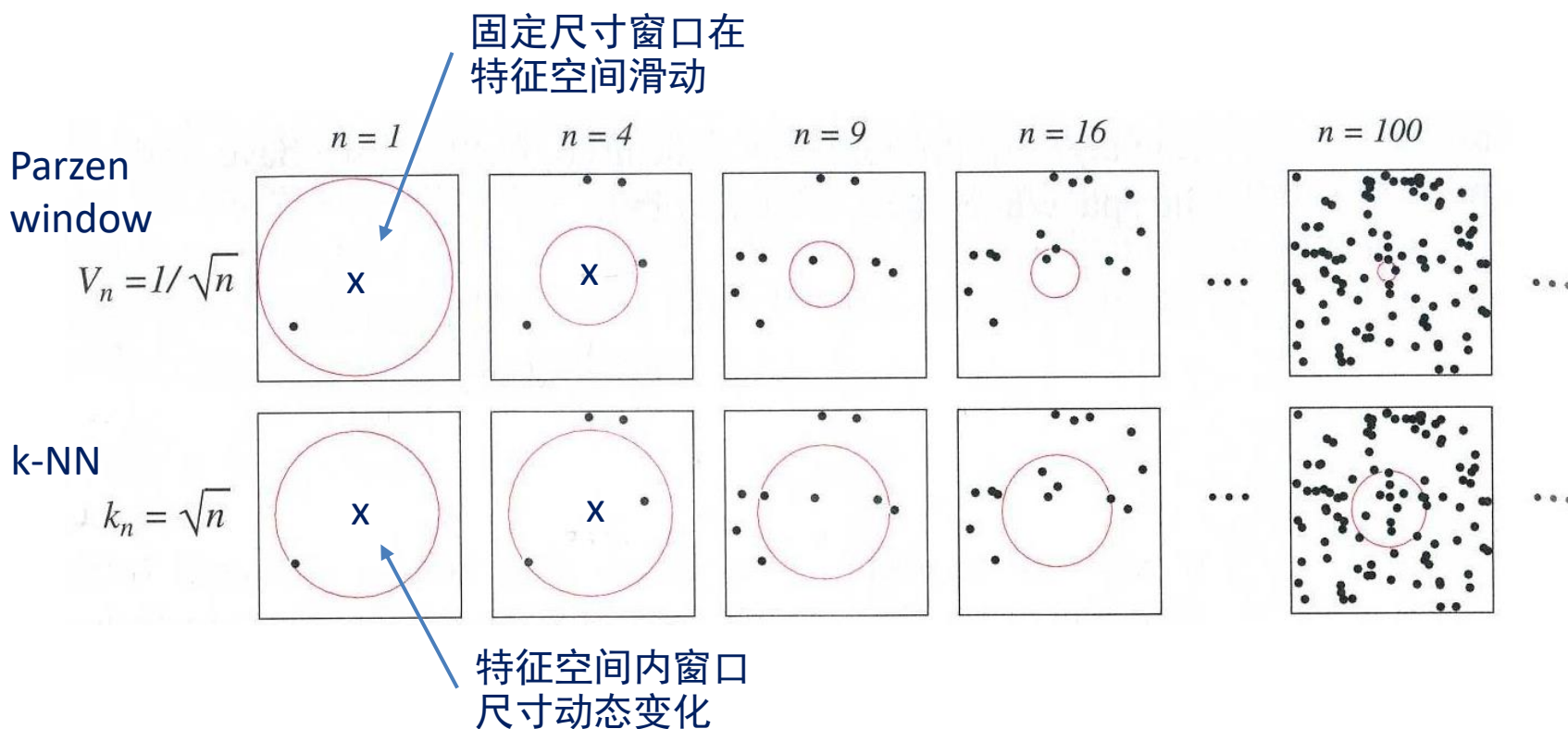
- $p_n(\mathbf{x})$ 收敛到 $p(\mathbf{x})$ 的条件 $\lim_{n \rightarrow \infty} V_n = 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} k_n = \infty$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} k_n/n = 0$$

• 非参数概率密度估计

- Parzen window: 固定局部区域体积 V , k 变化
- k-nearest neighbor: 固定局部样本数 k , V 变化



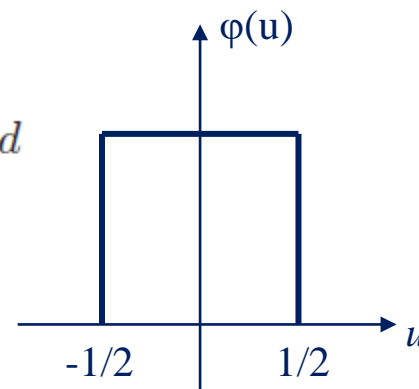
Parzen Window

- 窗函数： hypercube

$$\varphi(\mathbf{u}) = \begin{cases} 1 & |u_j| \leq 1/2 \quad j = 1, \dots, d \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- 满足条件

$$\varphi(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \int \varphi(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = 1$$



- 以x为中心、体积为 $V_n = h_n^d$ 的局部区域内样本数

$$k_n = \sum_{i=1}^n \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right)$$

- 概率密度估计 k_n/nV_n

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{V_n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right)$$

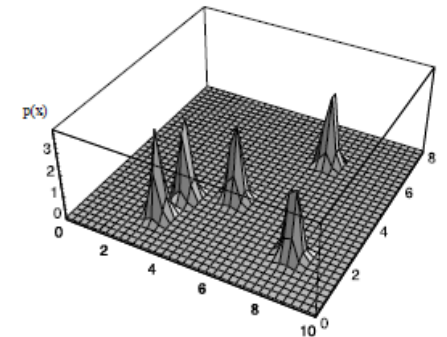
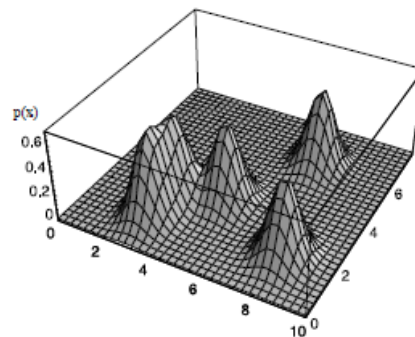
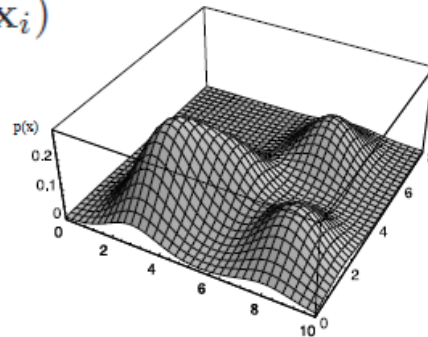
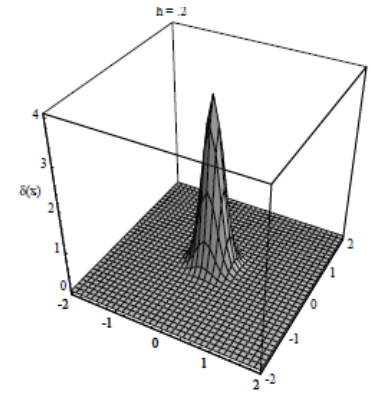
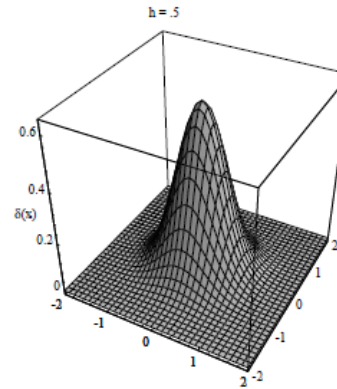
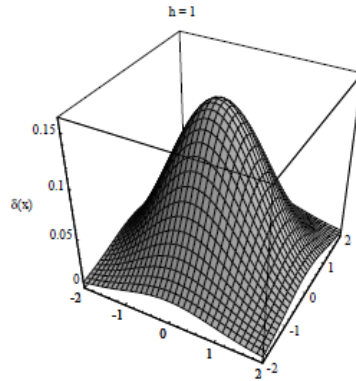
- 推广：满足密度函数要求的窗函数，如高斯函数

$$\varphi(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \int \varphi(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = 1$$

Gaussian window, variable width ($h=1, 0.5, 0.2$)

$$\delta_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x}}{h_n}\right)$$

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$



Large h : low variability, under fitting
Small h : high variability, overfitting

- Parzen窗密度估计的收敛性

- $p_n(\mathbf{x})$ 的期望是 $p(\mathbf{x})$ 的平滑（卷积）

- Samples $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ are i.i.d (independently and identically distributed) from $p(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned}\bar{p}_n(\mathbf{x}) &= \mathcal{E}[p_n(\mathbf{x})] \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{E} \left[\frac{1}{V_n} \varphi \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n} \right) \right] \\ &= \int \frac{1}{V_n} \varphi \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{v}}{h_n} \right) p(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \\ &= \int \delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{v}) p(\mathbf{v}) d\mathbf{v}.\end{aligned}$$

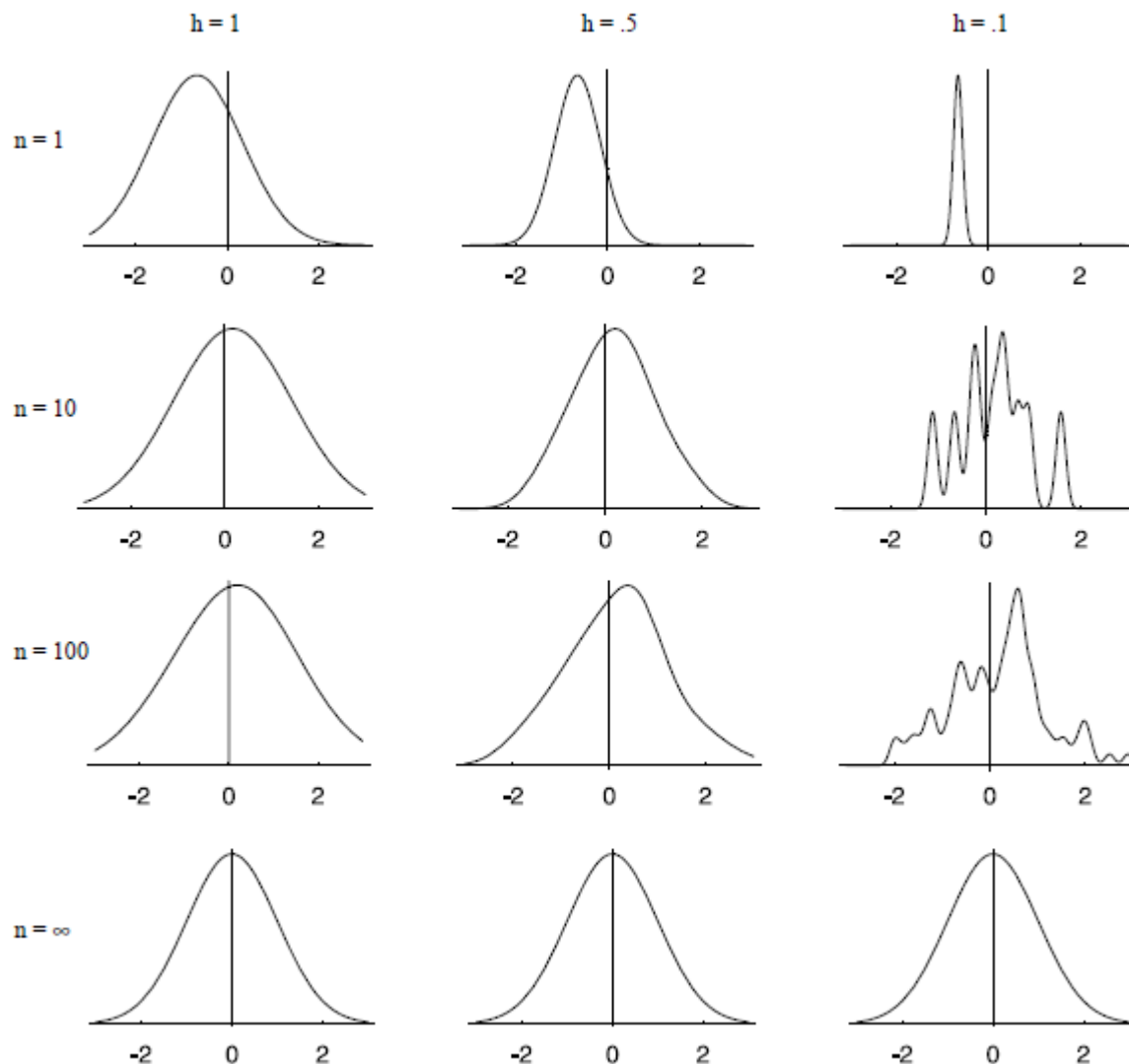
对 \mathbf{x}_i 求期望。
 \mathbf{x}_i 为独立同分布，
因此不同 \mathbf{x}_i 的期望
相同。

$$\text{When } n \rightarrow \infty \quad \lim_{n \rightarrow \infty} V_n = 0 \quad \lim_{n \rightarrow \infty} nV_n = \infty$$

$$\bar{p}_n(\mathbf{x}) \rightarrow p(\mathbf{x})$$

- 示例：高斯窗函数 $\varphi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2}$

$$p_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{h_n} \varphi\left(\frac{x - x_i}{h_n}\right) \quad \underline{h_n = h_1 / \sqrt{n}}$$



True $p(x)$:
Gaussian

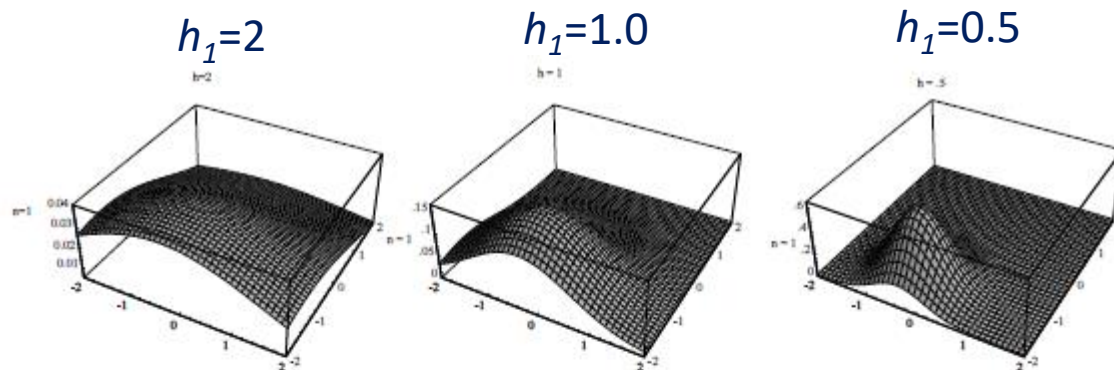


中国科学

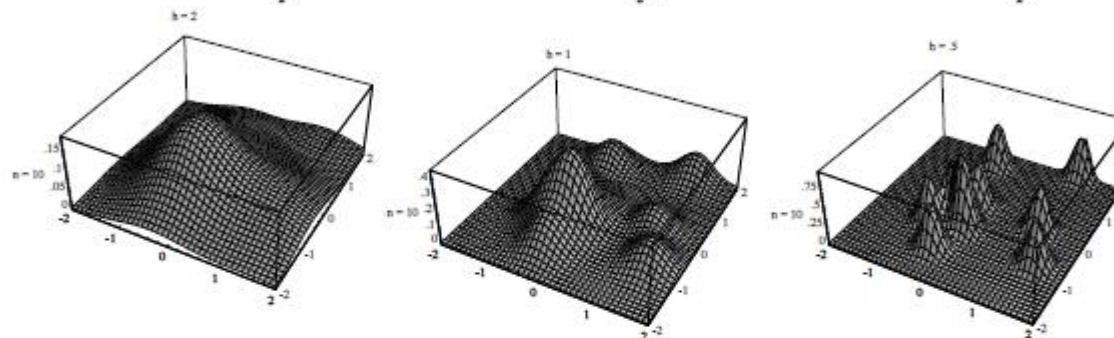
University of Chinese Academy of Sciences

2D case

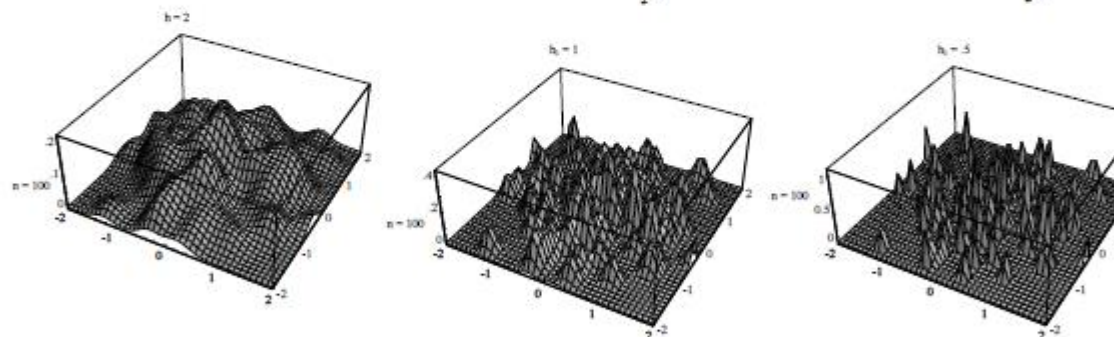
$n=1$



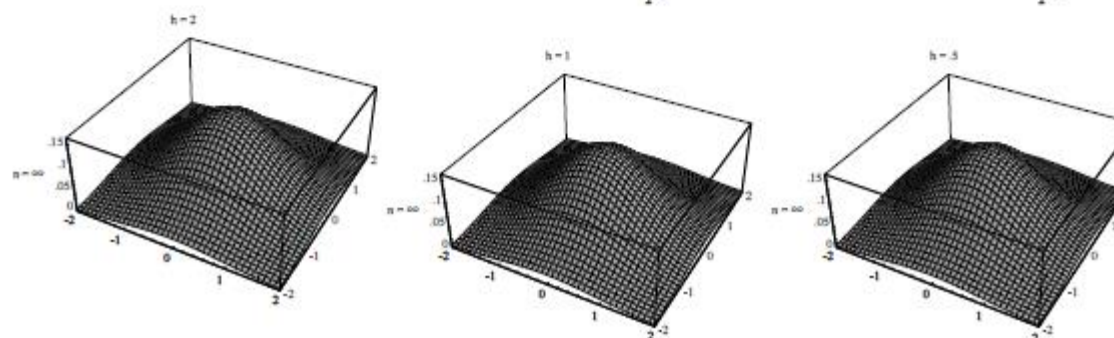
$n=10$



$n=100$

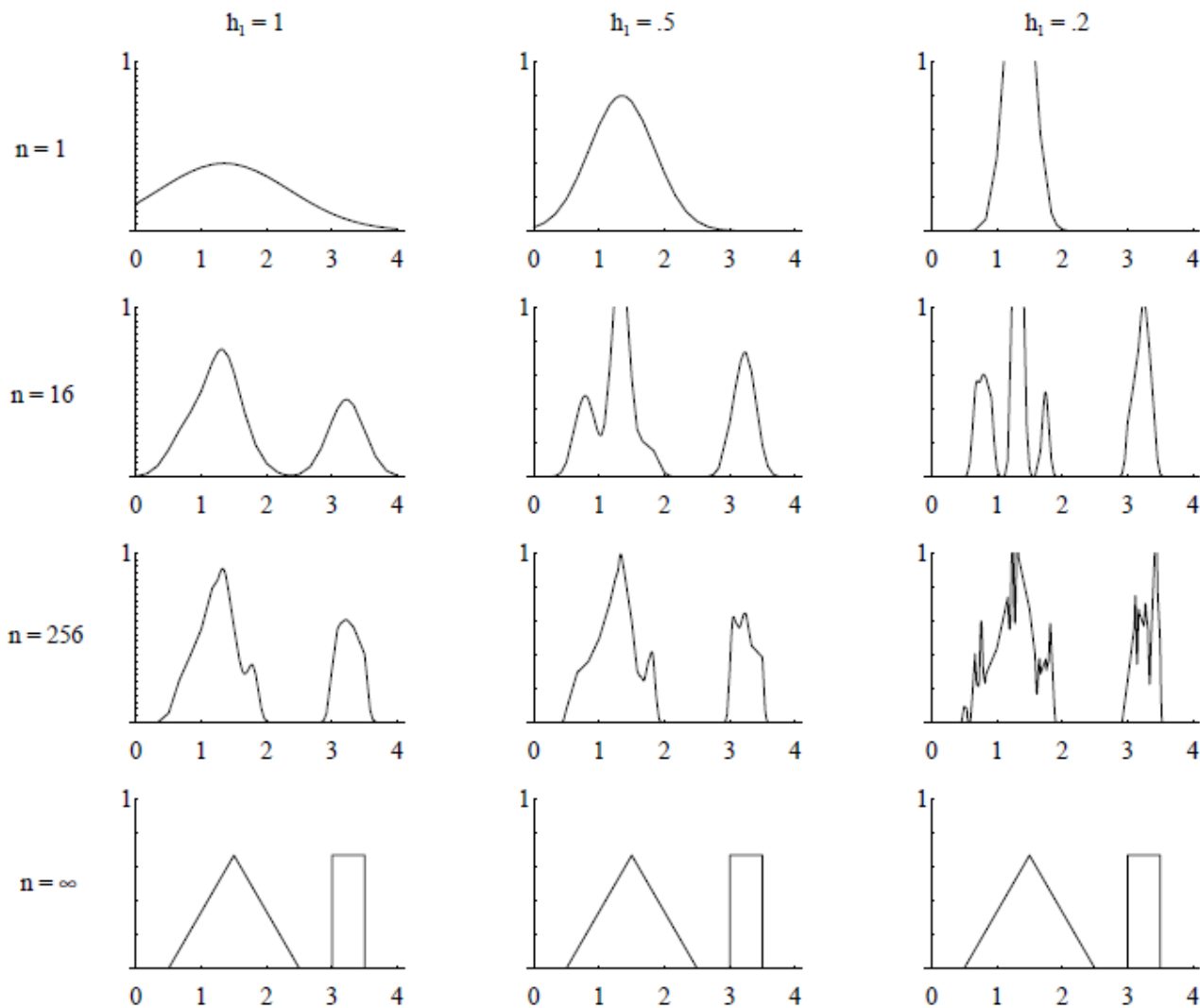


$n=\infty$



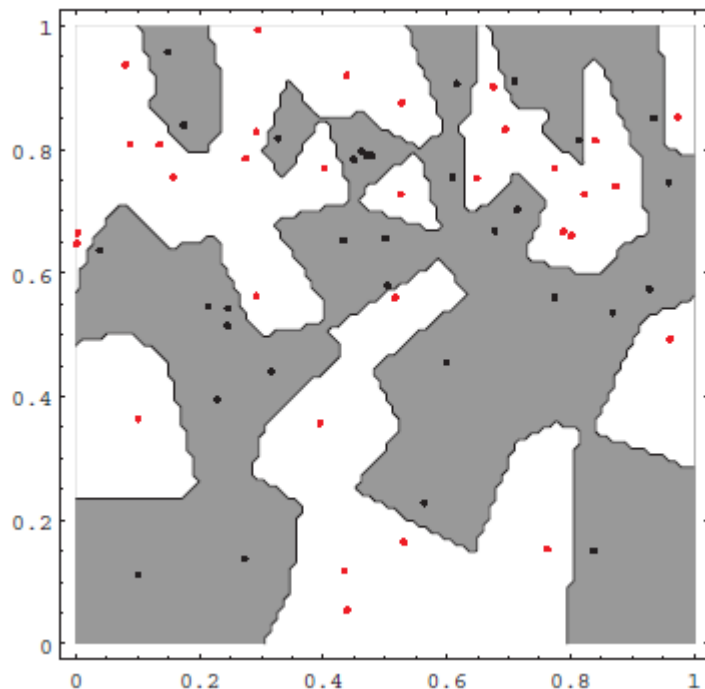
True $p(x)$:
Gaussian

- Bimodal distribution

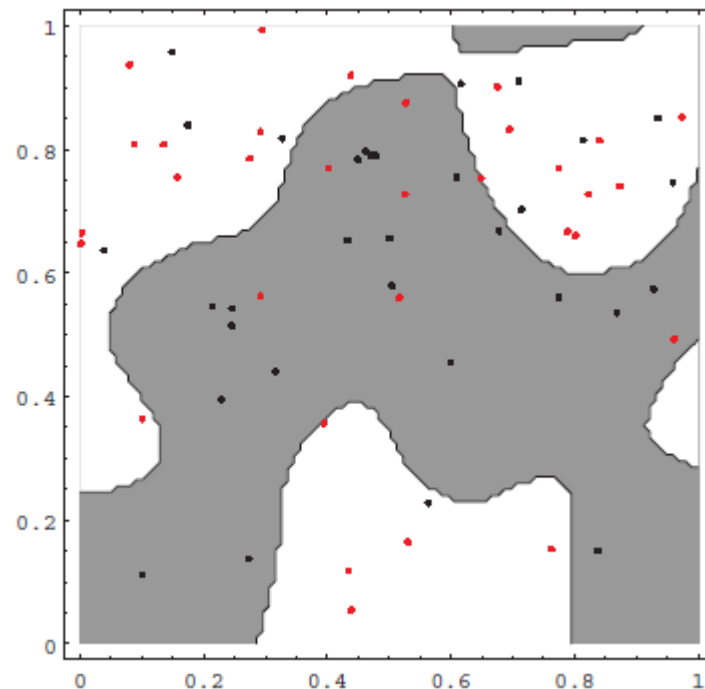


- 分类的例子 $\max_i p(\mathbf{x} | \omega_i) P(\omega_i)$

Small h



Large h



Decision
regions

小的窗口带来过拟合，大的窗口欠拟合。
上部和下部密度区别大，适合不同的 h 值
(考虑Generalization)

- 窗宽 h_n 选择经验

- 一般原则： n 越大或密度越大， h_n 越小

- 随 n 变化： $V_n = V_1/\sqrt{n}$

- 随 x 变化： $h(\mathbf{x}), h(\mathbf{x}_i)$

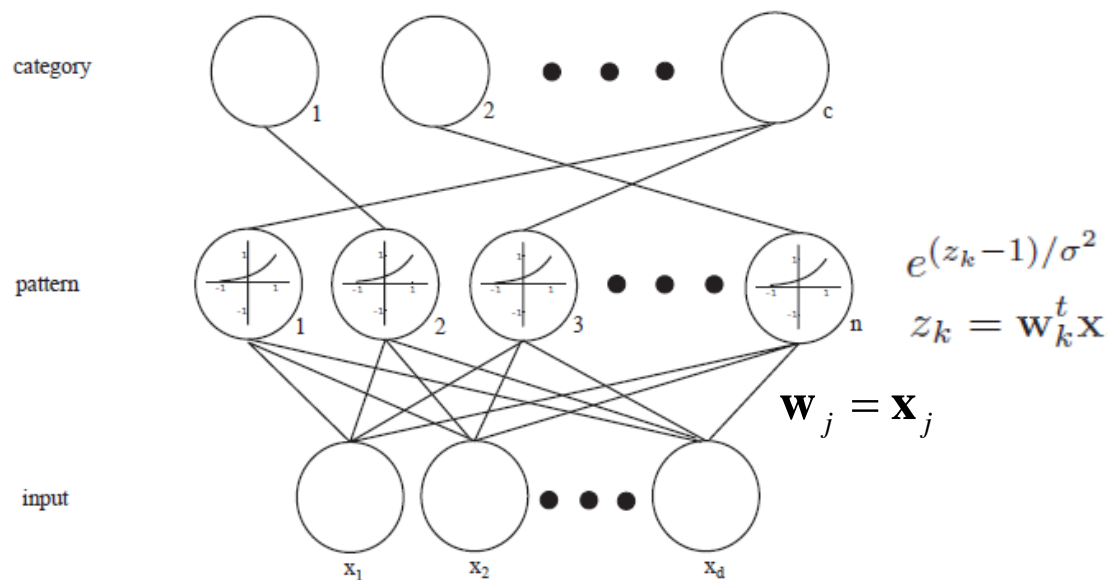
- \mathbf{x} 测试样本， \mathbf{x}_i 训练样本

- 比如：根据k-NN的距离估计局部密度， h 与局部密度成反比

- 交叉验证(cross validation)

- 比如选择 V_1 ：设多个候选值，对每个值的效果进行交叉验证

- Probabilistic Neural Network (PNN)
 - 输出每个类别的概率密度
 - 隐节点: pattern unit, 对应Parzen窗函数
 - Normalized pattern: $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|$



Why $e^{(z_k-1)/\sigma^2}$

$$\varphi\left(\frac{\mathbf{X}_k - \mathbf{W}_k}{h_n}\right) \propto \overbrace{e^{-(\mathbf{x} - \mathbf{w}_k)^t(\mathbf{x} - \mathbf{w}_k)/2\sigma^2}}^{\text{desired Gaussian}}$$

$$= e^{-(\mathbf{x}^t\mathbf{x} + \mathbf{w}_k^t\mathbf{w}_k - 2\mathbf{x}^t\mathbf{w}_k)/2\sigma^2} = e^{(z_k-1)/\sigma^2}$$



K近邻(k-NN)估计

- 概率密度估计

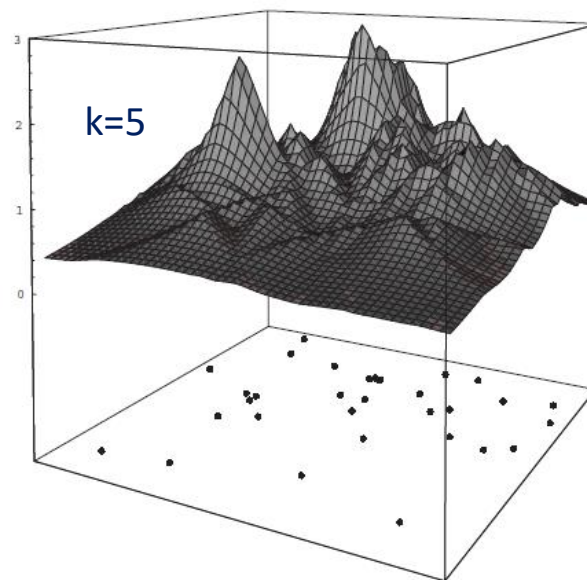
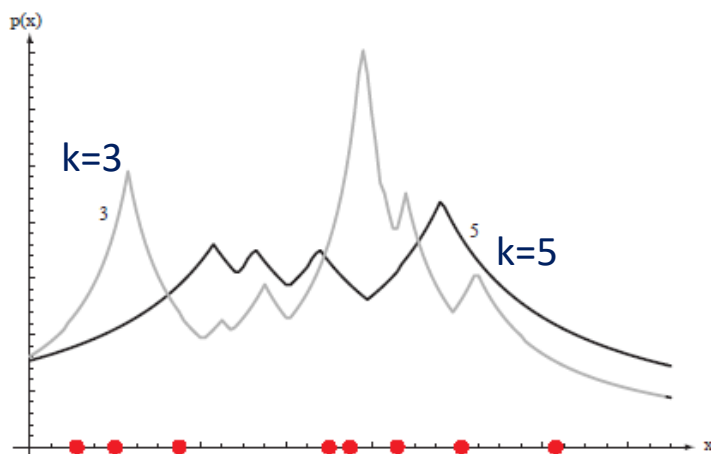
- 固定局部区域样本数 k , 体积 V 变化

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{k_n/n}{V_n}$$

- 收敛到 $p(\mathbf{x})$ 条件 $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n = \infty$ and $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n/n = 0$

- 一种选择: $k_n = \sqrt{n}$

- 1D, 2D的例子

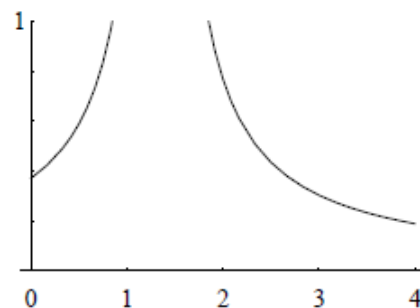
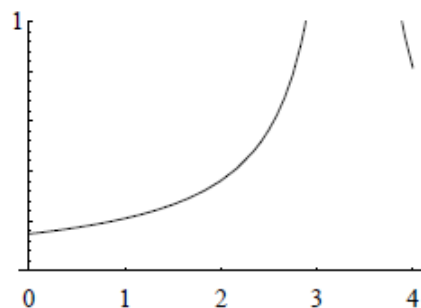


More 1D examples

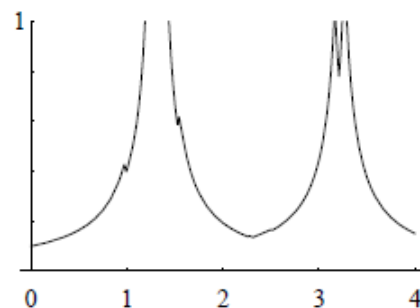
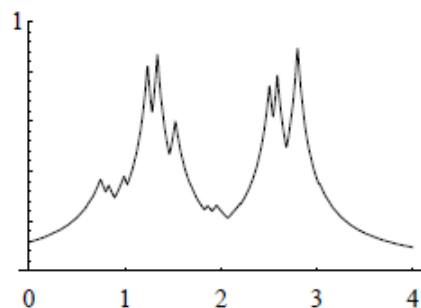
$$k_n = \sqrt{n}$$

$$p_n(x) = \frac{\sqrt{n} / n}{2 |x - x_{kNN}|}$$

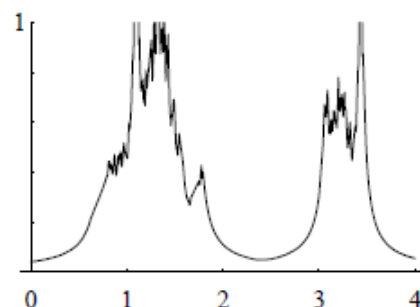
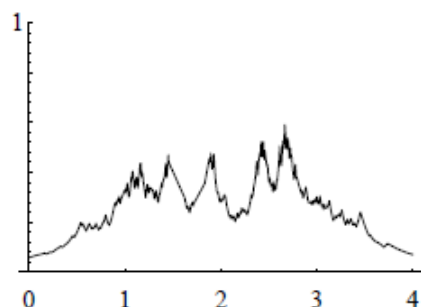
$n = 1$
 $k_n = 1$



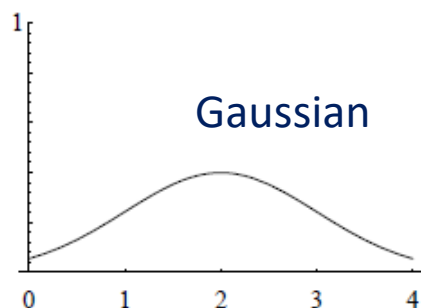
$n = 16$
 $k_n = 4$



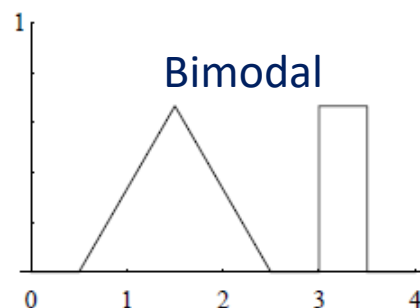
$n = 256$
 $k_n = 16$



$n = \infty$
 $k_n = \infty$



Gaussian



Bimodal

True $p(x)$



中国科学院

University of Chinese Academy of Sciences

- K-NN分类：后验概率

- k_i NNs from class i $k = \sum_{i=1}^c k_i$

从所有类别的样本中
搜索 \mathbf{x} 的 k 近邻样本

$$p_n(\mathbf{x}, \omega_i) = \frac{k_i/n}{V}$$

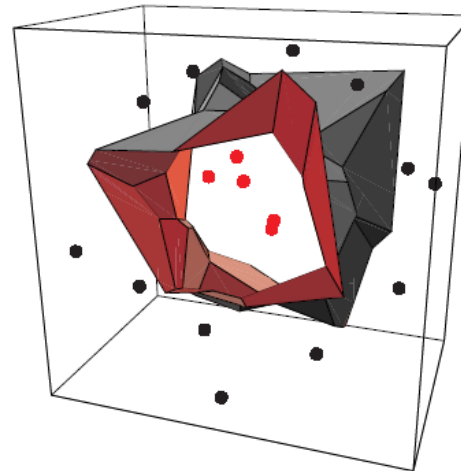
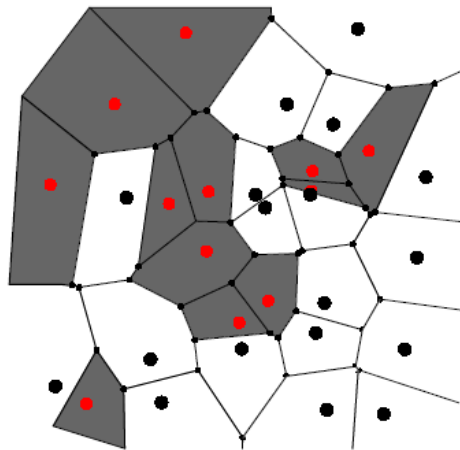
$$P_n(\omega_i|\mathbf{x}) = \frac{p_n(\mathbf{x}, \omega_i)}{\sum_{j=1}^c p_n(\mathbf{x}, \omega_j)} = \frac{k_i}{k}$$

- 分类错误率：当 $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n = \infty$ and $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n/n = 0$
趋近贝叶斯错误率

K-NN分类规则里没有概率密度，但要注意，该规则是从非参数概率密度估计和贝叶斯决策过来的

最近邻规则

- Nearest Neighbor (1-NN) Rule
 - Among labeled data $\mathcal{D}^n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ \mathbf{x}' is the NN of \mathbf{x}
 - Assume $P(\omega|\mathbf{x}') \simeq P(\omega_i|\mathbf{x})$
 - Classification: MAP
$$\omega_m = \arg \max_i P(\omega_i | \mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x}')$$
 - Decision regions: Voronoi tessellation



• 最近邻规则的错误率

$$P(e) = \int P(e|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$P(e|\mathbf{x}) = \int \underline{P(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}')}p(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) d\mathbf{x}' \quad \mathbf{x}': \text{NN of } \mathbf{x}$$

- 当 $n \rightarrow \infty$, $p(\mathbf{x}'|\mathbf{x})$ (\mathbf{x}' 为 \mathbf{x} 的最近邻的概率)趋近以 \mathbf{x} 为中心的delta函数
- 对 $P(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, 假设 \mathbf{x} 和 \mathbf{x}'_j (最近训练样本, 与 \mathbf{x} 独立)的类别标号分别为 θ 和 θ'_j

$$P(\theta, \theta'_j|\mathbf{x}, \mathbf{x}'_j) = P(\theta|\mathbf{x})P(\theta'_j|\mathbf{x}'_j)$$

$$P_n(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}'_j) = 1 - \sum_{i=1}^c P(\theta = \omega_i, \theta' = \omega_i|\mathbf{x}, \mathbf{x}'_j) = 1 - \sum_{i=1}^c P(\omega_i|\mathbf{x})P(\omega_i|\mathbf{x}'_j)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n(e|\mathbf{x}) = \int \left[1 - \sum_{i=1}^c P(\omega_i|\mathbf{x})P(\omega_i|\mathbf{x}') \right] \underline{\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})} d\mathbf{x}' = 1 - \sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x})$$

- 最近邻规则的错误率

- Asymptotic error rate $\lim_{n \rightarrow \infty} P_n(e|\mathbf{x}) = 1 - \sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x})$

$$\begin{aligned}
 P &= \lim_{n \rightarrow \infty} P_n(e) \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int P_n(e|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\
 &= \int \left[1 - \sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \right] p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}
 \end{aligned}$$

- Error bound of 1-NN rule

$$\sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) = P^2(\omega_m|\mathbf{x}) + \sum_{i \neq m} P^2(\omega_i|\mathbf{x})$$

Minimized when P_i ($i \neq m$) are equal

$$P(\omega_i|\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{P^*(e|\mathbf{x})}{c-1} & i \neq m \\ 1 - P^*(e|\mathbf{x}) & i = m \end{cases}$$

$P^*(e|\mathbf{x}) = 1 - P(\omega_m|\mathbf{x})$
(Bayes error)

$$\sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \geq (1 - P^*(e|\mathbf{x}))^2 + \frac{P^{*2}(e|\mathbf{x})}{c-1}$$

- Error bound of 1-NN rule

$$\sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \geq (1 - P^*(e|\mathbf{x}))^2 + \frac{P^{*2}(e|\mathbf{x})}{c-1}$$

$$1 - \sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \leq 2P^*(e|\mathbf{x}) - \frac{c}{c-1}P^{*2}(e|\mathbf{x})$$

- Error rate

$$P = \int \left[1 - \sum_{i=1}^c P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \right] p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \rightarrow P \leq 2P^*$$

$$\begin{aligned} \text{Var}[P^*(e|\mathbf{x})] &= \int [P^*(e|\mathbf{x}) - P^*]^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int P^{*2}(e|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - P^{*2} \geq 0 \rightarrow \int P^{*2}(e|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \geq P^{*2} \end{aligned}$$

- Error bound

$$P^* \leq P \leq P^* \left(2 - \frac{c}{c-1} P^* \right)$$

证明这个bound比较费劲，一般来说记住结论即可。
证明过程中有些思想很有启发，比如 $P(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 假设

扩展：半监督学习中的标签平滑性

- 半监督学习

- Inductive learning

- 由训练样本得到分类器模型

- Transductive learning

- 标记样本+无标记样本一起分析，直接得到无标记样本的类别

- Gaussian random field

- 假设临近样本类别标号相似

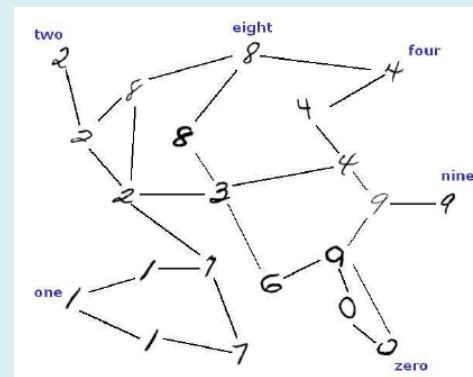
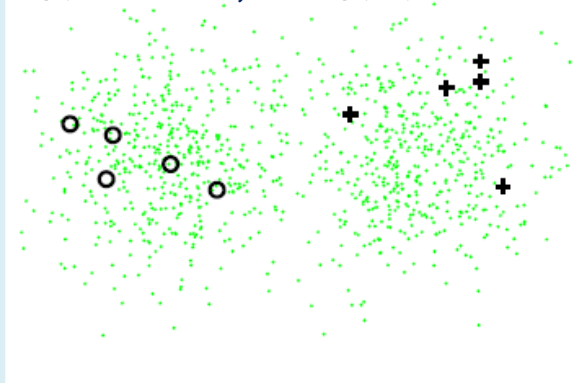
- 标记样本最小化分类损失，无标记样本最小化临近样本之间标号差异

$$\min \sum_{i \in L} (f_i - y_i)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} (f_i - f_j)^2$$

$$= \sum_{i \in L} (f_i - y_i)^2 + \mathbf{f}^T \Delta \mathbf{f}$$

(Laplacian $\Delta = I - D$)

部分有标记，大部分无标记



Break

K近邻的快速计算

- 分类的计算复杂度 $O(dn)$
- 近邻搜索的三种策略
 - Partial distance
 - Prestructuring
 - Editing (pruning, condensing)

Partial square distance ($r < d$)

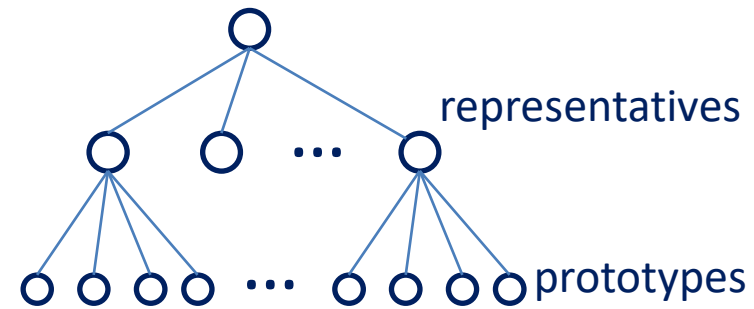
$$D_r^2(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^r (a_i - b_i)^2$$

Full distance to the current closest prototype $D^2(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

Terminate computing if the partial square distance is greater than $D^2(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

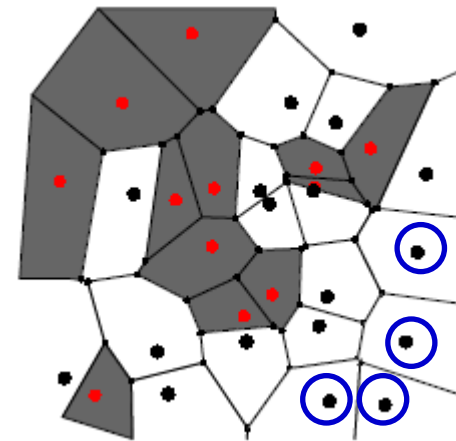
– Prestructuring

- Search tree, prototypes are linked to the nodes, each labeled with a representative prototype
 - E.g. Constructed by clustering
- 1-NN搜索：先找出到 x 的最近代表点，然后计算与最近代表点连接原型的距离，找出最近原型
- 可结合partial distance
- 为保证找到最近原型，应从多个代表点的原型中搜索



– Editing

- Remove prototypes that are surrounded by samples (Voronoi neighbors) of same class



有更多近邻搜索的快速算法，如branch-and-bound, k-d tree等（在此省略）

距离度量

- 距离度量(metric)的性质

non-negativity: $D(a, b) \geq 0$

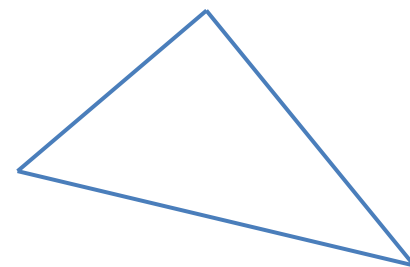
reflexivity: $D(a, b) = 0$ if and only if $a = b$

symmetry: $D(a, b) = D(b, a)$

triangle inequality: $D(a, b) + D(b, c) \geq D(a, c)$

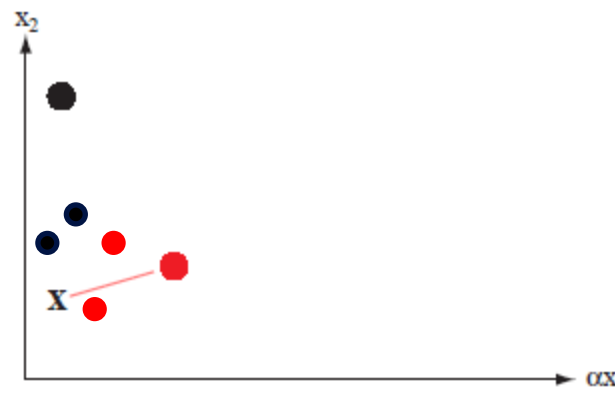
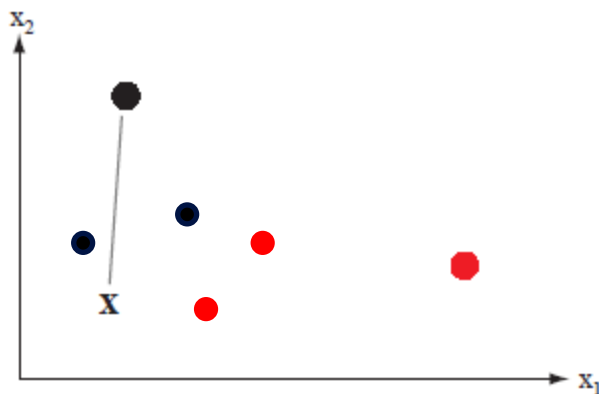
- Metric影响分类性能

– 比如, 当特征变尺度



Euclidean metric

$$D(a, b) = \left(\sum_{k=1}^d (a_k - b_k)^2 \right)^{1/2}$$



- 几种Metric

- Minkowski (L_k norm)

$$L_k(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \left(\sum_{i=1}^d |a_i - b_i|^k \right)^{1/k}$$

- Manhattan (city block distance): $k=1$
- Tanimoto metric (for binary features)

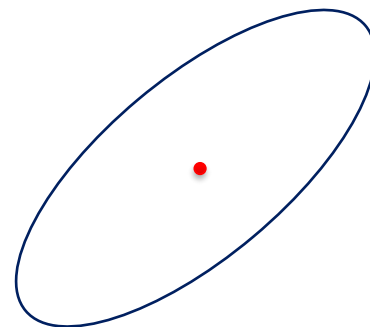
$$D_{Tanimoto}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2) = \frac{n_1 + n_2 - 2n_{12}}{n_1 + n_2 - n_{12}}$$

- Metric Learning

- Parameters in metric optimized in learning (e.g., empirical risk minimization)

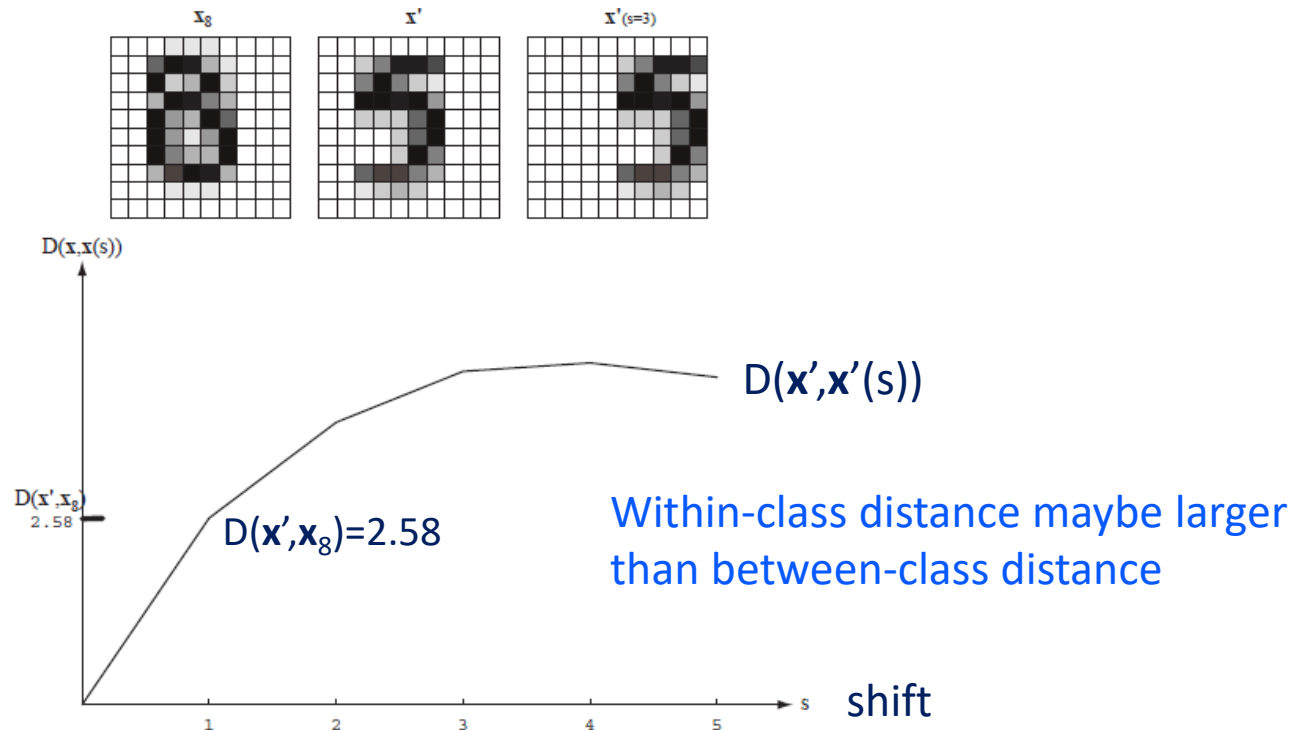
$$D_{\mathbf{w}}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^d w_i (a_i - b_i)^2$$

$$D_{\Sigma}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a} - \mathbf{b})^t \Sigma^{-1} (\mathbf{a} - \mathbf{b})$$



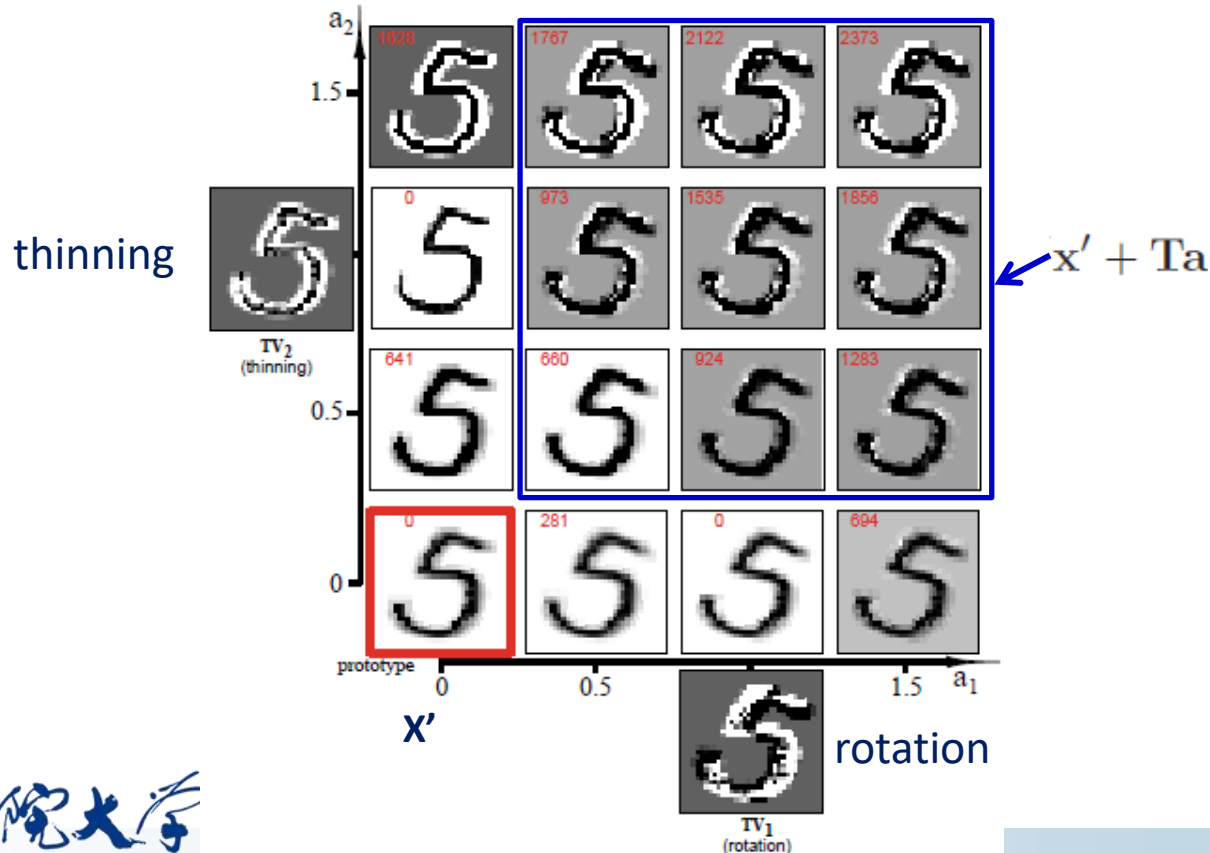
Tangent Distance

- Image Shape Transformation
 - Shift (translation), rotation, scaling, distortion
 - Distance sensitive to transformation



Tangent distance

- Search for optimal parameters for a combination of transformations for a prototype to minimize the distance to test sample
- Parameterized transformation: $\mathcal{F}_i(\mathbf{x}'; \alpha_i)$ 这个参数化变换是一种人为定义的变形方式(如旋转)
- Tangent vectors: $\mathbf{TV}_i = \mathcal{F}_i(\mathbf{x}'; \alpha_i) - \mathbf{x}'$ 近似梯度方向, 可看作变形空间的基矢量
- Linear combination in the space spanned by TVs: $\mathbf{x}' + \mathbf{T}\mathbf{a}$



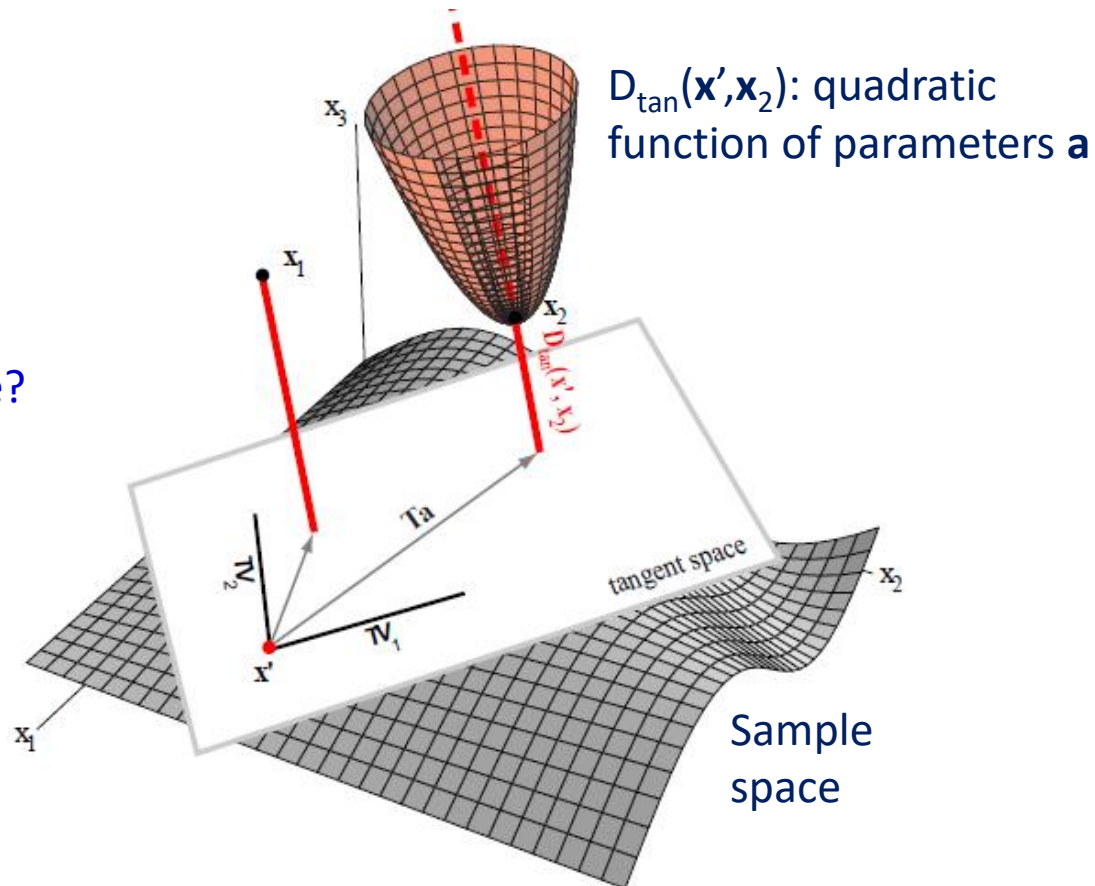
- Tangent distance

- Euclidean distance to tangent space

$$D_{tan}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \min_{\mathbf{a}} [\|(\mathbf{x}' + \mathbf{T}\mathbf{a}) - \mathbf{x}\|] \quad \text{点到超平面的最近距离}$$

- Optimization: gradient search w.r.t \mathbf{a}

为什么叫
tangent space?



Approximation by Series Expansion

- Parzen窗密度估计：计算量大
- 窗函数用序列展开

$$\varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right) = \sum_{j=1}^m a_j \psi_j(\mathbf{x}) \chi_j(\mathbf{x}_i)$$

$$\sum_{i=1}^n \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right) = \sum_{j=1}^m a_j \psi_j(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^n \chi_j(\mathbf{x}_i)$$

$$p_n(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m b_j \psi_j(\mathbf{x}) \quad b_j = \frac{a_j}{nV_n} \sum_{i=1}^n \chi_j(\mathbf{x}_i)$$

– b_j 可离线计算， $p_n(\mathbf{x})$ 只需 m 次计算($m < n$)

- 高斯窗函数的Taylor展开

$$\sqrt{\pi} \varphi(u) = e^{-u^2} \simeq \sum_{j=0}^{m-1} (-1)^j \frac{u^{2j}}{j!} \quad (\text{以 } u^2 \text{ 为自变量})$$

$$\begin{aligned} m=2 \quad \sqrt{\pi} \varphi\left(\frac{x-x_i}{h}\right) &\simeq 1 - \left(\frac{x-x_i}{h}\right)^2 \\ &= 1 + \frac{2}{h^2} x x_i - \frac{1}{h^2} x^2 - \frac{1}{h^2} x_i^2 \end{aligned}$$

$$\sqrt{\pi} p_n(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n \sqrt{\pi} \varphi\left(\frac{x-x_i}{h}\right) \simeq b_0 + b_1 x + b_2 x^2$$

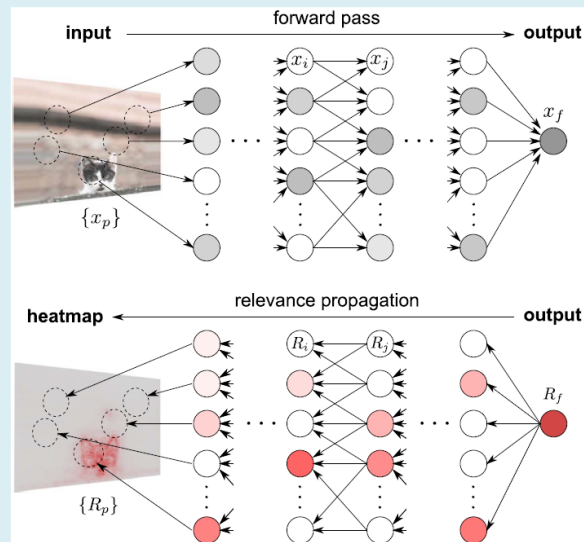
$$b_0 = \frac{1}{h} - \frac{1}{h^3} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad b_1 = \frac{2}{h^3} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad b_2 = -\frac{1}{h^3}$$

只有当 $\max|x-x_i|<h$ 时，展开的近似误差较小，然而这要求 h 比较大
当 h 较小，使用更多的展开项（ m 比较大）

这个方法实用价值不大，因为密度估计有误差，而从分类的角度，有很多分类器可以代替。但是思路值得借鉴。

扩展：泰勒展开用于神经网络解释

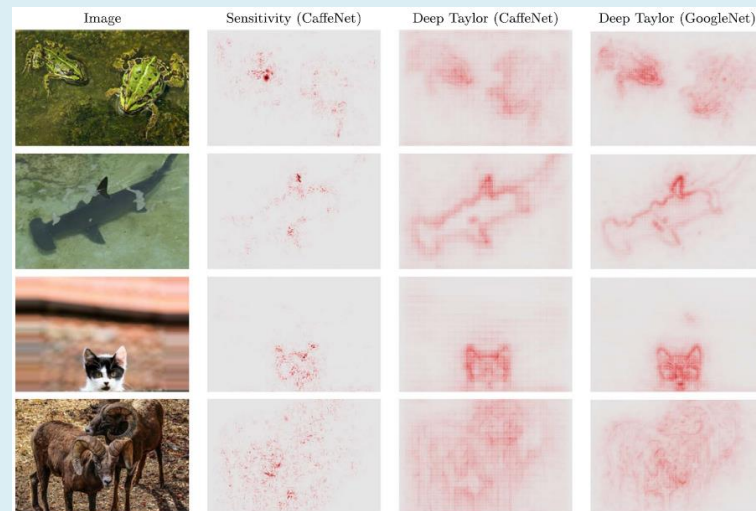
- 估计每个输入特征对模型输出值的影响程度(Heatmap $R(\mathbf{x})$)
 - Sensitivity analysis
 - 本方法
 - 将输出相关度(Relevance) R_j 分解为每个输入特征 x_i 的贡献度之和
 - x_i 的贡献度汇总为 R_i



Deep Taylor decomposition

$$R_j = \left(\frac{\partial R_j}{\partial \{x_i\}} \Big|_{\{\tilde{x}_i\}^{(j)}} \right)^T \cdot (\{x_i\} - \{\tilde{x}_i\}^{(j)}) + \varepsilon_j = \sum_i \underbrace{\frac{\partial R_j}{\partial x_i} \Big|_{\{\tilde{x}_i\}^{(j)}}}_{R_{ij}} (x_i - \tilde{x}_i^{(j)}) + \varepsilon_j$$

$$R_i = \sum_j \frac{\partial R_j}{\partial x_i} \Big|_{\{\tilde{x}_i\}^{(j)}} (x_i - \tilde{x}_i^{(j)})$$



总结

- 非参数法的基本思想
 - 没有给定概率密度函数形式
 - 基于概率和密度的原始定义，以训练样本的局部分布近似 x 的局部密度
- Parzen window
- K-nearest neighbor (k-NN)
 - 1-nearest neighbor (1-NN), Error bound
 - 快速搜索
- 距离度量
 - Tangent distance
- Series expansion

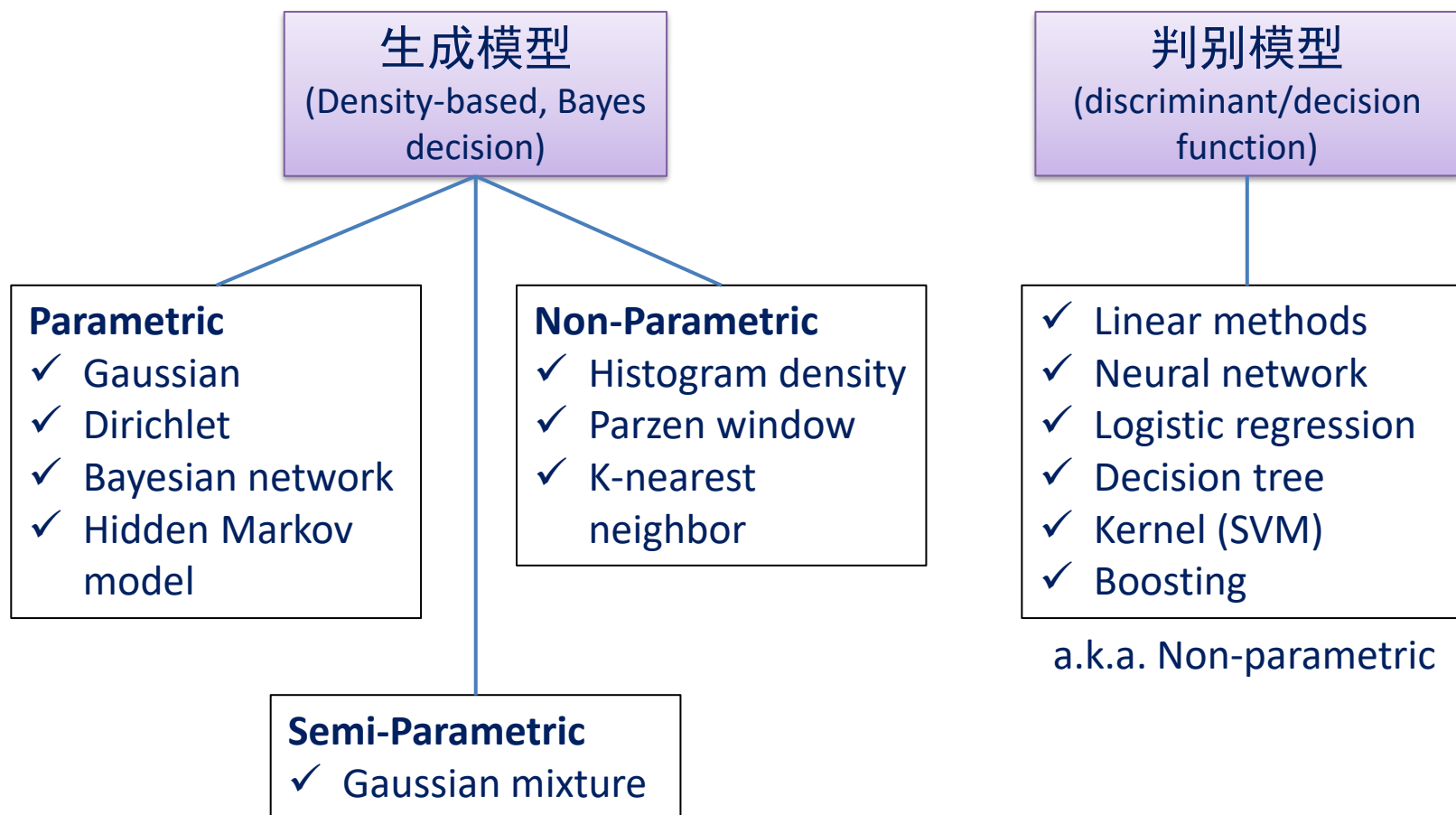
统计模式识别的作用和地位

- 贝叶斯决策
 - MAP, 最小风险决策
 - 贝叶斯分类器：理想情况（样本无穷多、概率密度准确估计）下最优
 - 各种分类器性能分析的参照
- Parametric/Non-parametric统计分类器
 - 训练样本较少时比较competitive
- 概率密度估计
 - 概率密度模型：生成模型，可用于判别outlier ($p(\mathbf{x}) < t$)
 - 信息论方法的基础，如熵、互信息等
 - K-NN: local density, local accuracy of classifier

统计模式识别的作用和地位

- 特征空间分析
 - 假设空间相邻的样本类别也相同(流形假设, Manifold assumption)
 - 基于特征空间划分的分类器设计, 如tree classifier
 - 基于特征空间的分类器性能分析, 如神经网络的决策面/决策区域
- 与其他分类方法的关系
 - 判别模型(SVM, 神经网络等): 近似后验概率, 或输出可近似转换为后验概率
 - 基于距离/相似度的分类器: 可从特征空间分析
 - 结构PR问题转换为统计PR: Dissimilarity embedding

统计模式识别方法



下次课 (向世明老师)