Метод k-средних и распознавание рукописных цифр

Саша Кузнецова*

9 февраля 2016 г.

Аннотация

Задача распознавания рукописного текста — одна из классических задач машинного обучения, к решению которой применялось такое количество алгоритмов, что она успешно может быть использована в качестве учебной.

В этой заметке мы будем учиться распознавать написанные от руки цифры.

Ключевые слова: k ближайших соседей, R, машинное обучение, распознавание образов.

Мы обратимся к одному из наиболее известных хранилищ, в котором собраны обработанные изображения цифр, разберём, как эти данные оттуда извлекать, а затем применим к ним алгоритм k ближайших соседей, используя R.

1 База данных MNIST

Источником данных нам послужит база «MNIST» (LeCun, Cortes, Burges, 2011), http://yann.lecun.com/exdb/mnist/, в которой хранятся 70 000 изображений цифр, написанных несколькими сотнями разных людей. Каждая картинка в этой базе обработана так, чтобы поместиться в квадратик размером 28×28 пикселей. Каждый пиксель представлен числом от 0 до 255, где 0 соответствует белому цвету, а 255 — чёрному.

Все изображения поделены на две части: 60 000 относятся к учебной выборке, а $10\,000$ — к тестовой. По учебной выборке наш алгоритм будет настраивать свои параметры, а по тестовой мы будем оценивать качество классификации.

^{*}НИУ ВШЭ, Москва.

Такое разбиение нужно для того, чтобы убедиться, что алгоритм не переобучился, то есть не настроен исключительно на учебные примеры и способен правильно классифицировать новые для него изображения.

Каждое из изображений в нашей задаче должно быть отнесено к одному из десяти классов — это цифры от 0 до 9. Для элементов обучающей выборки известно, к какому классу они принадлежат, поэтому настройка параметров классифицирующего алгоритма относится к области обучения с учителем. Это значит, что процесс обучения использует известные ответы и стремится за счёт выбора параметров сделать предсказания алгоритма максимально близкими к правильным (кстати, таким образом мы обучали все наши алгоритмы в курсе эконометрики).

Как говорится, «наивные студенты думали, что .csv-файлы на деревьях, как булки, растут», но всё оказалось совсем не так. Для того чтобы прочитать IDX-файл, в котором хранятся данные с изображениями цифр в базе «MNIST», мне потребовались Google и кандидат физико-математических наук. Проблема заключается в том, что данные хранятся в этой базе в бинарном виде, и их не открыть в привычных нам приложениях. Вот как это можно сделать в R.

(1) Скачав данные с сайта, открываем файл с учебной выборкой на чтение командой file:

```
to.read <- file("train-images.idx3-ubyte", "rb")</pre>
```

(2) Данные устроены таким образом, что в самом начале мы читаем заголовок из четырёх чисел. Эти первые четыре числа содержат информацию о размерах выборки, упомянутых выше. Считываем их из полученного объекта to.read с помощью функции для чтения бинарных данных readBin.

```
readBin(to.read, integer(), n = 4, endian="big")
## [1] 2051 60000 28 28
```

(3) Далее для каждой картинки следуют 28×28 байт, содержащие информацию о цвете каждого пикселя (числа от 0 до 255) и записанные из изображения построчно. Получаем большой массив TRAIN из $60\,000$ таблиц размером 28×28 : берём первые 28 чисел и кладём их в первый столбец первой таблицы, продолжаем, пока не дойдём до 28-го столбца, затем приступаем к следующей таблице — и так до конца.

Нужно обратить внимание, что изначально данные были разложены в строку, но мы только что разложили их по столбцам, для того чтобы позже было удобнее выводить рисунок.

(4) Перед тем как начинать работать с данными и оценивать по ним какие-либо модели, обычно бывает полезно взглянуть на них и построить описательные статистики. В данном случае для этой цели может послужить сама картинка.

```
layout(matrix(c(1:36), 6, 6, byrow = TRUE),
    widths = lcm(rep(2.5,36)), heights = lcm(rep(2.5,36)))
par(mar=c(0,0,0,0))

for(i in 1:36)
    {
    image(TRAIN[,28:1,i])
    }
```

Нарисуем цифры по первым 36 таблицам из массива TRAIN. Нужно обратить внимание, что, нарисуй мы сейчас всё как есть, мы бы получили перевёрнутые цифры (это можно проверить), потому что функция image будет соотносить первый столбец с нулевой ординатой на картинке, но мы помним, что первый столбец соответствовал верхней строке рисунка. Для того чтобы избежать этой проблемы, будем рисовать столбцы в обратном порядке, от 28-го к 1-му: TRAIN[,28:1,].

(5) Описанную выше процедуру повторяем, чтобы считать метки классов для учебной выборки. Заголовок в данном случае состоит из двух чисел, а данные должны восприниматься R'ом не как числа, а как категории: этого можно добиться с помощью команды as.factor.

Итак, на данном этапе мы являемся обладателями учебной выборки (но умеем читать и многое другое) и великолепной картинки, что означает, что пора бы с ними что-нибудь да сделать.

2 Алгоритм k ближайших соседей

Одним из простейших алгоритмов классификации является метод k ближайших соседей (k Nearest Neighbours, kNN). Основной идеей данного алгоритма является то, что объект, как правило, находится в окружении объектов своего же класса. Таким образом, чтобы классифицировать новый объект, мы должны посмотреть на k ближайших к нему объектов из учебной выборки и отнести его к тому классу, который среди них чаще встретился.

Первый вопрос, который перед нами встаёт, — это выбор функции расстояния между объектами выборки. В простом случае, когда объекты представлены в виде числовых векторов, пользуются простой евклидовой метрикой, то

есть
$$\rho(a,b) = \sqrt{\sum_{k=1}^{m} (a_k - b_k)^2}$$
.

Второй проблемой является выбор значения k: сколько объектов нам нужно посмотреть, чтобы наиболее точно классифицировать наш? Единого правила для того, чтобы выбрать k, не существует, однако нужно учитывать, что при слишком маленьких k алгоритм будет неустойчивым, а при слишком больших начнёт подстраиваться к шуму и терять обобщающую способность. Конкретное значение k можно определить опытным путём: попробовать диапазон значений и посмотреть, какое подходит лучше.

2.1 Существующие реализации

Для реализации алгоритма k ближайших соседей в R есть как минимум три пакета: kknn, FNN и RWeka, причём в двух последних есть ещё и готовые базы данных.

Пакет **kknn** реализует алгоритм kNN с весами, где голоса «соседей» не равнозначны, а входят в общую сумму с определёнными весами. Мы его реализовывать не будем.

Bоспользуемся функцией install.packages(c("FNN", "RWeka")), чтобы загрузить пакеты.

2.2 Пакет FNN

Воспользуемся теперь пакетом **FNN** (Beygelzimer [и др.], 2013), предварительно проделав с данными для тестовой выборки то же, что и с учебными, в итоге получив два больших массива, TRAIN и TEST, а также два вектора ответов, Trainlabels и Testlabels.

Функция knn пакета FNN в качестве аргументов принимает матрицы учебных и тестовых данных, а также вектор ответов для тренировочной выборки, а на выходе отдаёт предсказанную классификацию для тестовой выборки. Эта функция сразу и обучается, и предсказывает — очень удобно.

Сейчас наши данные выглядят не так, как нужно этой функции, поэтому преобразуем их в матрицу, содержащую значения цвета всех пикселей, размещённых в одну строку для каждой картинки. Воспользуемся функцией as.vector, которая будет по очереди брать столбцы из матрицы и выкладывать их в одну строку. Кроме того, для примера мы будем использовать только первую тысячу наблюдений из учебной выборки и пятьсот из тестовой. Если читатель желает получить более точный классификатор, то в этом месте следует использовать все 60 000 и 10 000 соответственно.

```
n <- 1000
train = matrix(data = NA, nrow = n, ncol = 28*28 )

for (i in 1:n)
  {
  train[i,] <- as.vector(TRAIN[,,i])
  }
  train_labels <- Train_labels[1:n]</pre>
```

Теперь воспользуемся функцией knn, чтобы классифицировать объекты тестовой выборки, и запишем результаты в вектор results. Возьмём, например, k=10. Преимуществом функции является высокая скорость подсчёта предсказаний.

Посмотрим на долю ошибок, которые мы допустили при классификации. Она достаточно высока, но это можно объяснить тем, что мы использовали слишком маленькое для такого алгоритма число наблюдений.

```
errors <- (sum(results != test_labels))/m
errors
## [1] 0.2</pre>
```

2.3 Пакет RWeka

Пакет **RWeka** (Hornik, Buchta, Zeileis, 2009) позволяет использовать из R все возможности среды для машинного обучения Weka. Среда Weka, http:

//www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka, содержит целый набор алгоритмов машинного обучения, среди которых есть и нужный нам. В Weka замечательно то, что алгоритм сам подбирает оптимальное в нашем случае значение k из заданного диапазона, а потом оценивает полученный классификатор с помощью пятикратной кросс-валидации. Это значит, что он поделит выборку на пять кусочков и по очереди будет использовать их в качестве тестовых, чтобы надёжнее оценить классификацию, исключив возможность того, что хорошие или плохие предсказания получились под влиянием какого-либо конкретного набора данных.

Устанавливать отдельно Weka не нужно, необходимые файлы пакет **RWeka** установит сам. Кстати, Weka разработана в Новой Зеландии, на родине R, и вообще, Weka — это птичка:



Рис. 1. Новозеландская курица Weka

Можно послушать, как она поёт, http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/sounds/weka-long.au.

Однако при загрузке пакета нужно убедиться, что на компьютере установлена среда Java, и отдавать себе отчёт, что поиск подходящих параметров и пятикратная оценка классификатора будет требовать значительного времени.

Используем функцию IBk. Для этого добавим слева к нашей матрице train столбец с ответами и преобразуем матрицу в объект data.frame. Выражение К = 10 указывает на то, что алгоритм будет перебирать все значения от 1 до 10. Функция evaluate_weka_classifier оценивает качество результатов и показывает, какие значения были классифицированы правильно в результате пятикратного разбиения выборки на кусочки и последующего усреднения, а какие — нет.

Обратите внимание на Confusion matrix, которая показывает, с какими

именно классами возникали ошибки: можно заметить, что пятёрки и восьмёрки классифицировались как всё что угодно.

```
library(RWeka)
train_weka <- data.frame(train_labels, train)</pre>
train_weka[,1] <- as.factor(train_weka[,1])</pre>
classifier <- IBk(train_labels~., data = train_weka,</pre>
                 control = Weka_control(K = 10, X=TRUE))
classifier
## IB1 instance-based classifier
## using 1 nearest neighbour(s) for classification
evaluate_Weka_classifier(classifier, numFolds = 5)
## === 5 Fold Cross Validation ===
##
## === Summary ===
##
                                                                  %
## Correctly Classified Instances
                                        869
                                                          86.9
## Incorrectly Classified Instances
                                                          13.1
                                                                  %
                                        131
## Kappa statistic
                                          0.8542
## Mean absolute error
                                           0.0281
## Root mean squared error
                                          0.1609
## Relative absolute error
                                         15.6256 %
## Root relative squared error
                                          53.6609 %
## Coverage of cases (0.95 level)
                                          86.9
                                                  %
## Mean rel. region size (0.95 level)
                                         10
                                                  %
## Total Number of Instances
                                        1000
##
## === Confusion Matrix ===
##
##
      а
         b
             С
                 d
                     e
                         f
                                 h
                                    i
                                         j
                                             <-- classified as
     93
         0
                             3
                                              a = 0
##
             0
                 0
                     0
                         0
                                 0
                                     0
                                         1 |
##
     0 113
            1
                 1
                     ()
                         0
                           0
                                     0 0 1
                                              b = 1
                               1
     2
         7
            79
                     0
                             2
                                 4
                                       2 |
                                              c = 2
##
                1
                        1
                                   1
         2
             2 82 0
                         2
                           1 1 1 1 1
     1
                                              d = 3
##
             0
                0 86
                        0
                             2 1
                                     0 13 |
                                              e = 4
##
     0
         3
                 2
                                       2 |
##
     0
             1
                     0 80
                            4
                                 1
                                     1
                                              f = 5
##
     1
       3 0 0 1
                         0 87
                                 0
                                   1
                                       1 |
                                              g = 6
                         2
     0
        4
            1
                0
                     2
                            0 101
                                    1
                                         6 |
                                              h = 7
##
##
     0
        3
            4
                 2
                   1
                         6
                             2
                                 1 66
                                         2 |
                                              i = 8
                                               j = 9
##
      1
         1
             0
                 0 11
                         2
                             1
                                 2
                                     0
                                        82 |
```

Теперь предскажем значения для тестовой выборки с помощью функции predict и посмотрим на долю ошибок.

```
test_weka = data.frame(test)
names(test_weka) = names(train_weka)[-1]

predictions <- predict(classifier, newdata = test_weka)

errors <- (sum(predictions != test_labels))/m
errors

## [1] 0.174</pre>
```

3 Заключение

Таким образом, мы рассмотрели интересную задачу и отличную, заботливо собранную базу данных, применили к ним один из самых первых и простых алгоритмов машинного обучения, который, однако, часто показывает очень хорошие результаты. Но это был один только пример, а в качестве инструментов в данном случае могут быть использованы разнообразнейшие алгоритмы. Кроме того, можно подумать над тем, как преобразовать сами изображения для улучшения качества классификации. Удачи!

Список литературы

Beygelzimer A. [и др.] FNN: Fast Nearest Neighbor Search Algorithms and Applications. — 2013. — R package version 1.1.

Hornik K., *Buchta C.*, *Zeileis A.* Open-Source Machine Learning: R Meets Weka // Computational Statistics. -2009. - T. 24, N 2. - C. 225-232.

LeCun Y., Cortes C., Burges C. J. C. The MNIST database of handwritten digits.— 25 дек. 2011. — URL: http://yann.lecun.com/exdb/mnist/index.html.