

Laborversuch 1

Versuch	Nearest-Neighbor-Methoden für Klassifikation
Fach	Intelligente Lernende Systeme
Semester	WS 2022/23
Fachsemester	CPS5 und ITS5/WIN5
Labortermine	27.10.2022 3.11.2022
Abgabe bis spätestens	11.11.2022

Versuchsteilnehmer

Name:	Vorname:
Semester:	Matrikelnummer:

Bewertung des Versuches

Aufgabe:	1	2	3	4 (ZA)
Punkte maximal:	15	35	35	15 (ZP)
Punkte erreicht:				
Gesamtpunktezahl:	/85	Note:		Zeichen:

Anmerkungen:

Allgemeine Vorbemerkungen zu den Praktikumsaufgaben

- Sie sollten mit Python-Grundlagen vertraut sein (z.B. List-Comprehensions, Dicts, Numpy-Arrays, Definition von Funktionen, Definition von Klassen, Vererbung, etc.)
- Aus Zeitgründen wird bei den meisten Praktikums-Aufgaben schon ein Programmgerüst vorgegeben, das Sie nur noch vervollständigen müssen.
- Achten Sie hierbei auf Anweisungen in den Kommentarzeilen, z.B. `# INSERT ...` oder `# REPLACE ...` !
- Versuchen Sie trotzdem auch die anderen bereits vorgegebenen Programmteile zu verstehen !
- Sie finden die Programmgerüste und Datensammlungen im Vorlesungsverzeichnis: I-Platte, Unterverzeichnis Praktikum/PRAKTIKUMSVERZEICHNIS.
- Die Grobstruktur eines Python-Moduls `myModule.py` können Sie mit dem Shell-Kommando `pydoc myModule` ansehen. Hierbei werden Klassen, Funktionen, Variablen sowie die Docstrings des Moduls ausgegeben sowie deren Docstrings (=Kommentare unter Funktionen/Klassennamen mit dreifachen Anführungszeichen “ “ “) angezeigt.
- Es wird (meist) dieselbe Notation wie in der Vorlesung verwendet (siehe Skript) !
- Z.B. bezeichnet **X** die Daten-Matrix **X**, deren Zeilen **X[i]** die Datenvektoren sind. Ähnlich enthalten die Zeilen der Design-Matrix **PHI** die Merkmalsvektoren **PHI[i]** und die Zeilen der Zielwerte-Matrix **T** die Zielvektoren bzw. Labels **T[i]**.
- **N**, **M** und **D** sind üblicherweise Anzahl der Datenvektoren, Dimension der Merkmalsvektoren und Dimension der Datenvektoren.
- Details zu Python/Numpy-Funktionen finden Sie am einfachsten in den Online-Dokus. Um z.B. Informationen über die Funktion `numpy.argsort()` zu finden googeln Sie “numpy.argsort”.
- Lesen Sie die Hinweise zu den Aufgaben !

Hinweise zur Abgabe der Ausarbeitungen:

- Erstellen Sie eine elektronische Ausarbeitung (als pdf) welche die Antworten zu allen Praktikumsaufgaben enthält.
- Die Ausarbeitung soll außerdem Snapshots der relevanten Programm-Teile bzw. Grafiken enthalten.
- Bitte laden Sie eine zip-Datei aller notwendigen Dateien auf Ilias hoch.
- Werfen Sie außerdem einen Ausdruck Ihrer Ausarbeitung in das Fach von Prof.Knoblauch.
- Abgabedatum steht jeweils auf dem Deckblatt des Aufgabenblatts.

Aufgabe 1: (8+4+3 = 15 Punkte)

Thema: Implementierung einer k -Nearest-Neighbors-Suche in Python

- a) Schreiben Sie eine Python-Funktion `getKNearestNeighbor(X, x, k=1)` welche zum Testvektor \mathbf{x} eine Index-Liste der k Nearest-Neighbors in der Datenmatrix \mathbf{X} zurückgibt.
- Hierbei soll der Daten-Vektor \mathbf{x} als Array aus D Zahlen und die Datenmatrix \mathbf{X} als Array aus N Daten-Vektoren dargestellt werden.
 - Verwenden Sie als Abstandsmaß zwischen den Vektoren die euklidische Distanz, d. h. $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\|^2 = \sum_{i=1}^D (x_i - x_{n,i})^2$.
- b) Testen Sie Ihre Implementierung mit einer Datenmatrix aus dreidimensionalen Datenvektoren $\mathbf{x}_1 = (1 \ 2 \ 3)^T$, $\mathbf{x}_2 = (2 \ 3 \ 4)^T$, $\mathbf{x}_3 = (3 \ 4 \ 5)^T$, $\mathbf{x}_4 = (4 \ 5 \ 6)^T$ und dem Test-Datenvektor $\mathbf{x} = (1.5 \ 3.6 \ 5.7)^T$:
Geben Sie auf dem Bildschirm zunächst die Euklidischen Abstände von \mathbf{x} zu allen Datenvektoren in der Datenbank aus. Bestimmen Sie dann die $k = 2$ Nearest-Neighbors zu \mathbf{x} und geben Sie diese auf dem Bildschirm aus.
- c) Wie viele Rechenschritte in Abhängigkeit von $N := \text{len}(\mathbf{X})$, $D := \text{len}(\mathbf{x})$ und k braucht Ihr Programm, um eine Anfrage zu bearbeiten (Angabe in O -Notation reicht)? Kennen Sie schnellere Verfahren?

Hinweise:

- Vervollständigen Sie das Programmgerüst `V1A1_KNearestNeighborSearch.py` aus dem Vorlesungsverzeichnis.
- Die Euklidische Distanz $\|\cdot\|$ können Sie entweder "von Hand" oder mit Hilfe der Numpy-Funktion `numpy.linalg.norm(.)` berechnen.
- Um die Indexe der k Nearest Neighbors zu bestimmen können Sie die Distanzen z.B. mit Hilfe von `numpy.argsort(.)` sortieren.

Aufgabe 2: (6+15+5+9 = 35 Punkte)

Thema: Python-Modul für k -Nearest-Neighbor-Klassifikatoren

Da wir im folgenden verschiedene Klassifikations-Verfahren implementieren wollen lohnt es sich ein eigenes Python-Modul dafür zu erstellen (siehe Programmgerüst `V1A2_Classifier.py`).

a) Versuchen Sie zunächst den Aufbau des Moduls `V1A2_Classifier.py` zu verstehen:

- Betrachten Sie den Aufbau des Moduls durch Eingabe von `pydoc V1A2_Classifier`. Welche Klassen gehören zu dem Modul und welchen Zweck haben sie jeweils?
- Betrachten Sie nun die Basis-Klasse `Classifier` im Quelltext: Wozu dienen jeweils die Methoden `__init__(self,C)`, `fit(self,X,T)`, `predict(self,x)` und `crossvalidate(self,S,X,T)` ?

b) Die von `Classifier` abgeleitete Klasse `KNNClassifier` soll einen einfachen k -NN-Klassifikator implementieren. Beantworten Sie die folgenden Fragen bzw. vervollständigen Sie die Klasse `KNNClassifier` entsprechend:

- Wie “lernt” ein k -NN-Klassifikator? Beschreiben Sie kurz was die Methode `fit(self,X,T)` macht.
- Implementieren Sie die Methode `getKNearestNeighbors(self, x, k=None, X=None)`, indem Sie Ihren Code aus Aufgabe 1 kopieren und anpassen.
- Implementieren Sie die Methode `predict(self,x,k=None)`:
Der Rückgabewert `prediction` soll die wahrscheinlichste Klasse für Testvektor `x` enthalten. Die Rückgabewerte `pClassPosteriori[i] := $\frac{\# \text{NN mit Klassen-Label } i}{k}$` sollen die A-Posteriori-Wahrscheinlichkeiten aller Klassen $0, 1, \dots, C - 1$ enthalten.

c) Testen Sie Klasse `KNNClassifier` für Daten `X = [[1,2,3],[2,3,4],[3,4,5],[4,5,6]]` mit Labels `T=[0,1,0,1]` (siehe Hauptprogramm/Modultest). Welche Ergebnisse erhalten Sie für Test-Vektor `x=[1.5,3.6,5.7]`? Geben Sie für $k = 1$, $k = 2$ und $k = 3$ jeweils die k Nearest-Neighbors, die wahrscheinlichste Klasse sowie die A-posteriori-Klassen-Verteilung an.

Warum sollte man für $C = 2$ Klassen immer ungerades k wählen?

d) Vervollständigen Sie die von `KNNClassifier` abgeleitete Klasse `FastKNNClassifier` um einen effizienteren k -NN-Klassifikator zu implementieren:

- Vervollständigen Sie die Methode `fit(self,X,T)` um einen KD-Tree für die Daten `X` aufzubauen.
- Vervollständigen Sie die Methode `getKNearestNeighbors(self, x, k=None)` um mit dem KD-Tree die K Nearest-Neighbor zu bestimmen.
- Vervollständigen Sie den Modultest (im Hauptprogramm) und testen Sie damit den `FastKNNClassifier` ähnlich wie in (c).

Hinweise:

- Vervollständigen Sie das Programmgerüst `V1A2_Classifier.py` aus dem Vorlesungsverzeichnis.
- Falls in `predict(.)` mehrere Klassen maximale Wahrscheinlichkeit haben, können Sie die `prediction` mit Hilfe der Python-Funktion `random.randint(<min>,<max>)` zufällig auswählen.
- Für den KD-Tree können Sie die SciPy-Klasse `scipy.spatial.KDTree` benutzen (siehe Online-Doku).
- Zum Bestimmen der k Nearest Neighbors mit dem KD-Tree können Sie dessen Methode `query(x)` benutzen, welche die k minimalen Distanzen und die zugehörigen Indexe liefert (siehe Online-Doku).

Aufgabe 3: (4+6+6+10+9 = 35 Punkte)

Thema: Kreuzvalidierung und Effizienz des k -NN-Klassifikators

a) Allgemeine Fragen zur Evaluation eines Klassifikators:

- Welche Klassifikationsfehlerwahrscheinlichkeit erhält man, wenn man einen k -NN-Klassifikator für $k = 1$ auf der gespeicherten Lern-Daten-Menge \mathbf{X} testet?
- Bedeutet dies, dass der k -NN-Klassifikator auch auf neuen Datenvektoren \mathbf{x} (welche nicht gespeichert sind) immer korrekt klassifiziert?
- Was kann man tun um einen realistischen Schätzwert des Generalisierungsfehlers (d.h. der Klassifikationsfehlerwahrscheinlichkeit für neue Daten) zu erhalten ?
- Erklären Sie kurz den Begriff Kreuzvalidierung und ihren Zweck! Lesen Sie hierzu im Skript (siehe Folien zu Kapitel 2).

b) Code Review: Betrachten Sie das Python-Modul `V1A2_Classifier.py` aus Aufgabe 2. Versuchen Sie die Implementierung der Methode `Classifier.crossvalidate(self,S,X,T)` zu verstehen:

- Was bedeutet der Parameter `S`?
- Welche Rolle spielen die Variablen `perm` sowie `Xp` und `Tp`?
- Welche Rolle spielt `idxS`?
- Was bewirkt die äußere Schleife `for idxTest in idxS: ...`?
- Welche Rolle haben die Variablen `X_learn` und `T_learn` bzw. `X_test` und `T_test`?
- Was passiert für `S=1`?
- Was bewirkt die innere Schleife `for i in range(len(X_test)): ...`?
- Was bedeuten die Ergebnisse der Kreuzvalidierung `pClassError` und `pConfErrors`?

c) Wir betrachten nun ein 2-Klassen-Problem für Gauß-verteilte Datenvektoren $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$ mit D -dimensionalen Dichtefunktionen

$$\mathcal{N}_i(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^D |\boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) \right\}$$

wobei $\boldsymbol{\mu}_i$ der Mittelwert und $\boldsymbol{\Sigma}_i$ die $D \times D$ Kovarianzmatrix für Klasse $i \in \{0, 1\}$ ist. D.h. ähnlich wie bei der 1-dimensionalen Gauß-Dichte (siehe Skript) ist $\boldsymbol{\mu}_i$ der Punkt mit höchster Wahrscheinlichkeit, und $\boldsymbol{\Sigma}_i$ definiert wie weit um $\boldsymbol{\mu}_i$ die Datenpunkte streuen. Versuchen Sie das Programmgerüst `V1A3_CrossVal_KNN.py` zu verstehen und zu vervollständigen:

- Wozu benötigt man den Befehl `from V1A2_Classifier import *`?
- Mit welchem Befehl werden die Gauß-verteilten Datenvektoren erzeugt? Wieviele Datenpunkte werden generiert? Was bedeuten die Variablen `N`, `N1`, `N2`?
- Welche Klassenspezifischen Verteilungen haben die Daten? Geben Sie für jede Klasse Mittelwert und Kovarianzmatrix an!
- Welche Bedeutung haben die Variablen `pE_naive`, `pCE_naive` und `t_naive`?
- Der Programmteil unter `# (ii.a) test of naive KNN classifier` erstellt und testet einen `KNNClassifier`. Vervollständigen Sie ähnlich den Code unter `# (ii.b) test of KD-tree KNN classifier` unter Verwendung eines `FastKNNClassifier` aus dem Modul `V1A2_Classifier.py`.

d) Testen Sie die Kreuzvalidierung bzw. Klassifikationsleistung Ihrer Implementierung aus Teilaufgabe (c):

- Bestimmen Sie Klassifikationsfehler und Verwechslungswahrscheinlichkeiten für die gegebenen Daten bei Kreuzvalidierung mit dem k -NN-Klassifikator für $k = 1$, $k = 5$, $k = 11$ kombiniert mit $S = 1$, $S = 2$, $S = 5$?
- Bestimmen Sie die Klassenverteilungen für drei weitere Testpunkte $(2, 1)$, $(5, 1)$, $(-1, 1)$ für $k = 1$, $k = 5$, $k = 11$, $k = 111$, $k = 511$. Was ist jeweils die wahrscheinlichste Klasse?

Sind die Ergebnisse für den `KNNClassifier` und den `FastKNNClassifier` gleich?

Stellen Sie die Ergebnisse für einen der beiden Klassifikatoren jeweils in einer Tabelle dar.

e) Vergleichen Sie systematisch die Effizienz der beiden k -NN-Klassifikatoren mit $k = 5$, indem Sie die Laufzeiten von Kreuzvalidierungen mit $S = 1$ und $S = 5$ für eine zunehmende Anzahl $N := N_1 + N_2 \in \{10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000, 10000\}$ von Datenvektoren messen. Stellen Sie die gemessenen Laufzeiten als Funktion von N in einer Tabelle bzw. einem Schaubild dar.

Hinweise:

- Sie können das Programmgerüst `V1A3_CrossVal_KNN.py` aus dem Praktikumsverzeichnis verwenden.
- Für Teilaufgabe (e) bietet sich ein automatisierter Test an, wobei Sie eine Schleife über alle gewünschten Werte von N laufen lassen. Sie können hierfür das Programmgerüst `V1A3e_TestEfficiency_KNN.py` aus dem Praktikumsverzeichnis verwenden.

Zusatzaufgabe 4 $4+3+6+2 = 15$ Punkte

Thema: k -NN-Klassifikation von Satellitenbildern Japanischer Wälder

Implementieren Sie in einem neuen Python-Skript einen Nearest-Neighbor-Klassifikator zur Klassifikation verschiedener (japanischer) Wald-Typen auf Satellitenbildern. Hierfür enthält die Datensammlung `ForestTypesData.csv` (siehe Praktikumsverzeichnis) $N = 524$ Datensätze, wobei jeder Datensatz aus $D = 27$ Bild-Merkmalen der Satellitenaufnahmen besteht (deren genaue Bedeutung uns hier nicht näher zu interessieren braucht). Zusätzlich enthält jeder Datensatz in der ersten Spalte ein Klassenlabel, welches den Datensatz einer von $C = 4$ Klassen zuordnet. Hierbei bedeuten: 's'=Sugi-Zypressenwald, 'h'=Hinoki-Zypressenwald, 'd'=Mischlaubwald, 'o'=unbewaldet.

Versuchen Sie zunächst den Aufbau des Programmgerüsts `V1A4_ForestClassification.py` zu verstehen:

- Laden der Wald-Daten mit der Pandas-Funktion `read_csv` (oder `read_table`; siehe Pandas-Tutorial).
- Die eingelesenen Daten werden wie üblich in Daten-Matrix X und Labels T umgewandelt. Beachten Sie hierzu:
 - Nach dem Laden z.B. mit `forestdata = pd.read_csv(filename)` liefert `forestdata.values` ein Daten-Array welches die Daten der Tabelle `ForestTypesData.csv` enthält.
 - Die Klassenlabels stehen in der ersten Spalte von `ForestTypesData.csv`, die Bild-Merkmale in den restlichen 27 Spalten.
 - Sie können die Umwandlung der Text-Label 's','h','d','o' in numerische Klassenlabels 0,1,2,3 etwa mit Hilfe einer List-Comprehension erledigen.

Lösen/beantworten Sie nun die folgenden Fragen:

- a) Erstellen Sie einen k -Nearest-Neighbor-Klassifikator für die Wald-Daten. Importieren Sie hierfür wieder das Modul `V1A2_Classifier.py` aus Aufgabe 2 und verwenden Sie eine geeignete Klasse für den Klassifikator.
- b) Testen Sie den Klassifikator für $k = 3$ durch Kreuzvalidierung mit $S = 5$. Geben Sie die Klassifikationsfehlerwahrscheinlichkeit und Verwechslungsmatrix an.
- c) Versuchen Sie die Klassifikationsleistung zu optimieren, z.B. in dem Sie k variieren. Für welches k ist der Klassifikationsfehler am kleinsten? Ändert sich Ihr Ergebnis für verschiedene $S \in \{1, 2, 3, 5, 10, 100\}$?
- d) Theoretische Zusatzfrage: Bis auf k gelten k -NN-Verfahren als parameterfrei, d.h. unabhängig von irgendwelchen Annahmen über die Datenverteilung. Ist diese Annahme wirklich gerechtfertigt?

Hinweise:

- Zur Programmieraufgabe: Sie können das Programmgerüst `V1A4_ForestClassification.py` aus dem Praktikumsverzeichnis verwenden.
- Zur Theorie-Frage: Was ist z.B. falls sich der Wertebereich verschiedener Merkmalsdimensionen um mehrere Größenordnungen unterscheiden? Wie könnte man hier abhelfen?