Кузьмин Никита, ММП, 317.

Отчет по заданию №1 "**Метрические алгоритмы классификации**".
Алгоритм k ближайших соседей

Содержание

1 Введение

В этом документе представлен отчет о проделанных экспериментах по практическому заданию №1, анализ результатов.
Краткое описание задания: необходимо реализовать алгоритмы k ближайших соседей и кросс-валидации, провести эксперименты с датасетом изображений цифр **MNIST**.

2 Эксперименты

В этом блоке приведены все обязательные эксперименты, которые изложены в формулировке задания.

2.1 Скорость поиска ближайших соседей

2.1.1 Дизайн эксперимента:

Были протестированы 4 алгоритма поиска 5 ближайших соседей с разными размерами признакового пространства:

Алгоритмы:

- «my_own»
- «brute»
- «kd_tree»
- «ball_tree»

Размеры признакового пространства:

- 10
- 20
- 100

2.1.2 Результаты

Подробные результаты экспериментов приведены в таблице 1:

Таблица 1: Результаты эксперимента №1

размерность	алгоритм	время работы
10	my_own	68.07
	brute	7.84
	kd_tree	**0.44**
	ball_tree	1.72
20	my_own	76.82
	brute	7.95
	kd_tree	**1.40**
	ball_tree	6.63
100	my_own	78.31
	brute	**8.28**
	kd_tree	82.76
	ball_tree	97.67

2.1.3 Выводы

Самым стабильным алгоритмом оказался «brute», который практически не деградирует с ростом размерности. Как и ожидалось, алгоритмы, реализованные на деревьях, сильно замедлились на признаковом пространстве размерности 100.

2.2 Зависимость точности модели от количества соседей и метрики

2.2.1 Дизайн эксперимента

В этом эксперименте была рассмотрена зависимость точности и времени работы модели k ближайших соседей от следующих параметров на 3 валидационных фолдах:

- k от 1 до 10 (только влияние на точность).
- Евклидова или косинусная метрика.

2.2.2 Результаты

Зависимость средней точности от числа соседей для различных метрик приведена на графике 1
Измерения скорости для евлидовой и косинусной метрик приведены в таблице 2.

Рис. 1:

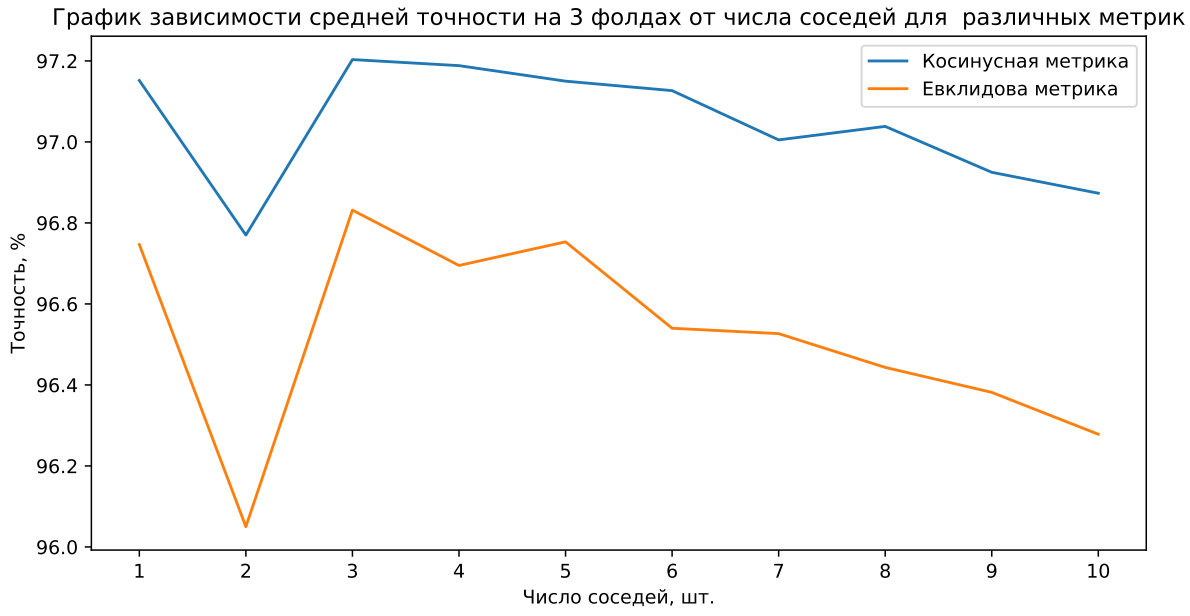


Таблица 2: Скорость работы метрик (измеренная при кросс-валидации на 3 фолдах)

метрика	время
евклидова	103.42
косинусная	101.69

2.2.3 Выводы

Из графика на Рис. 1 видно, что:

1. Наибольшая точность алгоритма достигается при $k = 3$ для обеих метрик.
2. С увеличением количества соседей (при $k \geq 5$) точность начинает убывать.
3. Точность алгоритма с косинусной метрикой превосходит точность алгоритма с евклидовой метрикой $\forall k \in \{1, \ldots, 10\}$

Из таблицы 2 видно, что скорость работы алгоритмов практически не зависит от выбора данных метрик.

2.3 Сравнение точности взвешенного метода и метода без весов

2.3.1 Дизайн эксперимента

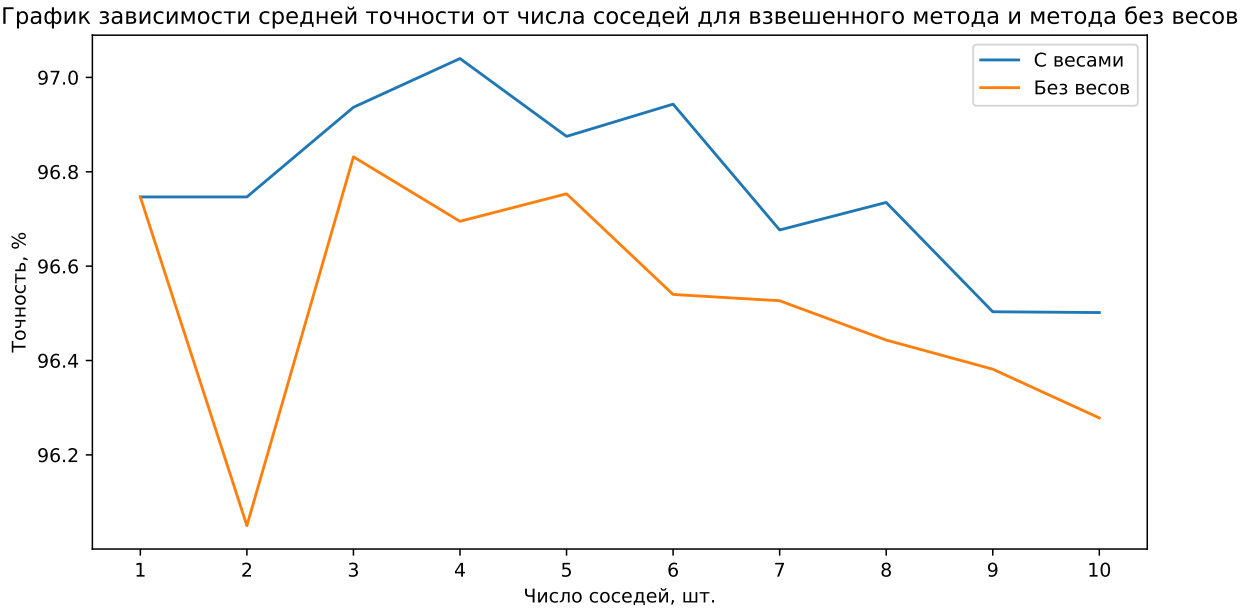
Был рассмотрен метод k ближайших соседей «brute» с косинусным расстоянием $\forall k \in \{1, \ldots, 10\}$ в двух случаях:

1. Взвешенный метод
2. Метод без весов

2.3.2 Результаты

Результаты эксперимента №3 приведены на графике 2

Рис. 2:



2.3.3 Выводы

По графику 2 можно заметить, что взвешенный метод лучше по точности во всех случаях, кроме $k = 1$, что является логичным, так как при предсказании по одному соседу веса бесполезны.

2.4 Анализ модели с лучшим качеством

2.4.1 Дизайн эксперимента

Применим лучший алгоритм («brute», косинусная метрика, с весами) к исходной обучающей и тестовой выборке и проанализируем матрицу ошибок (confusion matrix).

2.4.2 Результаты

Значения точности лучшего алгоритма на кросс-валидации, на тестовой выборке и значение точности лучшего алгоритма из интернета представлены в таблице 3. Матрица ошибок представлена на рисунке 3, Визуализированные объекты – на рисунке 4

Таблица 3:

алгоритм	условия	точность
реализованный по заданию	кросс-валидация	0.9741
	тестовая выборка	0.9752
сверточная нейронная сеть	тестовая выборка	0.9979

Рис. 3: Матрица ошибок для эксперимента №4

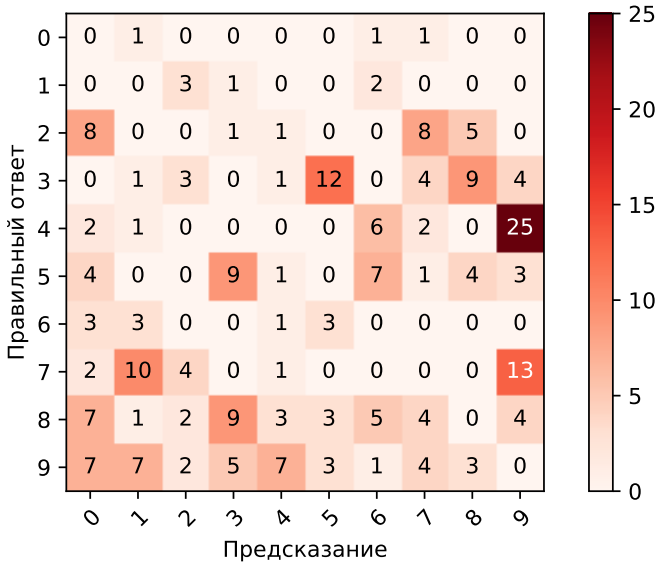
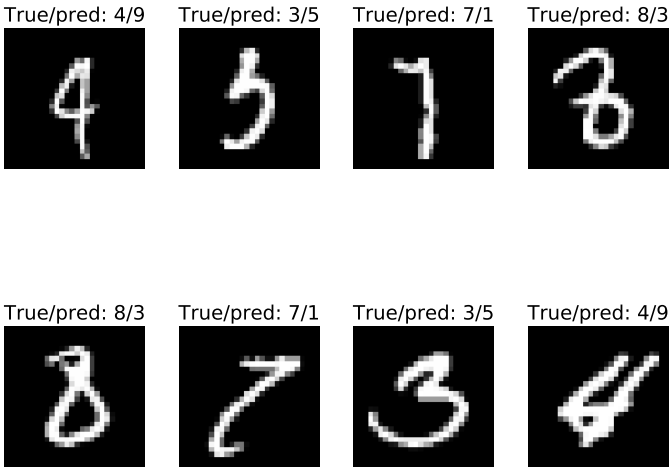


Рис. 4: Цифры с ошибками в предсказаниях



2.4.3 Выводы

Можно увидеть, что самые частые ошибки происходят на парах цифр, представленных ниже:

- 4 и 9
- 1 и 7
- 3 и 5
- 3 и 8

Эти пары похожи по написанию, поэтому алгоритму тяжелее отличить их друг от друга.
Рассмотрим теперь объекты, на которых произошли ошибки. У них можно заметить характерные особенности:

1. Засечки
2. Крючки
3. Отсутствие некоторых частей

В представленых случаях видно, что написаннные цифры немного деформированы и похожи на другие в некоторых чертах. Эти особенности затрудняют классификацию для алгоритма.

2.5 Применение трансформаций к тренировочной выборке

2.5.1 Дизайн эксперимента

Пусть у нас есть m элементарных преобразований:
$\phi_j(x) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d, j \in \{1, \ldots, m\}$, введем $\phi_0(x) = x$
Создадим новую обучающую выборку:

$$X_{new} = \left(\bigcup_{j=0}^{m} (\phi_j(x_i), y_i)_{i=1}^{l} \right)$$

Рассматриваемые преобразования[1]:

- Поворот на: $5, 10, 15^\circ$ (в каждую из двух сторон).
- Смещение на 1, 2, 3 px (по каждой из двух размерностей).
- Дисперсия фильтра Гаусса[2] $\sigma^2 = 0.5$, 1, 1.5.

То есть применение конкретного преобразования позволяет нам расширить тренировочную выборку в 2 раза[3].

[1] Для трансформаций тренировочной выборки использовалась библиотека **scipy**.

[2] Важно заметить, что функция **scipy.ndimage.gaussian_filter** принимает в качестве аргумента σ, а не σ^2.

[3] Замечание: если размножить тренировочную выборку до вызова функции кросс-валидации, то точность сильно возрастет (особенно при взвешенном методе). Это возникает из-за того, что преобразованные объекты остаются очень близкими к исходным. Чтобы избежать этого – нужно размножать каждый тренировочный фолд отдельно, а тестовый не трогать.

2.5.2 Результаты

Результаты[4] приведены в таблице 4 (только по 3 лучших параметра для каждого преобразования) и на рисунках 5, 6, 7, 8 представлены матрицы ошибок.

Таблица 4: Точность в зависимости от преобразования

тип преобразования	параметр	точность
отсутствует	–	0.945
поворот	5	0.954
	10	**0.956**
	15	0.954
сдвиг	$(1, -1)$	0.952
	(1, 0)	**0.953**
	$(0, 1)$	0.952
размытие	0.5	0.957
	1.0	**0.960**
	1.5	0.959

Рис. 5: Без преобр.

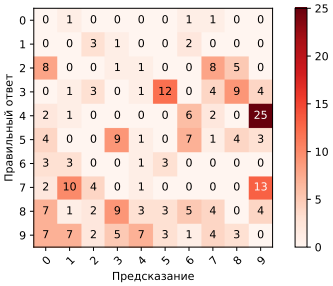


Рис. 6: Поворот на 10°

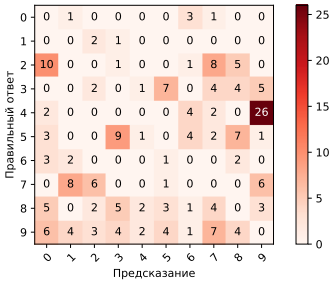


Рис. 7: Сдвиг на $(1, 0)$ px

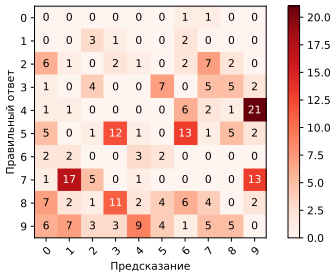
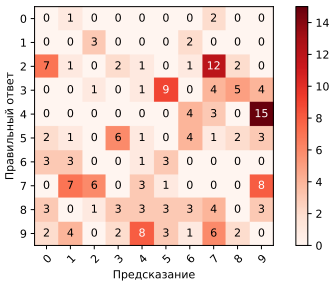


Рис. 8: $\sigma^2 = 1$



2.5.3 Выводы

Можно отметить ряд фактов, которые видны из матриц ошибок:

1. Поворот позволяет алгоритму меньше путать цифры:
   - 3 с 5
   - 7 с 9
   - 3 с 8
2. Сдвиг позволяет алгоритму меньше путать цифры:
   - 4 с 9
   - 3 с 8
3. Размытие Гаусса позволяет алгоритму меньше путать цифры:
   - 4 с 9
   - 7 с 9

[4]Кросс-валидация проводилась на первых 10000 объектах из тренировочной выборки с целью экономии времени.

2.6 Применение трансформаций к тестовой выборке

2.6.1 Дизайн эксперимента

Этот способ основан на преобразовании объектов тестовой выборки. Для каждого объекта тестовой выборки x' получим множество объектов $\Phi(x') = \{\phi_j(x')|j \in \{1, \ldots, m\}\}$. Введем «расстояние» от множества $\Phi(x')$ до объекта обучающей выборки x:

$$\rho(x, \Phi(x')) = \min_j\{\rho(x,\phi_j(x')|j \in \{1, \ldots, m\}\}$$

Вычисление k ближайших соседей для $\Phi(x')$ можно организовать следующим образом:

1. Для каждого объекта из $\Phi(x')$ найдем него k ближайших соседей из обучающей выборки X
2. Среди всех найденных соседей выберем k объектов с наименьшим расстоянием

По полученному множеству значений ближайших соседей вычисляется ответ алгоритма.

2.6.2 Результаты

Результаты приведены в таблице 5 (только по 3 лучших параметра для каждого преобразования) и на рисунках 9, 10, 11, 12 приведены матрицы ошибок.

Таблица 5: Точность в зависимости от преобразования

тип преобразования	параметр	точность
отсутствует	–	0.972
поворот	-15	0.976
	-10	**0.977**
	-5	0.974
сдвиг	$(1, -1)$	0.977
	(1, 0)	**0.978**
	$(3, -1)$	0.976
размытие	**0.5**	**0.972**
	1.0	0.963
	1.5	0.951

2.6.3 Выводы

Поворот на 10° против часовой стрелки позволяет избавиться от значительной части ошибок, при которых модель путает 3 с 5.
Сдвиг на (1, 0) px убирает ошибки, связанные с идентификацией 8 и 0, 9 и 7.

Рис. 9: Без преобразований

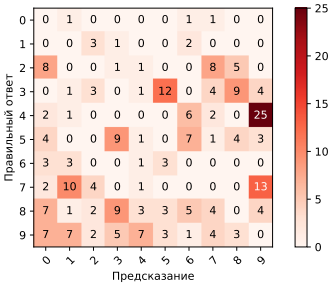


Рис. 10: Поворот на $-10°$

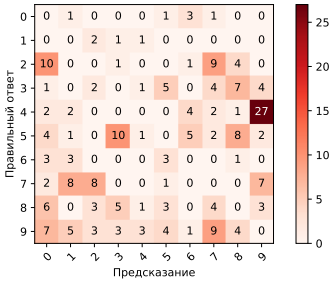


Рис. 11: Сдвиг на (1, 0) px

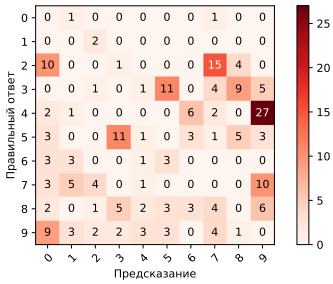
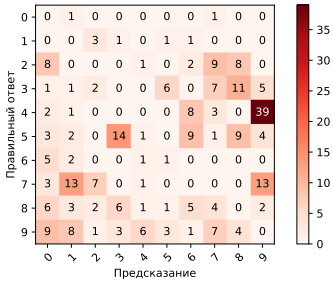


Рис. 12: Размытие Гаусса с $\sigma^2 = 0.5$



Размытие Гаусса с $\sigma^2 = 0.5$ хорошо справляется с ошибками вида 3-5, но очень плохо себя показало с 4-9. Этому есть объяснение – 4 и 9 и без преобразований очень похожи, а после размытия Гаусса эти цифры становятся практически не различимы

3 Сравнение экспериментов 5 и 6

Данные эксперименты можно сравнить по двум характеристикам:

- Затрачиваемая память:
  В условиях задачи тестовая выборка в несколько раз меньше, чем тренировочная, поэтому эффективнее увеличивать размеры именно теста.
- Точность алгоритма:
  Результаты измерений точности приведены в таблице 6

Таблица 6:

номер эксперимента	точность
5	**0.984**
6	0.976

4 Дополнение

4.1 Adversarial validation

Рассмотрим альтернативный способ валидации. Основная идея заключается в следующем: нужно добиться того, чтобы алгоритм не смог отличать тренировочную выборку от тестовой.
Для реализации этого нужно сформировать новую выборку $X = X_{train} \bigcup X_{test}$, где X_{train}, X_{test} – объекты тренировочной и тестовой выборок соответственно (без меток классов). Поставим каждому объекту из X_{train} в соответствие метку «0», а каждому из X_{test} – «1». Таким образом получена новая тренировочная

выборка, к которой можно применить метод кросс-валидации для оценки модели.

Выбор лучших параметров происходит на основе предсказаний модели для каждого фолда. За метрику качества удобнее всего брать площадь под кривой ошибок (**AUC ROC**).

Пусть даны две модели: M_1 и M_2; auc_roc_1, и auc_roc_2 – значения площадей под кривой ошибок, усредненные по фолдам для каждой из моделей соответственно. Тогда модель M_1 считается лучше модели M_2, если выполнено следующее неравенство:

$$|auc\_roc_1 - 0.5| < |auc\_roc_2 - 0.5|$$

С помощью представленного способа валидации будет более результативный отбор параметров аугментаций из экспериментов 2.5 и 2.6, так как он (способ) позволяет минимизировать отличия между тренировочной и тестовой выборок. Но есть и минус у **Adversarial validation** – обобщающая способность модели, настроенной по этому методу будет ниже, чем у модели, настроенной с помощью стандартного метода кросс-валидации, так как в первом случае она (первая модель) учитывает структуру тестовой выборки. Если новая тестовая выборка имеет совсем другое распределение, то первая модель с бóльшей вероятностью выдаст качество хуже, чем вторая.

4.2 Новые метрики расстояния

Были проведены эксперименты на лучшей модели 4-х ближайших соседей с весами на различных метриках[5]:

- **Расстояние Чебышева:** $\rho(x, y) = \max_{i \in \{1,\dots,d\}} |x_i - y_i|$, где $x, y \in \mathbb{R}^d$.
- **Манхэттенское расстояние:** $\rho(x, y) = \sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$, где $x, y \in \mathbb{R}^d$.
- **Расстояние Минковского:** $\rho(x, y) = \left(\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$, где $x, y \in \mathbb{R}^d, p \in \mathbb{R}$.

  Результаты экспериментов приведены в таблице 7 (результаты для евклидовой и косинусной метрик приведены для сравнения):

Таблица 7:

метрика	точность
Еквлидова	**0.9752**
Косинусная	0.9714
Чебышева	0.8265
Манхэттенское расстояние	0.9659
Расстояние Минсковского, p=3	0.9540

[5]Все метрики, описанные ниже, реализованы в модуле **distances.py**

4.3 Новые метрики качества

Были реализованы следующие метрики качества[6] алгоритма:

- **Precision:** $\frac{TP}{TP+FP}$
- **Recall:** $\frac{TP}{TP+FN}$
- **Specifity:** $\frac{TN}{TN+FP}$
- **F1 Score:** $\frac{2\times Recall\times Precision}{Recall+Precision}$

Пояснение обозначений: допустим, что решается задача многоклассовой классификации, где $Y = \{y_1, \ldots, y_m\}$ – множество уникальных классов. Каждая из представленных выше метрик считается отдельно $\forall y_j, j \in 1, \ldots, m$.

Рассмотрим их вычесление для конкретного класса y_j:

- **TP(True Positive)** – количество объектов класса y_j, которым алгоритм поставил метку y_j
- **FP(False Positive)** – количество объектов, **не** принадлежащих классу y_j, которым алгоритм поставил метку y_j
- **FN(False Negative)** – количество объектов класса y_j, которым алгоритм поставил метку, отличную от y_j
- **TN(True Negative)** – количество объектов, **не** принадлежащих классу y_j, которым алгоритм поставил метку, отличную от y_j

4.4 Ансамбль алгоритмов

В данной части реализован простейший ансамбль алгоритмов[7] – пусть имеется множество моделей $M_1, \ldots, M_t$ и соответсвенно их предсказания $pred_1, \ldots, pred_t$ на тестовом объекте $x \in X_{test}$, где $X_{test} \in \mathbb{R}^{q\times d}$. Тогда предсказание ансабля моделей для объекта x определяется следующим образом:

$$pred(x) = \arg\max_c g_c(x)$$

, где $g_c(x) = \sum_{m=1}^{t} w_k \times \mathbb{1}[pred_m = c], c = 1, 2, \ldots, C$, где w_k - некоторые веса (например, прямо пропорциональные качеству на кросс-валидации), C - количество классов.

В результате перебора различных вариаций ансамбля моделей удалось улучшить точность (accuracy):

Анализ результата:

Ансамбль моделей помог улучшить точность, но эта разница совсем маленькая, а для её получения потребовалось в 4 раза больше времени. В рамках данной задачи лучше использовать одну модель.

[6] Все метрики качества, описанные ниже, реализованы в модуле **metrics.py**.

[7] Реализован в модуле **ensemble.py**

количество моделей	точность
1	0.9843
4	**0.9844**