Классификация: общие принципы

Жилин Сергей Иванович
Алтайский государственный университет

План

- Классификация: общие принципы
- Кластеризация методом *K* средних
- Классификация методом SIMCA

Классификация: постановка задачи

- **Можно** ли по спектру отличить кетон от эфира?
- **Можно** ли определить пол человека по его ответам на вопросы анкеты об автомобилях?
- **Можно** ли по хроматограмме узнать происхождение вина и если да, то **какие** именно особенности хроматограммы позволяют это сделать?
- **Как**, зная размеры лепестков, определить к какому виду относится изучаемый цветок?
- **Как** зная содержание элементов в почве определить из какого она района?

Этапы классификации

Кластеризация (классификация без обучения)
изучение исходных данных на предмет наличия в них групп, классов и определение признаков, которые за это отвечают

Построение модели (классификация с обучением)
нахождение зависимости между значениями признаков объектов и принадлежность их к определенной группе

Классификация новых образцов (распознавание образов)
отнесение неизвестных образцов к одному из известных классов

Алгоритмы классификации

Без обучения (**Unsupervised**)	С обучением (**Supervised**)
Априори не известно существуют ли скрытые группы в данных и сколько их **Основной механизм** – поиск аналогий в поведении значений параметров объектов **Основная цель** – установить наличие групп (классов), а так же причину – переменные или их комбинации, которые на это влияют (являются схожими для объектов той или иной группы)	Априори известно о том, какой группе принадлежит объекты из исходного набора данных **Основной механизм** – построение модели, связывающей значения параметров объектов образующих ту или иную группу **Основная цель** – использование полученной модели для классификации новых образцов

С чем работаем?

- **Объект** — все, что угодно: пациент, вещество, предмет, *пиксел*, *изображение* и т.д.
- **Вектор признаков** — набор значений переменных, характеризующих объект
- **Группа или класс** — совокупность объектов обладающих схожими характеристиками, например (все или только некоторые) значения признаков которых лежат в определенных границах

Пример:

объект — человек

вектор признаков — рост, вес, длина волос, умение плавать, размер обуви, кулинарные предпочтения

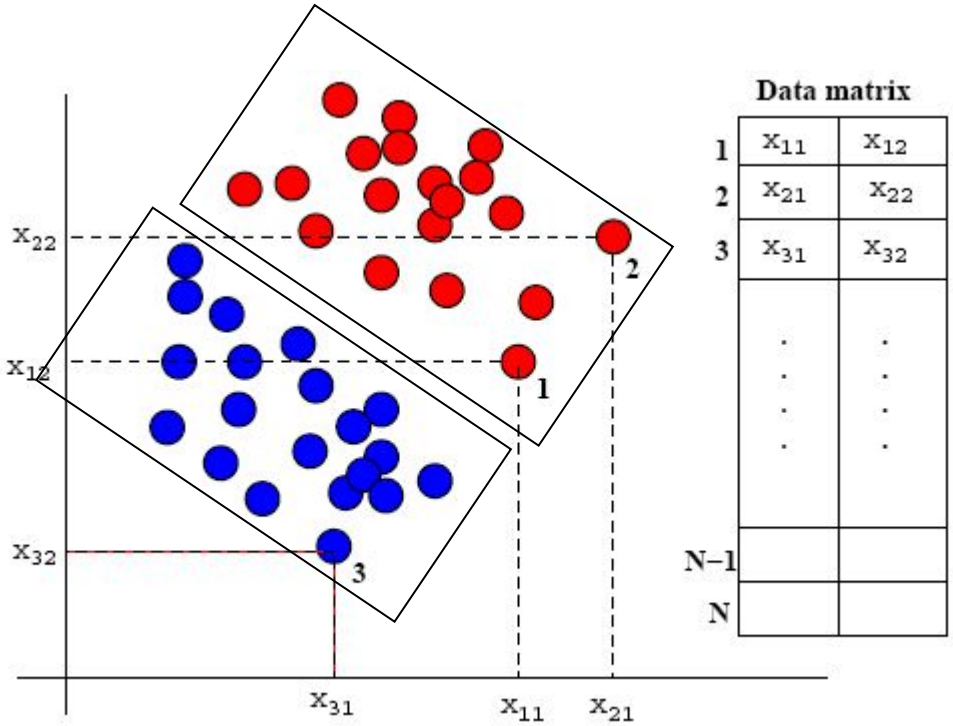
возможные группы — по полу, по материку, по стране и т.п.

Геометрическая интерпретация

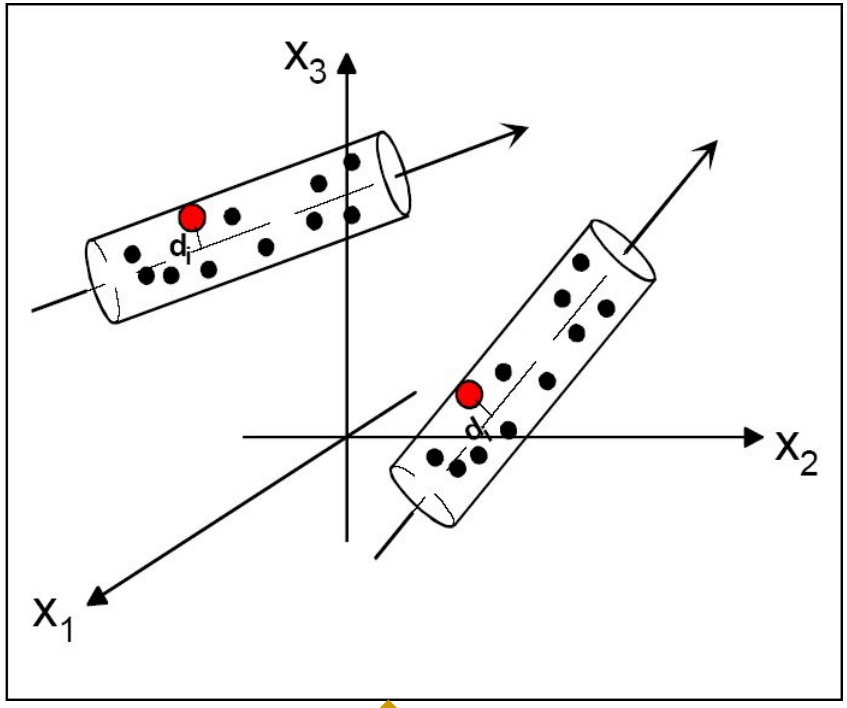
Вектор признаков – переменные (степени свободы) образующие *N*-мерную систему координат (*N* – число переменных в векторе признаков)

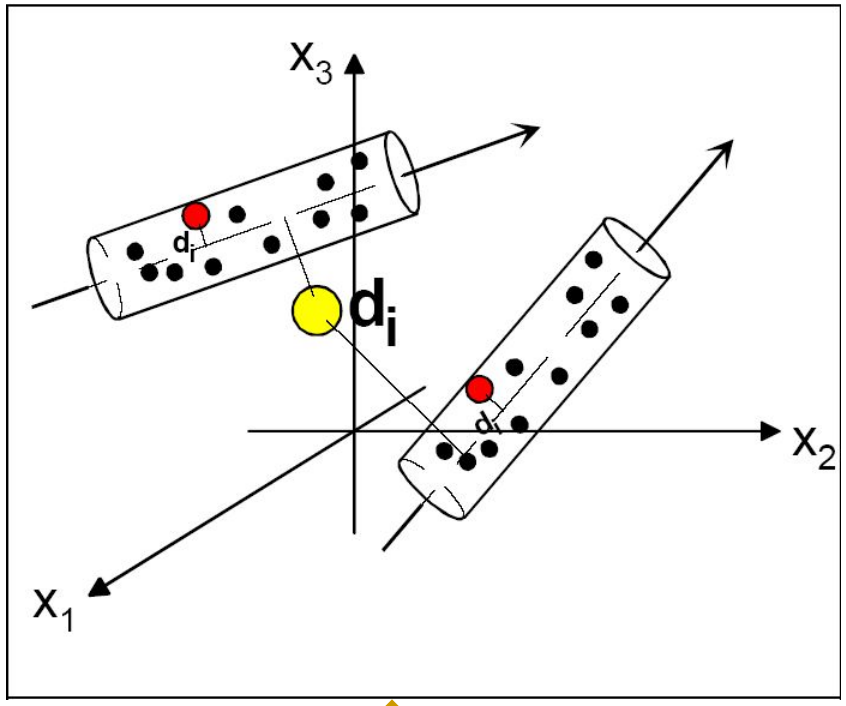
Объекты – точки в пространстве признаков

Группы или классы – части пространства признаков



Возможные ситуации

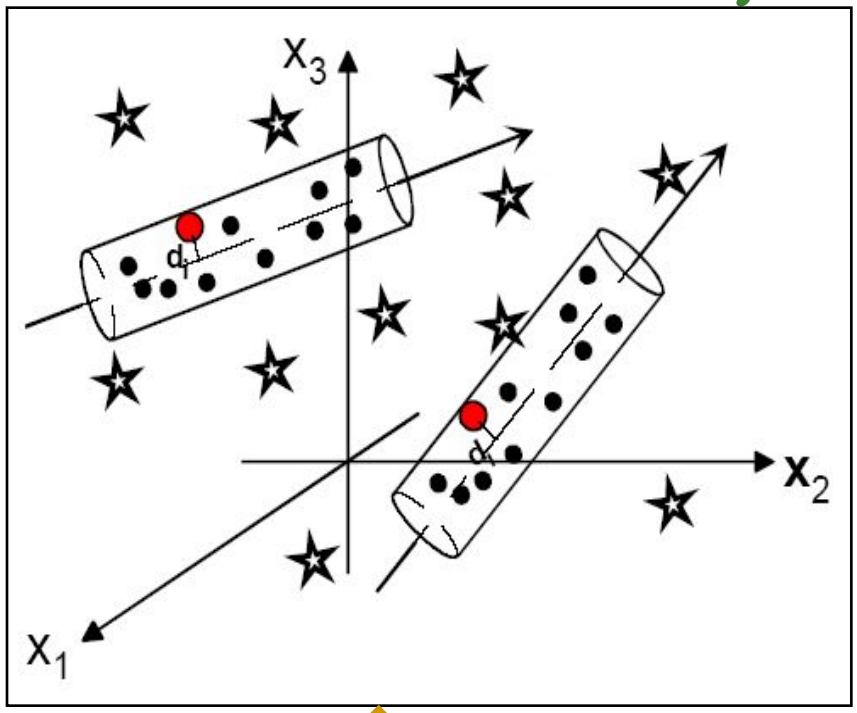


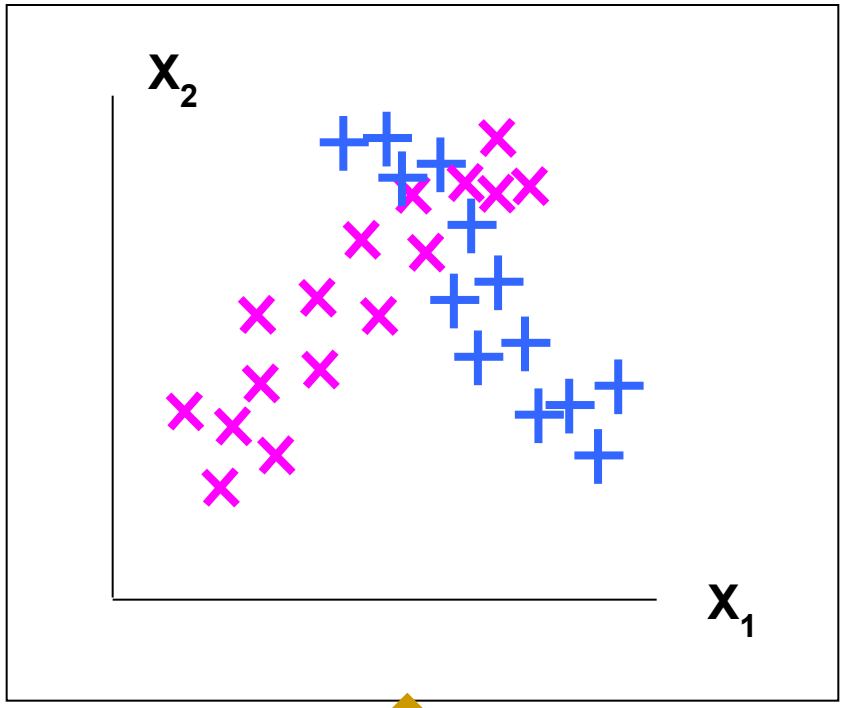


Идеальный случай разделения

Имеются выбросы

Возможные ситуации



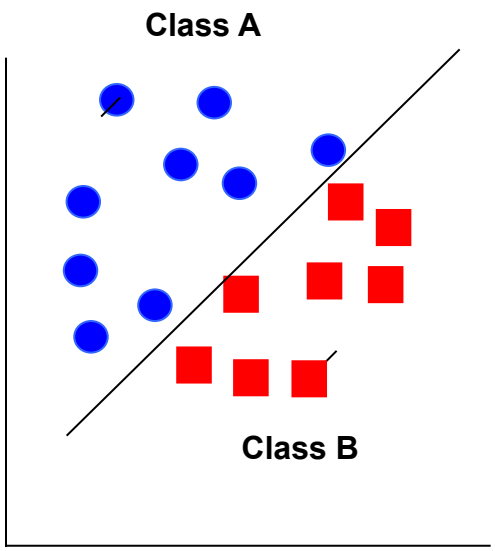


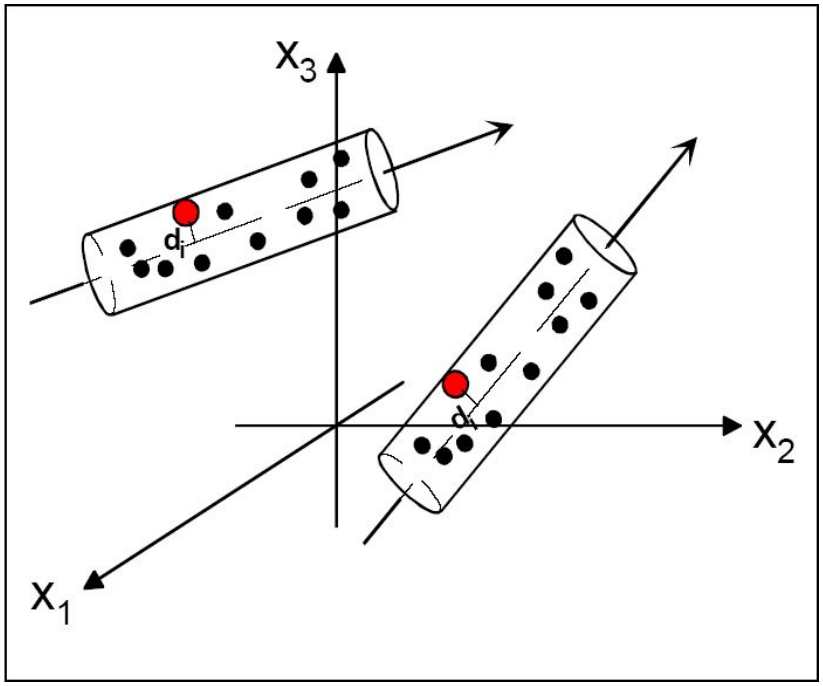
Один из классов не имеет четкой структуры

Классы перекрываются

Геометрическая интерпретация

- Как задать классы?
  1. Явное задать границы части пространства, соответствующей классу (полупространство, гиперсфера, гиперпрямоугольник, и т.п.)

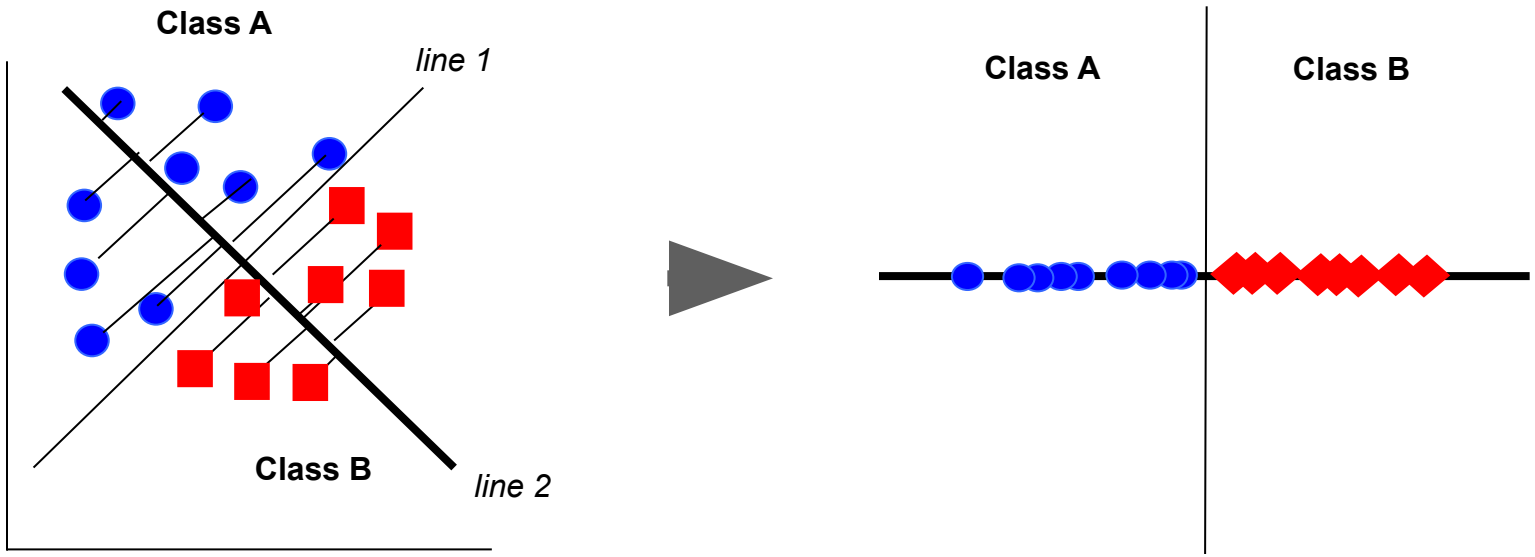




Геометрическая интерпретация

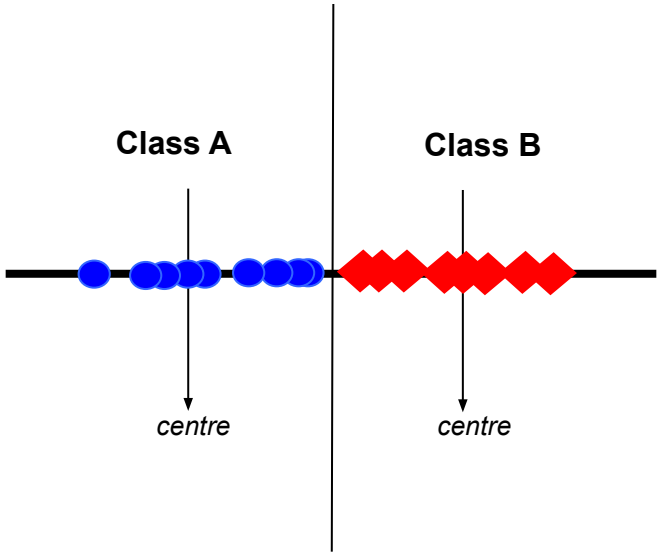
- Как задать классы?
  1. Явное задать границы части пространства, соответствующей классу (полупространство, гиперсфера, гиперпрямоугольник, и т.п.)

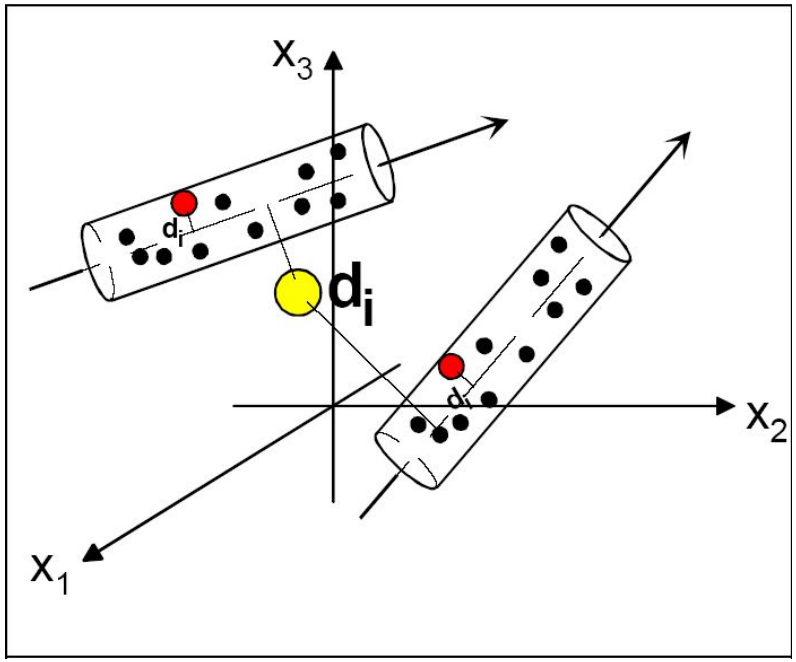
     Часто удобнее оперировать проекциями объектов



Геометрическая интерпретация

- Два подхода к заданию классов:
  2. Степень принадлежности классу определяется расстоянием до класса (до центра, до «каркаса», до границы)



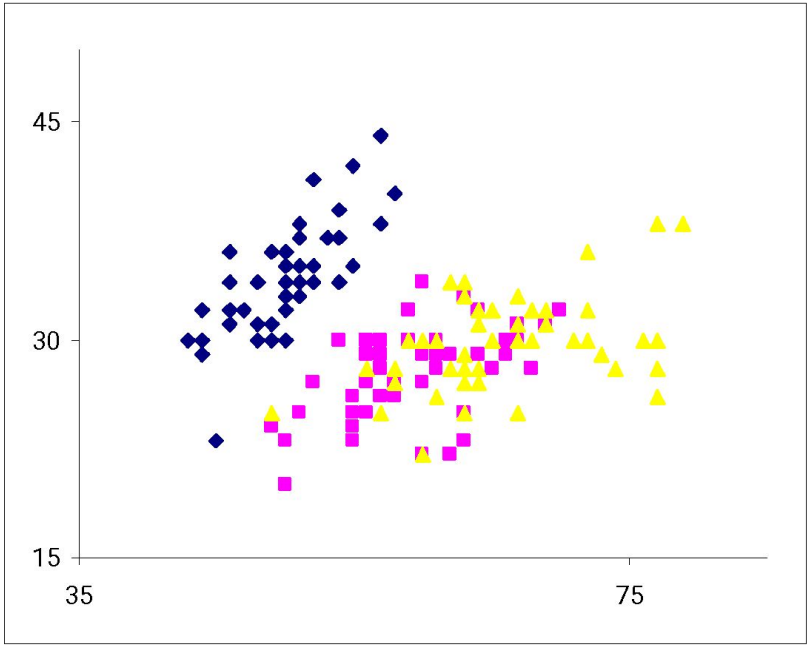


Геометрическая интерпретация

- Два подхода к заданию классов:

  2. Степень принадлежности классу определяется расстоянием до класса (до центра, до «каркаса», до границы)

  Особенно актуально для ситуаций, когда классы перекрываются



Геометрическая интерпретация

- Два подхода к заданию классов:
  2. Степень принадлежности классу определяется расстоянием до класса (до центра, до «каркаса», до границы)

     Особенно актуально для ситуаций, когда классы перекрываются

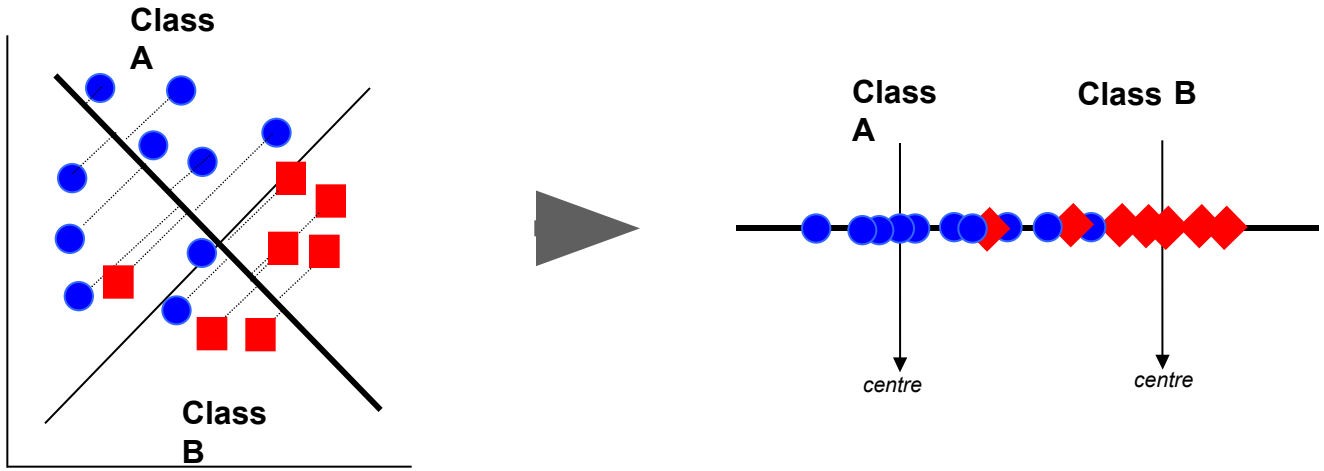


График расстояний

- Для проекций объектов

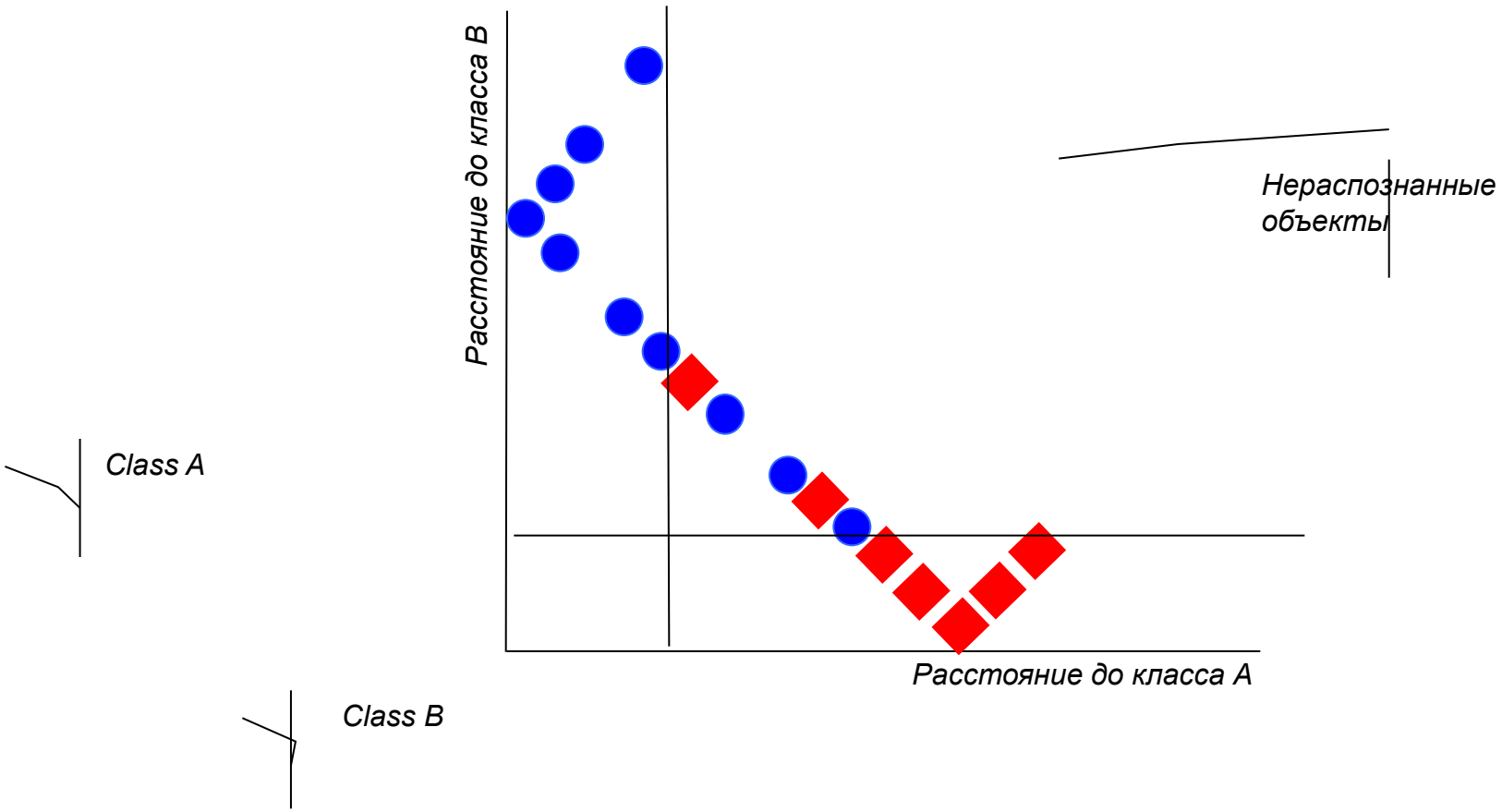
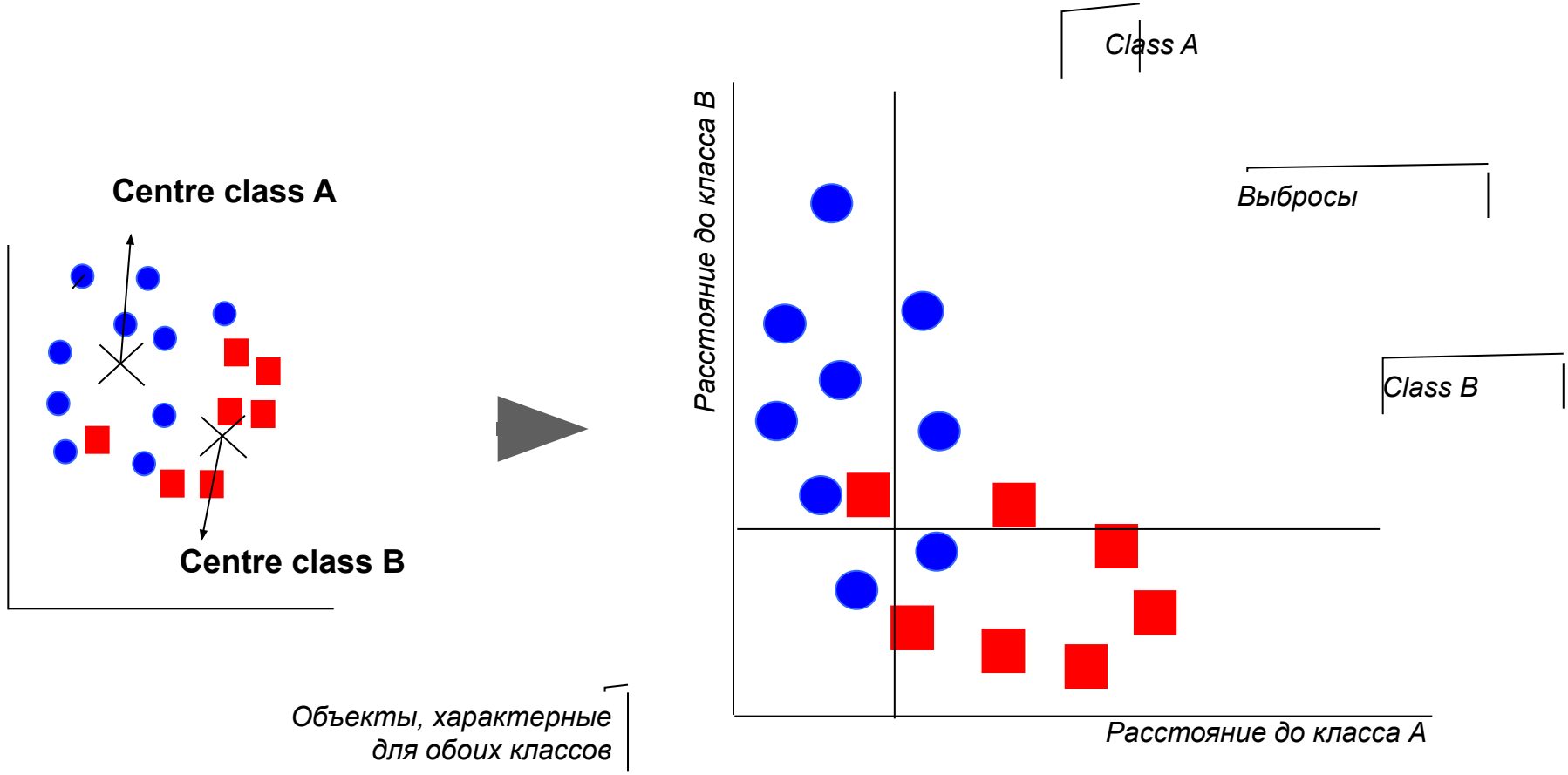


График расстояний

- В исходном пространстве характеристик



Расстояние в пространстве характеристик

- Расстояние может задаваться разными метриками!

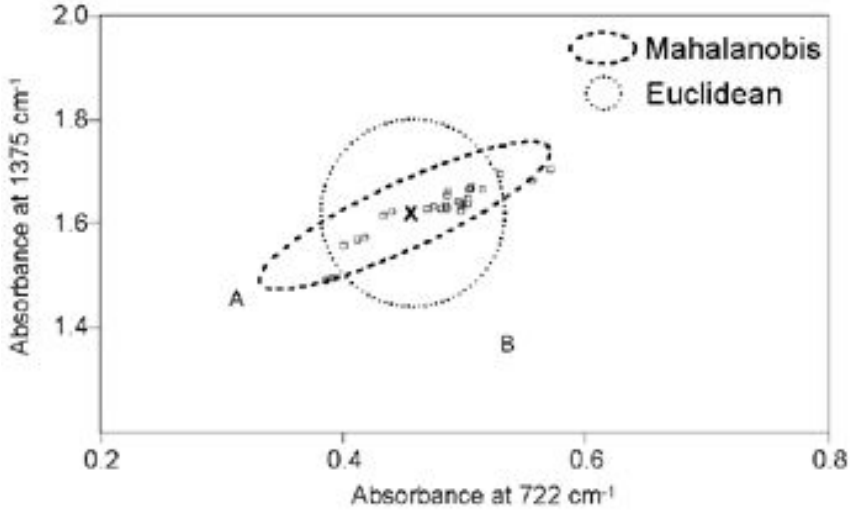
- Евклидова метрика: $d_{kl} = (\mathbf{x_k} - \mathbf{x_l})(\mathbf{x_k} - \mathbf{x_l})'$
  - Каждая переменная вектора признаков дает одинаковый вклад наряду с остальными (признаки ортогональны)
  - Если между переменными имеется корреляция то они будут иметь непропорциональное влияние на результаты анализа

- Метрика Махалонобиса: $d_{kl} = (\mathbf{x_k} - \mathbf{x_l})C^{-1}(\mathbf{x_k} - \mathbf{x_l})'$

  (C – ковариационная матрица)
  - Учитывает возможную корреляцию между переменными
  - Если корреляция между переменными отсутствует, то расстояние Махаланобиса равно расстоянию Евклида

Расстояние в пространстве характеристик

- Расстояние может задаваться разными метриками!
  - Евклидова метрика и метрика Махалонобиса:



Расстояние в пространстве характеристик

- Расстояние может задаваться разными метриками!

1. Euclidean Distance (L2)
2. City Block Distance
3. Canberra Metric
4. Histogram Intersection
5. Jeffrey Divergence
6. Bhattacharyya Distance
7. Chi-Square
8. Bray Curtis Distance
9. Angular Separation Distance
10. Chord Distance
11. Non-Correlation
12. Matusita Distance
13. Soergel
14. Wave-Hedges
15. WED Distance
16. Kolmogorov-Smirnov Statistic
17. Kuiper
18. Mean Distance

Виды ошибок

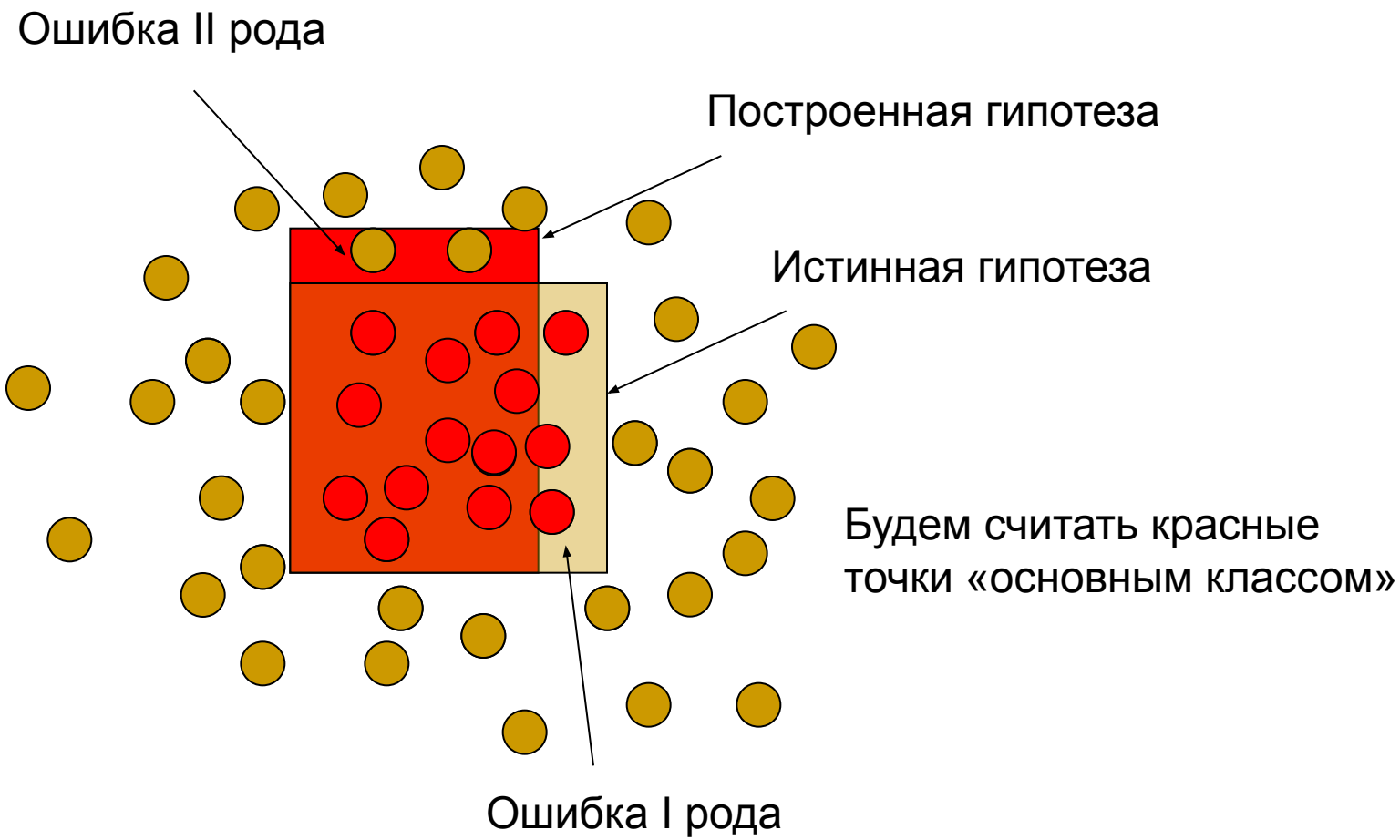
- Измерения ошибки как «вероятности выдать неверный ответ» может быть не всегда достаточно
  - 15% ошибки при постановке диагноза может означать как и то что, 15 % больных будут признаны здоровыми (и возможно умрут от отсутствия лечения), так и то, что 15% здоровых больными (и деньги на лечение будут потрачены зря)

- При неравнозначности ошибок для разных классов вводят понятие ошибки первого и второго рода и замеряют их по отдельности

Ошибки I и II рода

- Пусть, существует «основной класс»
  - Обычно, это класс, при обнаружении которого, предпринимается какое-либо действие;
  - Например, при постановке диагноза основным классом будет «болен», а вторичным классом «здоров».
- Ошибка первого рода – принять основной класс за вторичный
  - Вероятность «промаха», когда искомый объект будет пропущен
- Ошибка второго рода равна вероятности принять вторичный класс за основной
  - Вероятность «ложной тревоги», когда за искомый объект будет принят «фон»

Ошибки I и II рода



Ошибки I и II рода

- Что считать основным классом зависит полностью от прикладной специфики

- Особенно важно оценивать ошибки I и II рода раздельно при несбалансированности классов:
  - Пусть
    $$P(y=+1)=0.01; \qquad P(y=-1)=0.99$$
  - Тогда при нулевой ошибке II рода и ошибке I рода 0.5
    $$P(a(x)=-1 \mid y=+1)=0.5$$
  - Общая ошибка всего лишь
    $$P(a(x)\neq y)=0.005$$

Чувствительность vs Избирательность

- Чувствительность – вероятность дать правильный ответ на пример основного класса

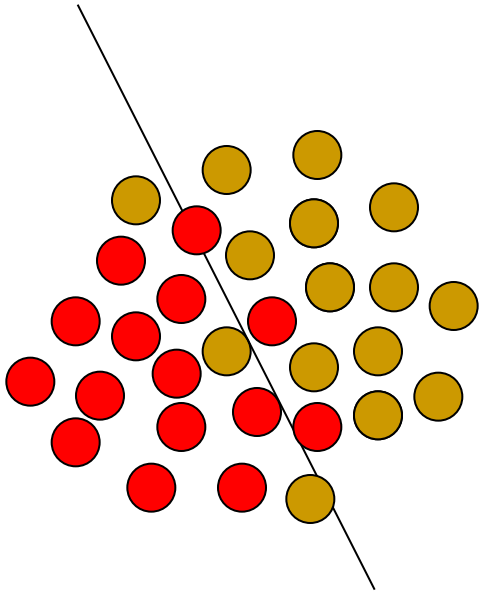
$$sensitivity = P(a(x) = y \mid y = +1)$$

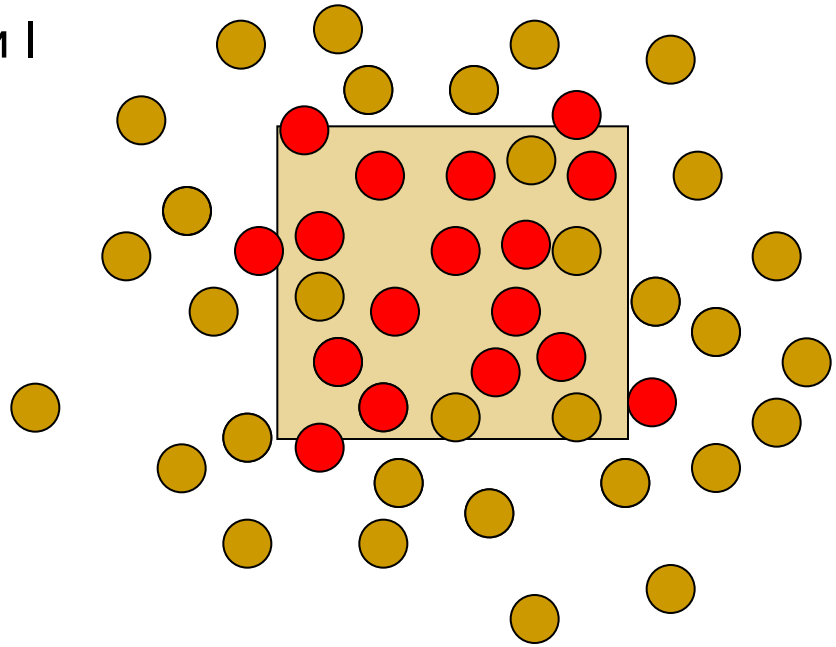
- Избирательность – вероятность дать правильный ответ на пример вторичного класса

$$specificity = P(a(x) = y \mid y = -1)$$

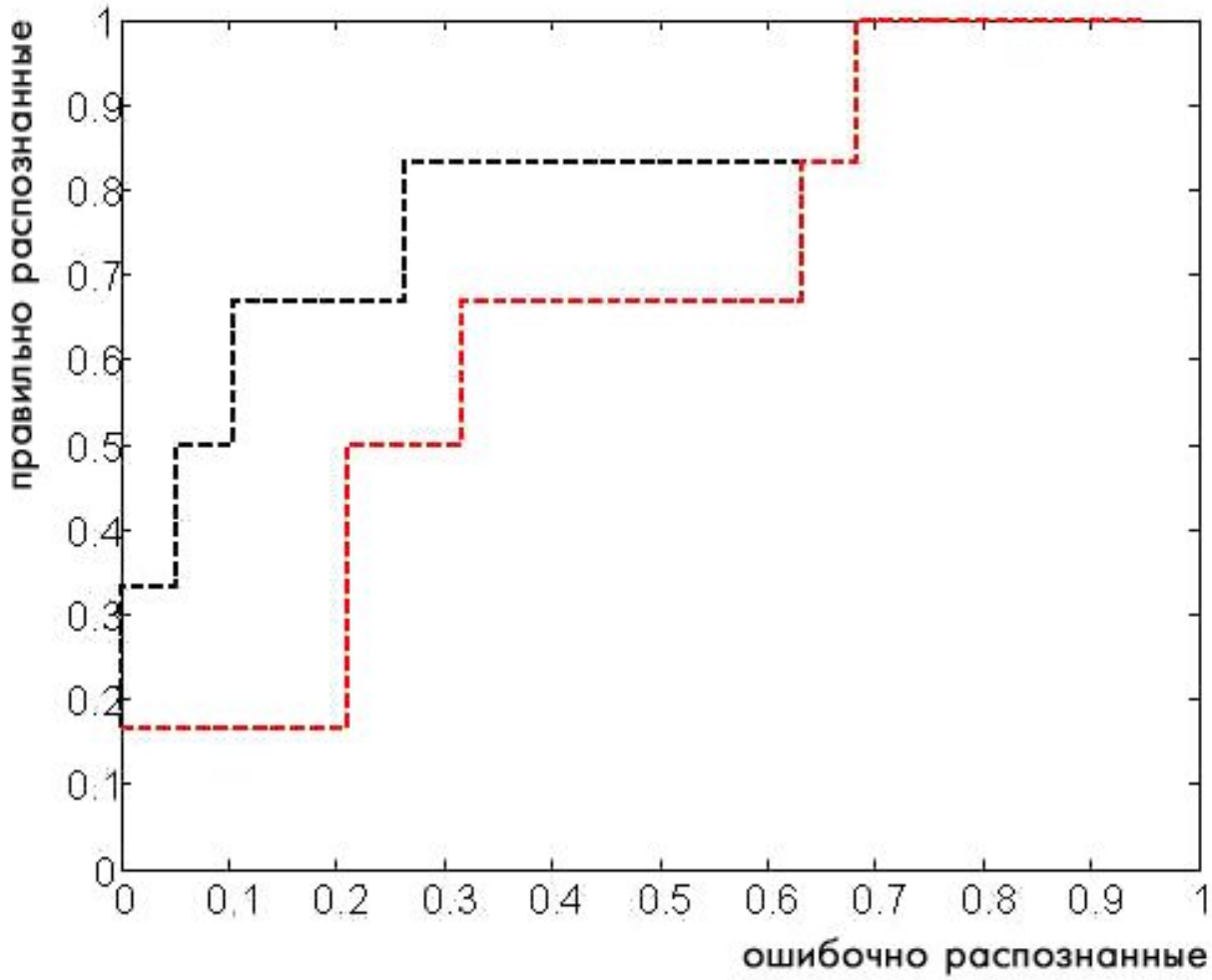
Регулировка баланса

- Почти все алгоритмы классификации допускают регулировку соотношения ошибки I и II рода за счет варьирования некоторого параметра



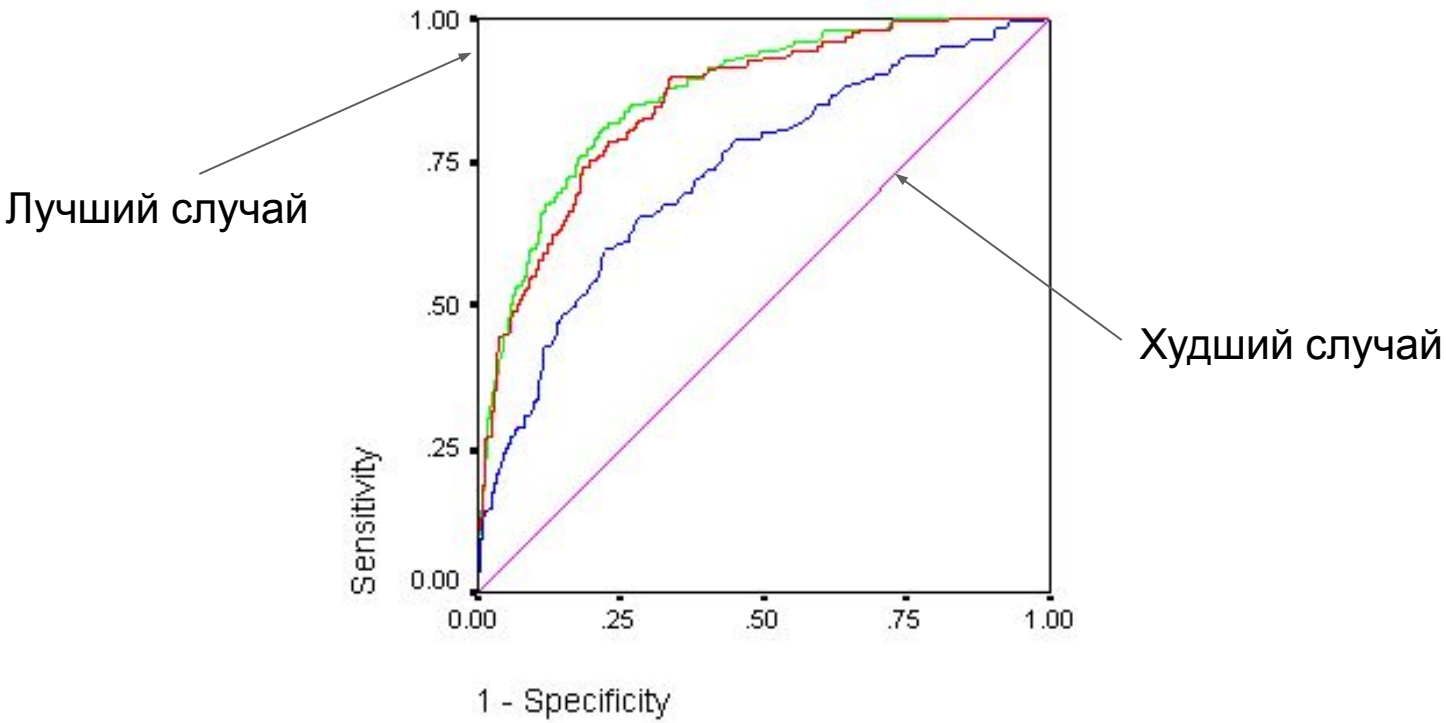


Кривая мощности критерия



ROC-кривая

- ROC – Receiver Operating Characteristic curve
  - Кривая, отражающая зависимость чувствительности и ошибки второго рода

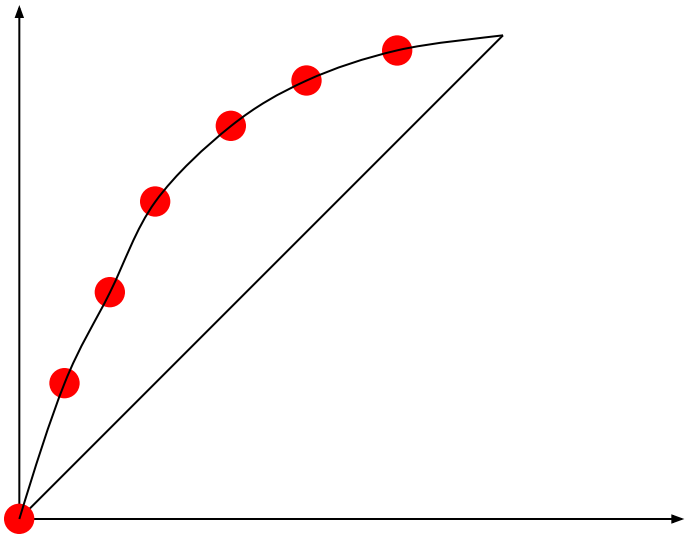


Построение ROC-кривой

- Для различных значений параметра строится таблица ошибок
  - Сам параметр в таблице не участвует!
  - Классификатор строится и оценивается на разных выборках!

Sensitivity	False Positive
0.0	0.0
0.25	0.5
0.5	0.8
…	…
1.0	1.0

- По таблице строится набор точек в плоскости sensitivity/FP
  - Каждая строка таблицы - точка
- По точкам строится кривая



Анализ ROC кривой

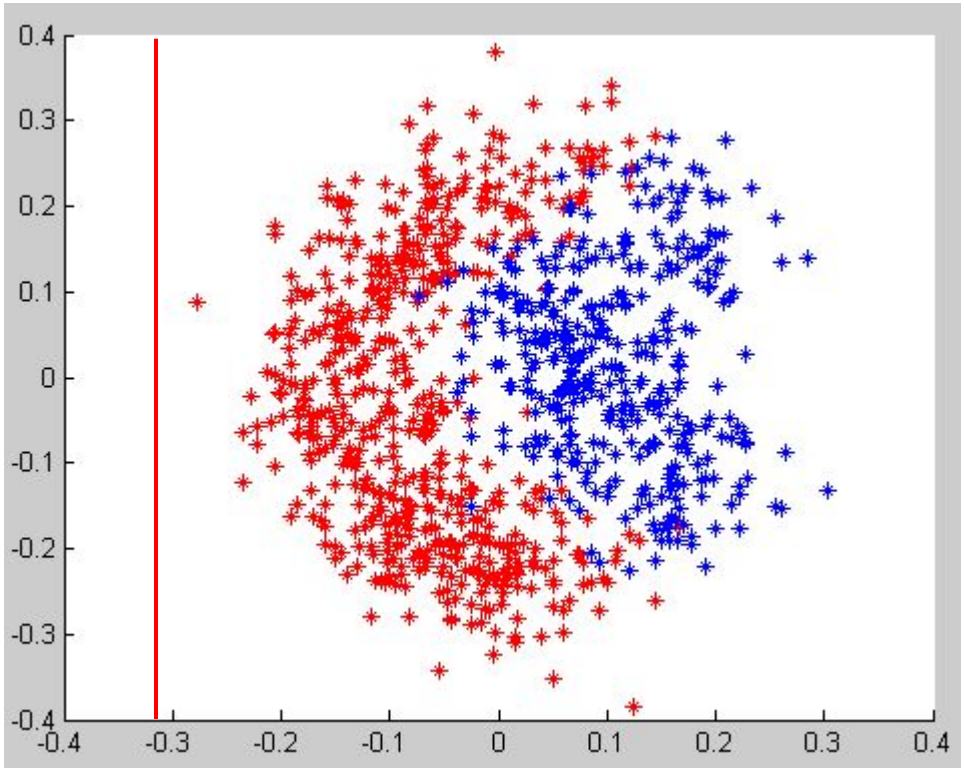
- Площадь под графиком – AUC
  - Дает некоторый объективный показатель качества классификатора
  - Позволяет сравнивать разные кривые

- Соблюдение требуемого значения ошибок I и II рода
  - Зачастую, для конкретной задачи существуют рамки на ошибку определенного рода. С помощью ROC можно анализировать возможность текущего решения соответствовать требованию

ROC: построение таблицы

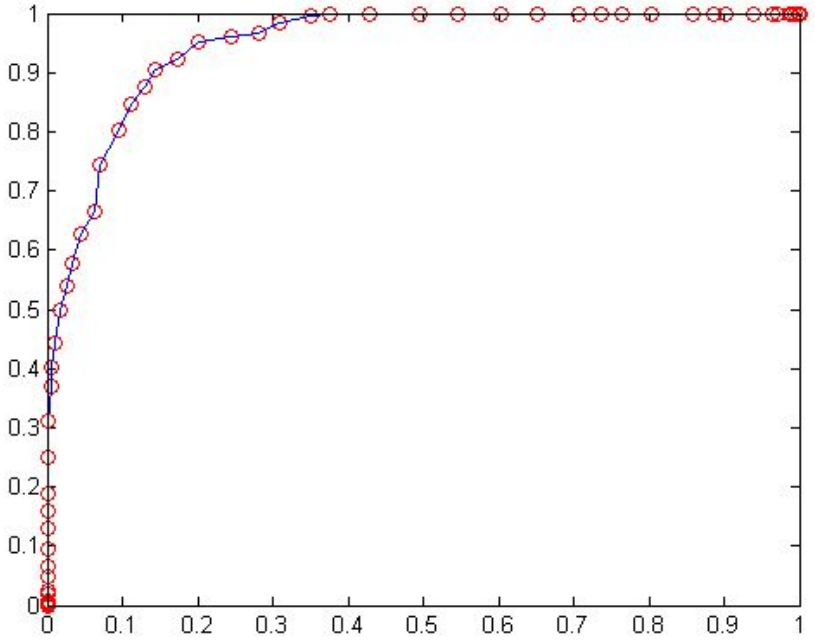
- Меняем порог и оцениваем ошибку

Sensitivity	False Positive
0.0	0.0
0.25	0.5
0.5	0.8
…	…
1.0	1.0



ROC: построение кривой

- По таблице строим точки
- Точки интерполируем кривой



Этапы классификации

I. Выявление групп

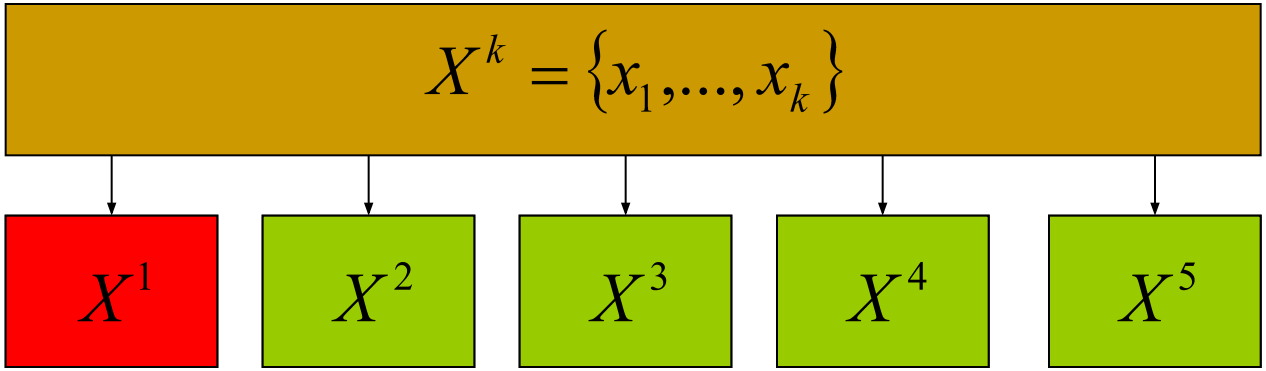
- МГК
- Факторный анализ
- Кластерный анализ
- …

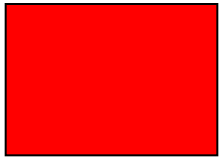
II. Построение модели

III. Классификация новых образцов

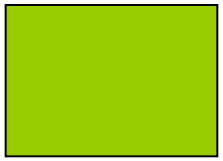
- SIMCA
- PLS-DA
- …

Перекрестная проверка (cross-validation)



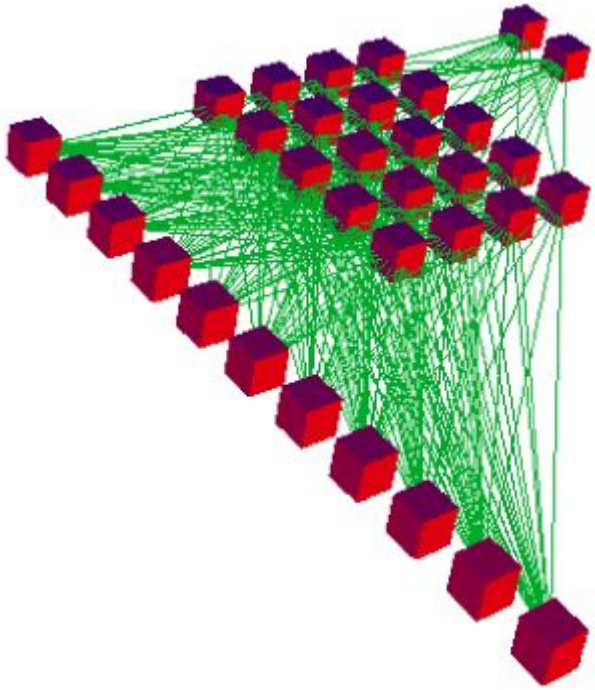


Контроль



Обучение

Итоговая ошибка – средняя ошибка по всем итерациям

Другие методы классификации с обучением

- Статистические методы
- Нейронные сети
- Деревья классификации
- Бустинг (комитеты решающих правил)
- Метод опорных векторов