模式识别

最近邻 &
模式识别系统框架及其各模块的简介

吴建鑫
南京大学计算机系 & 人工智能学院，2020

目标

- ✓ 理解并能熟练运用最近邻方法进行分类
- ✓ 了解最近邻方法的限制、缺陷以及可能的解决办法
- ✓ 理解并掌握模式识别系统各模块的作用、基本概念和解决方案的分类

- ✓ 提高目标
  - 进一步能将最近邻方法应用到实际研究问题中去（研究生、部分本科生）
  - DHS第7—10章、PRML第8—12章（偏Bayesian角度）将不详细讲授，感兴趣的同学可以自学

最近邻规则

Nearest neighbor rule

问题设置problem setup

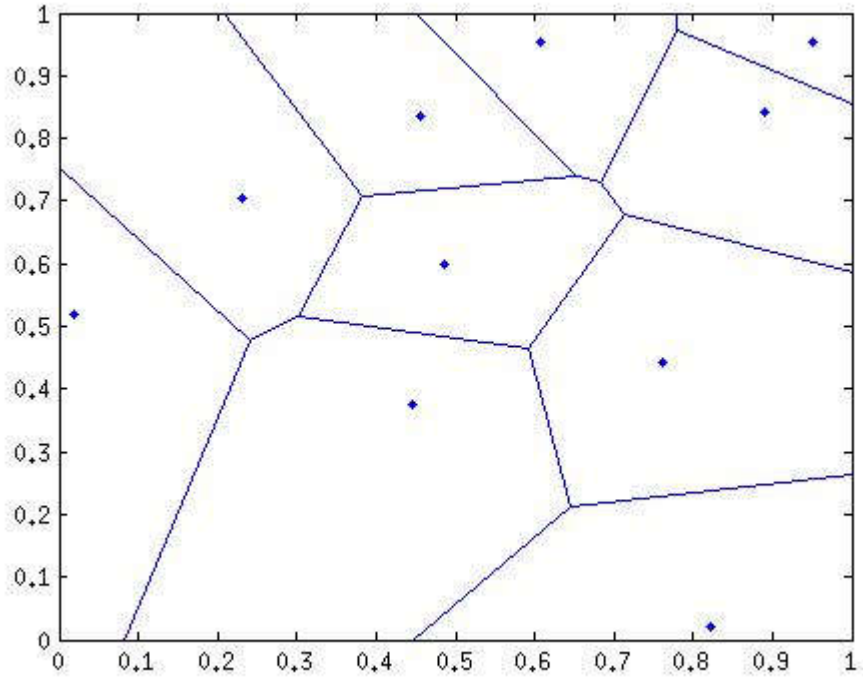
- ✓ 分类问题classification
  - 训练集$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \dots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$
  - 训练样本(sample)：$\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$
  - 样本的标记(label)：$y_i \in \mathcal{Y} = \{1, 2, \dots, C\}$
    - 样本一共被分为C个类别(category)
    - 例如，在我们的例子里，$C = 2$，$y_i = 1$（男）或者$y_i = 2$（女）

- ✓ 存在一个距离(distance)函数：$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}$
  - 能够度量x和y之间的距离，或者不相似程度(level of dissimilarity)

最近邻规则和Voronoi图

给定一个测试样例$\boldsymbol{x}$

1. 发现其最近邻$i^* = \underset{i}{\operatorname{argmin}}\, d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$
2. 输出对$\boldsymbol{x}$的分类的预测：y_{i^*}



Voronoi图(Voronoi Diagram)

最近邻可能出现的问题

- ✓ 如果出现平局(tie)？
  - $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) = d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$
  - $y_i = y_j?\ \ y_i \neq y_j?$
- ✓ 如果出现离群点(outlier)？
  - K-近邻(kNN，k-nearest neighbor)规则
  - 可能遇到的问题？
- ✓ 能做的多好？
  - 当训练样本趋于无穷时($n \to \infty$)，最近邻的错误率最多是最佳错误率的两倍
  - 有限样本(finite sample)时的结论尚不清楚

计算、存储代价(cost)

- ✓ 假设$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$是欧式距离(Euclidean distance, ℓ_2 distance)
  - 其复杂度(complexity)是$O(d)$
  - NN的复杂度$O(nd)$
    - DHS 152页的复杂度是错的
  - K-NN的复杂度同样是$O(nd)$
    - 或者是$O(nd)+O(n)+O(k)$，但通常k较小，可以忽略
    - 从n个数（距离）中选择k个最小的，复杂度是？

- ✓ 考虑一下，如果是ILSVRC，需要多长时间，多大的存储空间？这是NN的主要问题
  - $n = 1{,}200{,}000$
  - $d = 262{,}144$

降低NN的计算、存储代价

- ✓ 近似最近邻(approximate nearest neighbor，ANN)
  - 不要求一定是距离最短的k个
  - 如第k个NN，其距离是d_k，则ANN要求其选取的所有k个样例的距离$\hat{d}$满足$\hat{d} \leq (1+\epsilon)d_k$即可
  - 可以将kNN搜索(search、查找)速度提高几个数量级

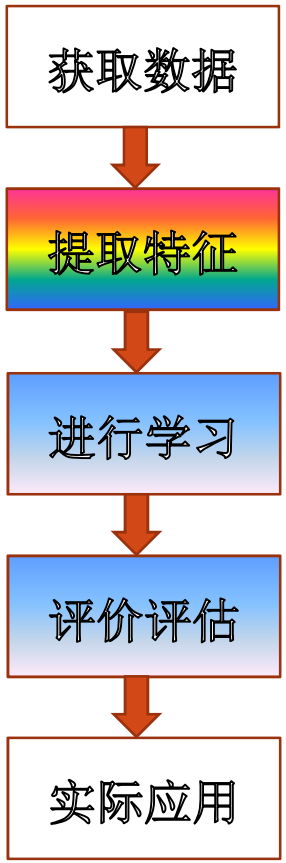
- ✓ 二值哈希(binary hashing)
  - hash函数f_i:将$\mathbb{R}^d$分为两部分，分别用$f_i = 0$，1表示
  - 设计m个hash函数$f_1, \ldots, f_m$，每个$\boldsymbol{x}$表示为m个bit
  - $m \ll d$，计算和存储大幅简化，需要设计好的hash
  - 进一步：基于深度学习的哈希

系统各模块(混合)简介

Introducing various components in a mixed order

细化(refined)的框架

- ✓ 机器学习$f: \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$
  1. 与领域无关的特征变换和特征抽取
     - Normalization, PCA, FLD, …
  2. 针对不同数据特点的不同学习算法
     - SVM, Decision Tree, imbalanced learning, HMM, DTW, graphical model, deep learning, pLSA, …
  3. 机器学习方法常见分类、策略
- ✓ 针对不同问题的评价准则(evaluation criterion)



评价准则—泛化和测试误差

- ✓ 暂时只考虑分类问题的评价
- ✓ 假设$(\boldsymbol{x}, y) \sim p(\boldsymbol{x}, y)$
  - 泛化误差generalization error：$E_{(\boldsymbol{x},y)\sim p(\boldsymbol{x},y)}[f(\boldsymbol{x}) \neq \boldsymbol{y}]$
    - 通常无法实际计算
  - 根本假设：训练集D_{train}和测试集D_{test}都是服从真实数据分布$p(\boldsymbol{x})$的，或者，他们的样例是从$p(\boldsymbol{x})$中取样（sample）的
  - 测试误差(testing error)

$$err = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}(f(\boldsymbol{x}_i) \neq y_i), \qquad \boldsymbol{x}_i \in D_{test}$$

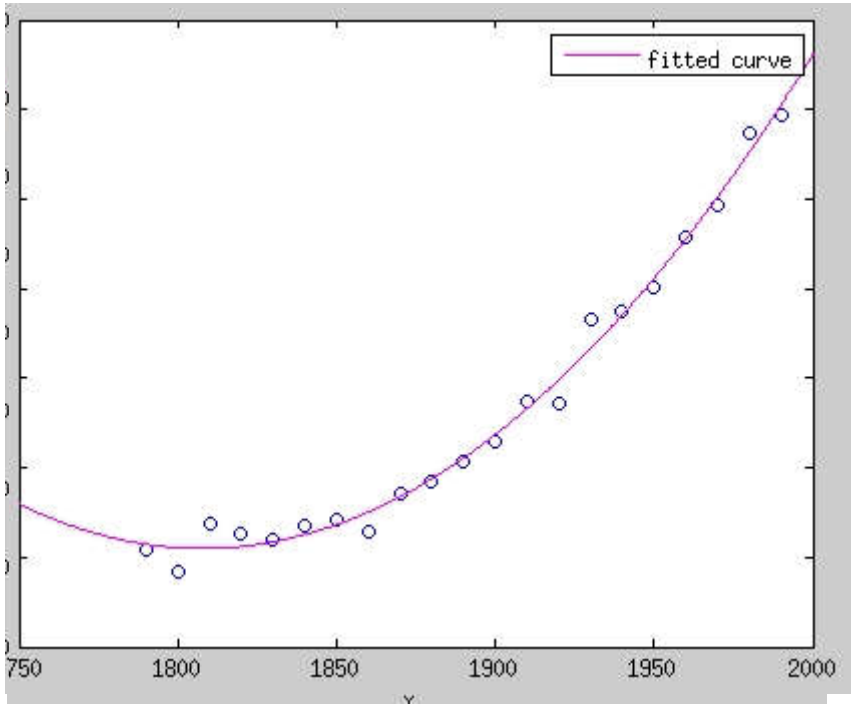
  - 精确度(accuracy)：$acc = 1 - err$

一种常见的学习框架

- ✓ 代价最小化cost minimization
  - 错误是最常考虑的代价，所以现在我们可以说学习的目标是在训练集上获得最小的代价
- ✓ $\min_f \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}(f(\boldsymbol{x}_i) \neq y_i)$， $\boldsymbol{x}_i \in D_{train}$
  - 难以优化 – 怎样求解?
  - 一种方法是：把不连续的指示函数(indicator function)换成性质相似，但好优化的函数
  - 如，$(f(\boldsymbol{x}_i) - y_i)^2$
- ✓ 学习这种**思路**：形式化、简化、优化
  - Formalization, simplification, optimization

过拟合和欠拟合

- ✓ Overfitting & underfitting，以回归(regression)为例



- 以七阶多项式拟合（直线）
- 学习模型的复杂性 ~~过~~ 于数据的复杂性
- 称为过拟合 ~~欠拟合~~ underfitting

正则化regularization

- ✓ 通常难以精确估计学习模型、数据的复杂性
  - 往往选用较复杂的学习模型
  - 训练集误差通常小于测试集误差(需要两者不相交)
- ✓ 那么如何降低overfitting的可能性呢？
  - 正则化regularization，会在SVM部分看到例子

- ✓ 进一步阅读：
  - 正则化如何能降低模型的复杂性？PRML以及ESL(The Elements of Statistical Learning)

如果没有测试集

- ✓ 例如，总的数据量比较小（如医学图像）
  - 如何评估？
- ✓ 交叉验证cross validation
  1. 将训练集分为大小大致相等的N部分
  2. for $i = 1{:}N$
     1. 取第i部分的数据为测试集
     2. 取所有其余（一共$N-1$个部分）的数据为训练集
     3. 学习模型并评估/测试得到错误率为err_i
  3. 交叉验证得到的错误率为$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} err_i$
  - 称为N倍交叉验证N-fold CV （常用N=5 or 10）
- ✓ 可能需要进行多次试验（后面会讲）

数据、代价的不平衡性imbalance

- ✓例如，两类问题中，一类数据远比另一类数据多
  - 如，体检中阴性和阳性
  - 男女比例
  - 或在一类犯错的代价远高于另一类

  - 不平衡学习(imbalance learning)
  - 代价敏感学习(cost-sensitive learning)

  - 进一步阅读：周志华教授主页和论文 http://cs.nju.edu.cn/zhouzh/zhouzh.files/publication/publication.htm

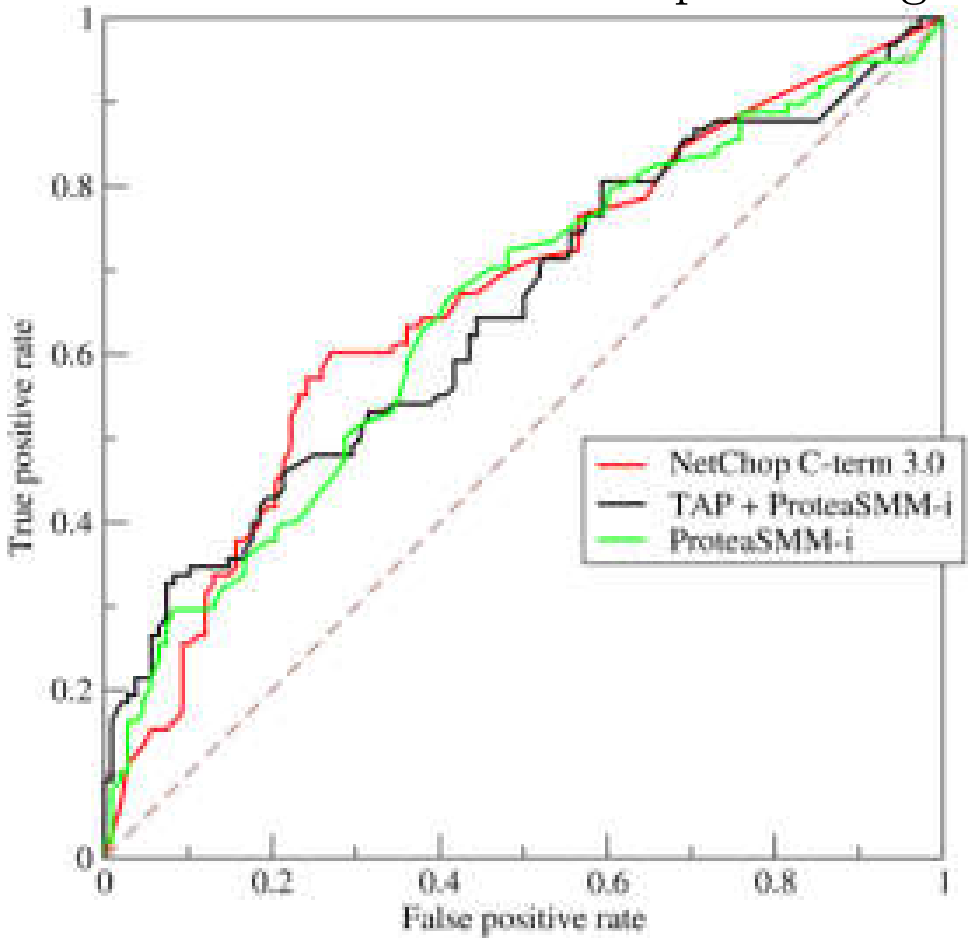
评价不平衡时的准则(1)

	预测为positive	预测为negative
真实值为positive	True positive (真阳性)	False negative(伪阴性)
真实值为negative	False positive(伪阳性)	True negative(真阴性)

- ✓TP、TN、FP、FN：标记四种情况的样例数目
- ✓TOTAL：总数 TP+TN+FP+FN
  - 正样本数目：P = TP+FN，负样本数目：N = FP+TN
- ✓False positive rate: FPR = FP / N
- ✓False negative rate: FNR = FN / P
- ✓True positive rate: TPR = TP / P
- ✓Accuracy：ACC = (TP+TN) / TOTAL

评价不平衡时的准则(2)

- ✓ AUC-ROC (Area Under the ROC Curve)
  - ROC - Receiver operating characteristic



- Y轴：TPR
- X轴：FPR
- 其值为面积
- 为什么？
- 对角线是？
- 非减

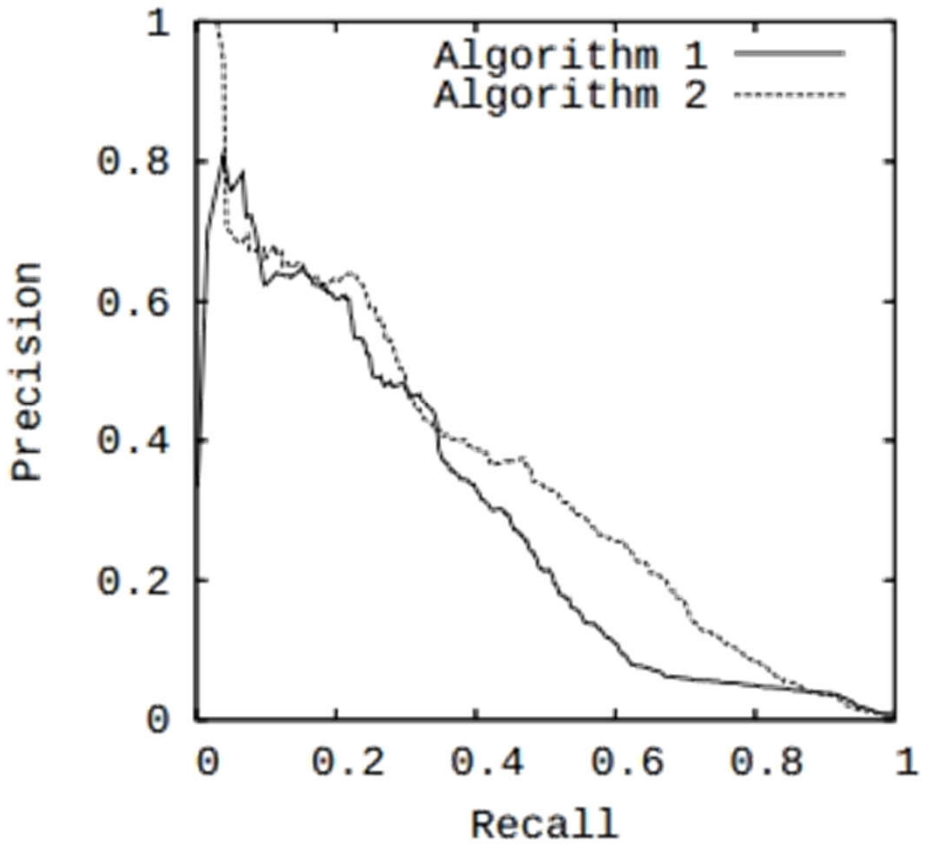
http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/6/6b/Roccurves.png

评价不平衡时的准则(3)

- ✓ Precision（查准率）： PRE = TP / (TP + FP)
- ✓ Recall（查全率）：REC = TP / P（和TPR一样）
- ✓ F1 score：Precision和Recall的调和平均 (harmonic mean)
  - 调和平均：$\left(\frac{x^{-1}+y^{-1}}{2}\right)^{-1} = \frac{2xy}{x+y}$
  - F1 = 2TP / (2TP+FP+FN)
    - 推导一下
  - 为什么？

评价不平衡时的准则(4)

- ✓ AUC-PR (Area Under the Precision-Recall Curve)



- Y轴：Precision
- X轴：Recall
- 其值为面积
- 为什么？
- 单调吗？

进一步阅读： The Relationship Between Precision-Recall and ROC Curves， 左边的图来自该论文

代价矩阵

- ✓ 目前常见的为$\begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
  - λ_{ij}：当真实值为i、模型预测为j时付的代价
  - 0-1代价：即分类正确代价为0，分类错误代价为1
  - 但是，根据实际情况，可以给λ_{ij}设置任何值
    - 代价不平衡学习
- ✓ 对代价的计算：$E_{(x,y)}[\lambda_{y,f(x)}]$
  - 当使用0-1代价时，和错误率一致

真实值Groundtruth

- ✓ 大多数时候，是手工标注的(manual annotation)
  - 或者人也不知道确切的答案
  - 有时候疲劳或其他因素会导致标注的错误
  - 很耗时、昂贵

- ✓ 真实值的形式
  - 分类：一个离散的类别
  - 回归regression：一个连续的值
  - 结构structured output：例如，输出一个句子的分词结果“一个/句子/的/分词/结果”

能100%准确吗:Bayes框架的回答(1)

- ✓ $f: \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$, 一个数据对(data pair): $(\boldsymbol{x}, y)$
  - 假设注重于分类: $\mathcal{Y} = \{1,2,\ldots,m\}$
  - 先验概率prior probability: $p(y = i)$
    - 在没有看到任何数据时，怎么分类?
  - 后验概率posterior probability: $p(y = i|\boldsymbol{x})$
    - 看到数据$\boldsymbol{x}$后，得到更多的信息，可以对分类有更好的估计
  - 类条件概率class conditional probability: $p(\boldsymbol{x}|y = i)$
    - 数据总的分布$p(\boldsymbol{x})$和每个类别内部的分布$p(\boldsymbol{x}|y = i)$不一样
- ✓ 贝叶斯定理Bayes' theorem

$$p(y = i|\boldsymbol{x}) = \frac{p(\boldsymbol{x}|y = i)p(y = i)}{p(\boldsymbol{x})} = \frac{\text{条件} \times \text{先验}}{\text{数据}}$$

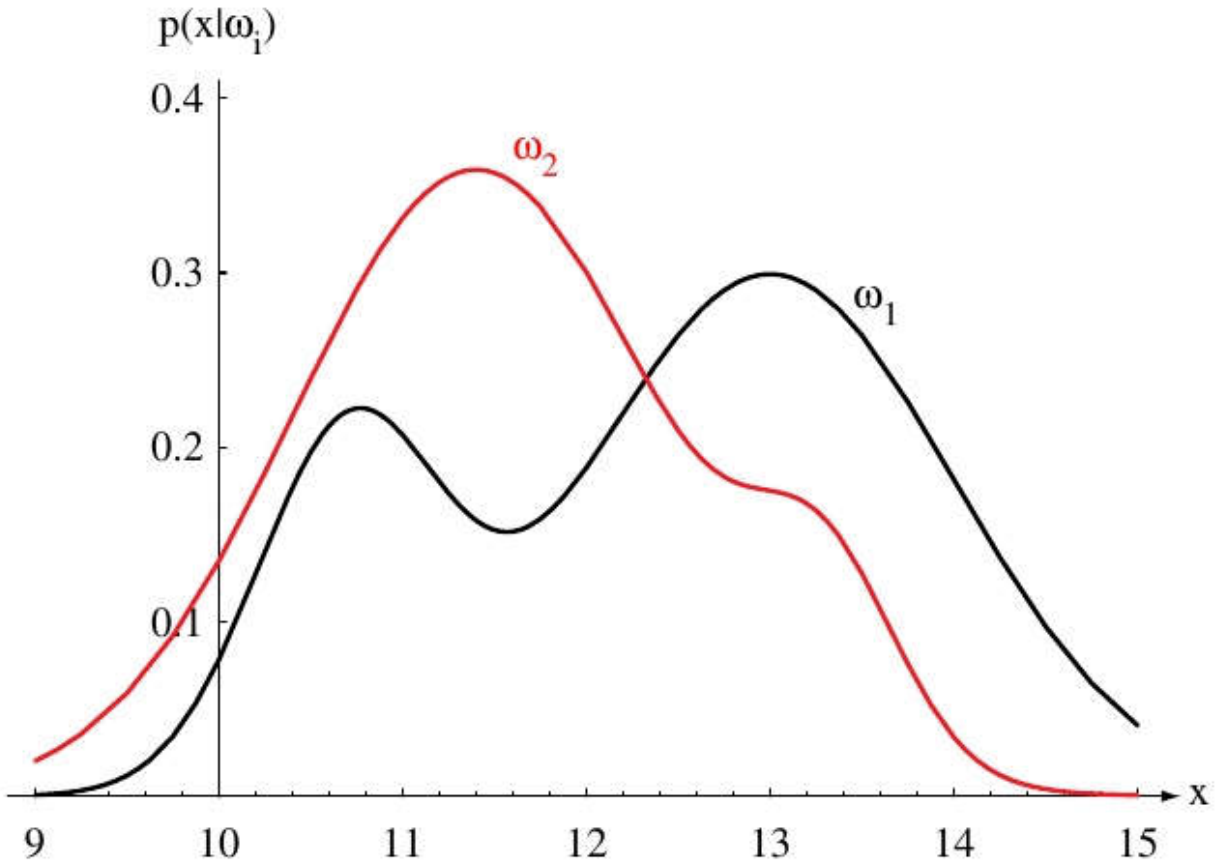
能100%准确吗:Bayes框架的回答(2)

- ✓ 贝叶斯决策规则Bayes decision rule:
  - 选择代价最小的类别输出

$$\underset{y}{\operatorname{argmin}} E_{(x,y)}[\lambda_{y,f(x)}]$$

  - 贝叶斯风险Bayes risk：使用贝叶斯决策规则的风险
  - 其是理论上我们能得到的最好的结果，记为R^*
- ✓ 在使用0-1风险时，风险和错误率等价
  - 所以，R^*是我们理论上能得到的最小误差
  - $1-R^*$是理论上最高的准确率！
- ✓ 自学：DHS2.1 DHS2.2（包括似然比规则likelihood ratio rule）

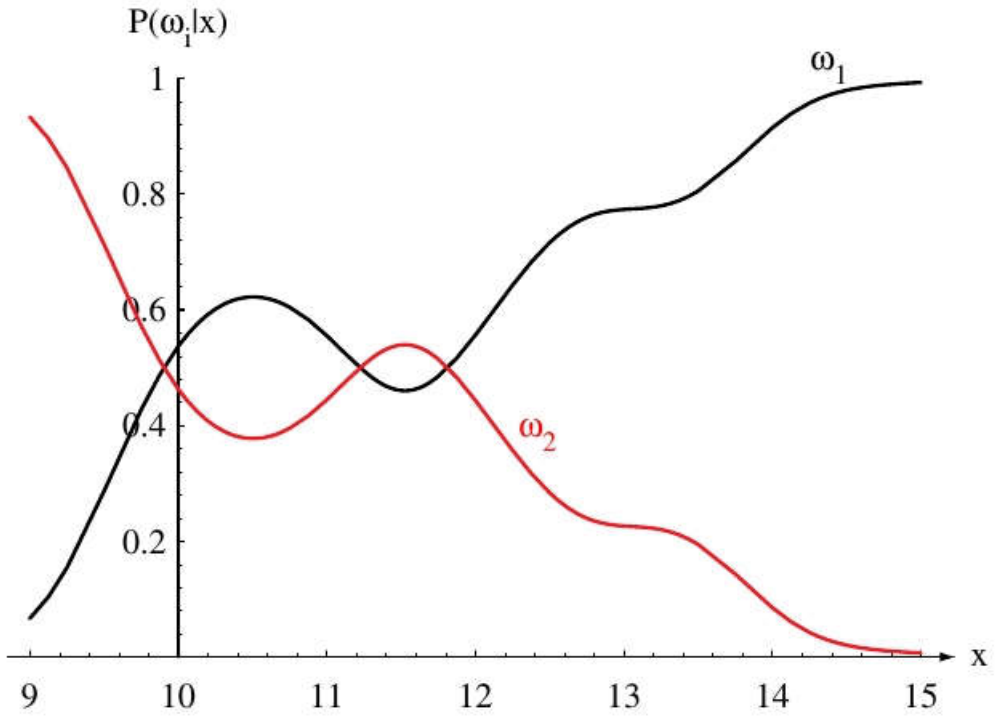
类条件概率示意图



该在哪里分开？错误（或风险）是多少？
图片来自教程DHS

贝叶斯决策规则

- ✓ 在0-1风险时，选择后验概率最大的那个类别
  $\text{argmax}_i p(y = i|\boldsymbol{x})$



其中第一类prior为2/3
第二类为1/3

图片来自教程DHS

错误从哪里来—以回归为例？

- ✓ 真实（但未知）的函数$F(\boldsymbol{x})$
  - 用由其产生的数据集D来学习，即$y = F(\boldsymbol{x})$没有误差
  - 回归的代价函数是欧几里得距离
- ✓ $E_D\left[\left(f(\boldsymbol{x};D) - F(\boldsymbol{x})\right)^2\right] = \left(E_D[f(\boldsymbol{x};D)] - F(\boldsymbol{x})\right)^2 + E_D[(f(\boldsymbol{x};D) - E_D[f(\boldsymbol{x};D)])^2]$
  - $\boldsymbol{x}$和$F(\boldsymbol{x})$是定值(constant)，只有D出现时才取期望
  - 简写为$E[(f - F)^2] = (F - Ef)^2 + E[(f - Ef)^2]$
  - DHS 376页的处理（或翻译）有问题

偏置-方差分解

- ✓ Bias-variance decomposition
  - $E[(f-F)^2] = (F-Ef)^2 + E[(f-Ef)^2]$
  - $E[F-Ef]$ -- 偏置bias
    - 当训练集取样有差异时，其值不变
  - $E[(f-Ef)^2] = Var_D(f(\boldsymbol{x};D))$方差
    - 当训练集取样有差异时，会带来预测的差异（误差不同）
- ✓ 误差=偏置^2+方差
- ✓ 当考虑到$y = F(\boldsymbol{x})$有误差是（白噪声）
  - 误差=偏置^2+方差+噪声
  - 估计误差时，如没有测试集，需多次平均
- ✓ 进一步阅读：分类时候的分解(DHS9.3.2)

对分解的解读

- ✓ 偏置与数据无关，是由模型（的复杂度）决定的
  - 例如，线性分类器（1阶多项式）的偏置大
  - 但是，7阶多项式的复杂度高，偏置小
- ✓ 但是，方差$Var_D(f(\boldsymbol{x};D))$和抽样得到的训练集以及模型两者都有关系
  - 例如，高阶多项式的方差大
- ✓ 怎么减少误差？
  - 对于噪音，机器学习没有办法—高质量的数据获取！
  - 减少偏置和方差
    - 如集成方法(ensemble methods)

进一步的阅读

- NN & kNN: DHS 4.5 & 4.6，可以等到课程讲完Bayesian相关的内容之后
- FLANN： http://www.cs.ubc.ca/research/flann/
  - ANN软件和相关论文、文档
- Hash：http://en.wikipedia.org/wiki/Locality-sensitive_hashing 及其页面中的资源
- 其他见各页面的进一步阅读资源