

Основы машинного обучения

Лекция 3

Метод k ближайших соседей

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2024

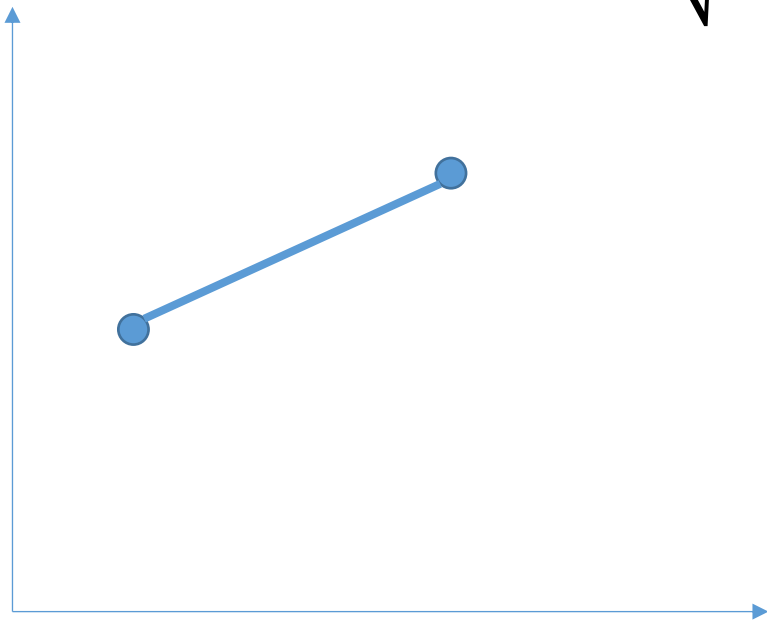
Сравнение объектов и метрики

Числовые данные

Сколько раз в день вызывает такси	Средние расходы на такси в день	Как часто вызывал комфорт	Возраст	Согласился повысить категорию?
2	400	0.3	29	да
0.3	80	0	28	нет
...

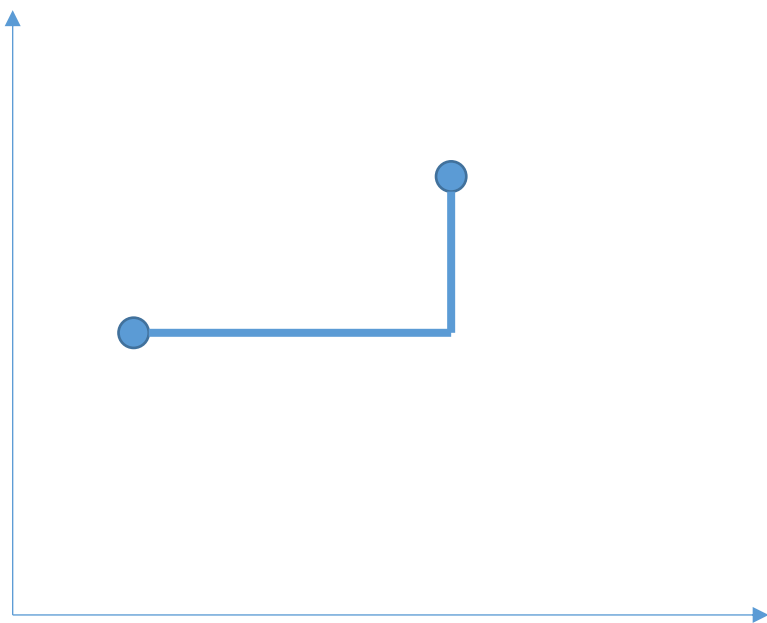
Евклидова метрика

$$\rho(x, z) = \sqrt{\sum_{j=1}^d (x_j - z_j)^2}$$



Манхэттенская метрика

$$\rho(x, z) = \sum_{j=1}^d |x_j - z_j|$$



Обобщение

$$\rho(x, z) = \sqrt[p]{\sum_{j=1}^d |x_j - z_j|^p}$$

- Метрика Минковского
- Можно подбирать p под конкретную задачу

Категориальные данные

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет
...

Считающая метрика

- Простейшая метрика: подсчёт различий

$$\rho(x, z) = \sum_{j=1}^d [x_j \neq z_j]$$

Что ещё?

- Текстовые данные — чуть-чуть изучим в курсе, подробно потом
- Изображения — потом

Измерение ошибки модели

Вопросы

- Как сравнить две модели?
- Как подобрать k и метрику?

Функция потерь для классификации

- Частый выбор — бинарная функция потерь

$$L(y, a) = [a \neq y]$$

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

Функция потерь для классификации

ВАЖНО

Accuracy — не точность!

Accuracy

$a(x)$	y
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

Accuracy

$a(x)$	y
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

Доля ошибок: 0.2

Доля верных ответов: 0.8

Accuracy

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

Решаем задачу выявления редкого заболевания

- 950 здоровых ($y = +1$)
- 50 больных ($y = -1$)

Модель: $a(x) = +1$

Доля ошибок: 0.05

Accuracy

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Всегда смотрите на баланс классов!
- Доля верных ответов не обязательно меняется от 0.5 до 1 для разумных моделей

Как выбрать k?

Обучающая выборка

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет
Комфорт	Строгино	Карта	да

Применяем модель:

Эконом	Таганская	Карта	?
--------	-----------	-------	---

Как выбрать k ?

Обучающая выборка

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет
Комфорт	Строгино	Карта	да

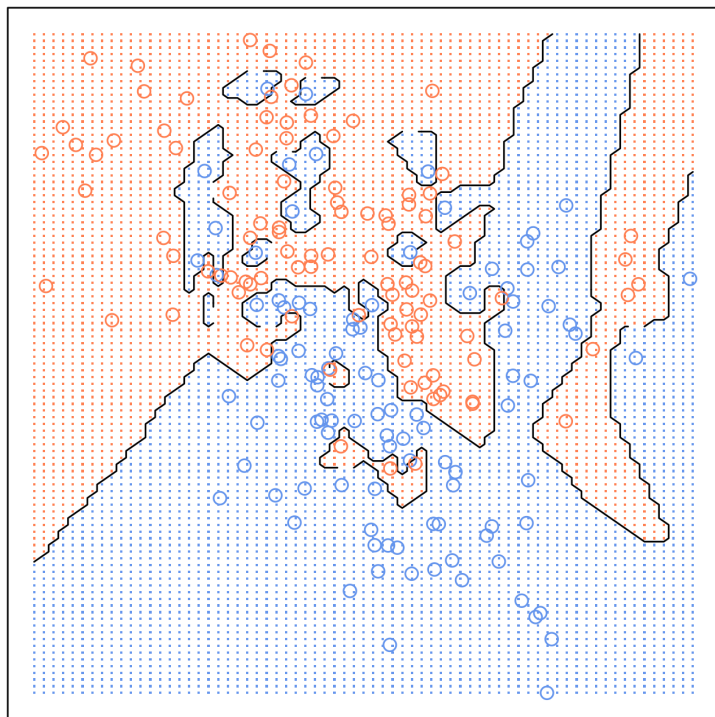
Применяем модель:

Эконом	Таганская	Карта	да
--------	-----------	-------	----

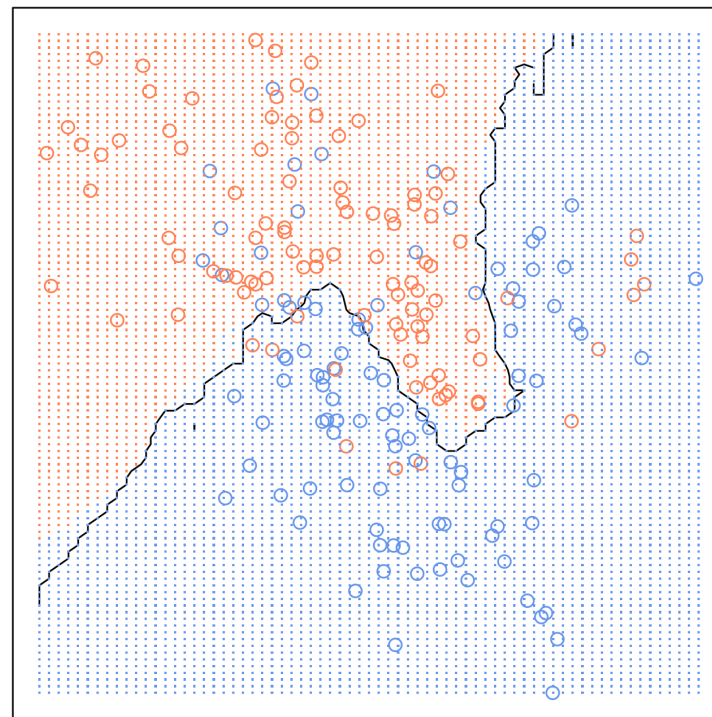
С точки зрения качества на обучающей выборке лучший выбор $k = 1$

Как выбрать k ?

1-nearest neighbours



20-nearest neighbours



<https://kevinzakka.github.io/2016/07/13/k-nearest-neighbor/>

Гиперпараметры

- Нельзя подбирать k по обучающей выборке — **гиперпараметр**
- Нужно использовать дополнительные данные

Обобщающая способность

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с
занятий

Разобраться в предмете и
усвоить алгоритмы решения
задач

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с
занятий

Разобраться в предмете и
усвоить алгоритмы решения
задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с
занятий

Разобраться в предмете и
усвоить алгоритмы решения
задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Хорошее качество на обучении
Низкое качество на новых данных

Хорошее качество на обучении
Хорошее качество на новых
данных

Отложенная выборка



Обучение



Тест

Отложенная выборка



- Слишком большое обучение — тестовая выборка нерепрезентативна
- Слишком большой тест — модель не сможет обучиться
- Обычно: 70/30, 80/20

Кросс-валидация

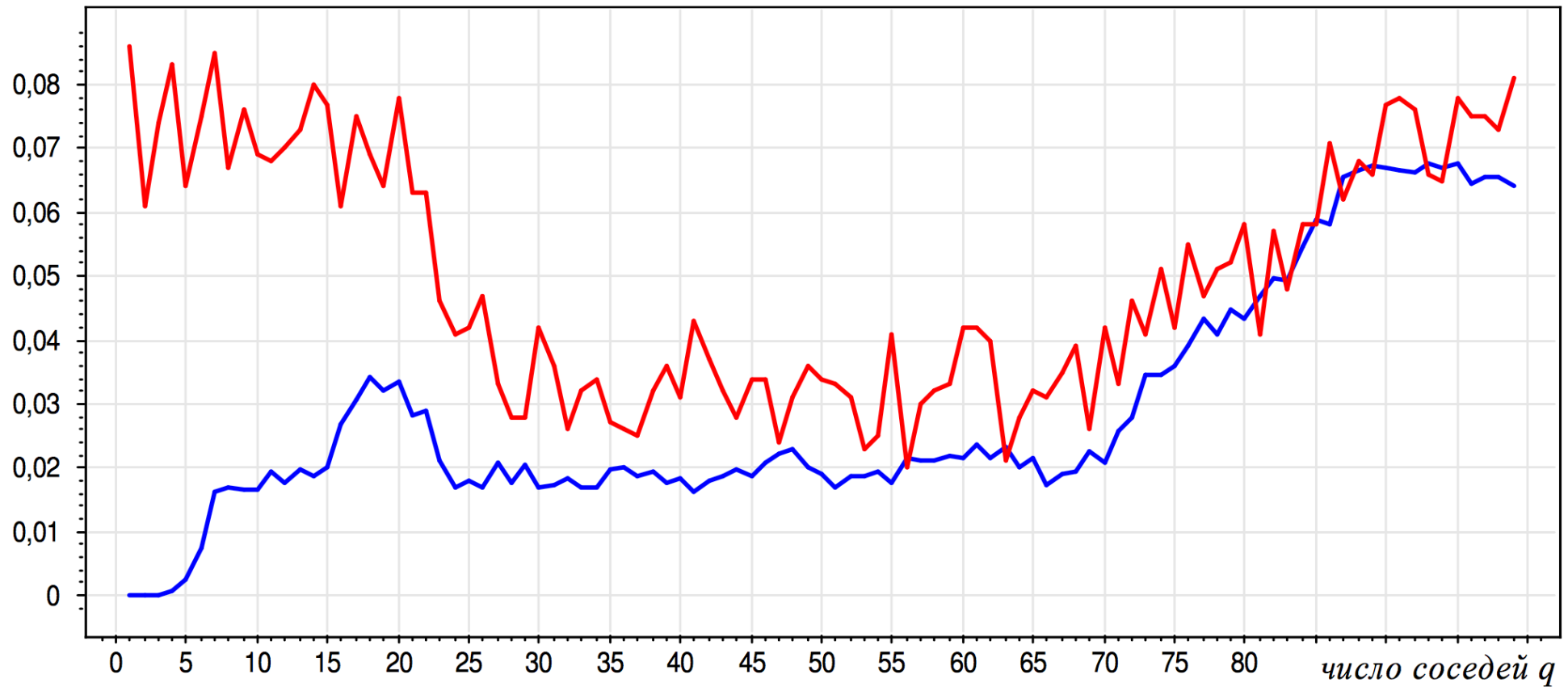


Кросс-валидация

- Надёжнее отложенной выборки, но медленнее
- Параметр — количество разбиений n (фолдов, folds)
- Хороший, но медленный вариант — $n = \ell$ (leave-one-out)
- Обычно: $n = 3$ или $n = 5$ или $n = 10$

Подбор числа соседей

частота ошибок



<http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=МО>

Чуть больше терминов

- После подбора всех гиперпараметров стоит проверить на совсем новых данных, что модель работает
- Обучающая выборка — построение модели
- Валидационная выборка — подбор гиперпараметров модели
- Тестовая выборка — финальная оценка качества модели