Основы машинного обучения

Лекция 2

Метод k ближайших соседей

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2025

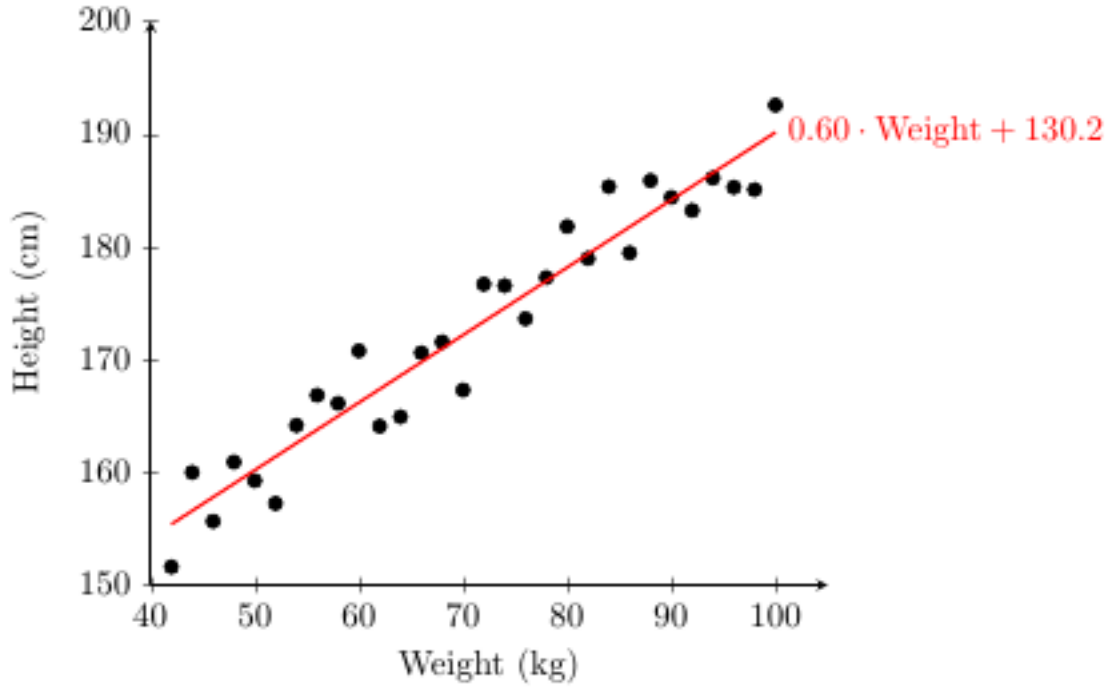
Напоминание

- $\mathbb{X}$ — пространство объектов, $\mathbb{Y}$ — пространство ответов
- $x = (x_1, \dots, x_d)$ — признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ — обучающая выборка
- $a(x)$ — алгоритм, модель
- $Q(a, X)$ — функционал ошибки алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$

Типы ответов

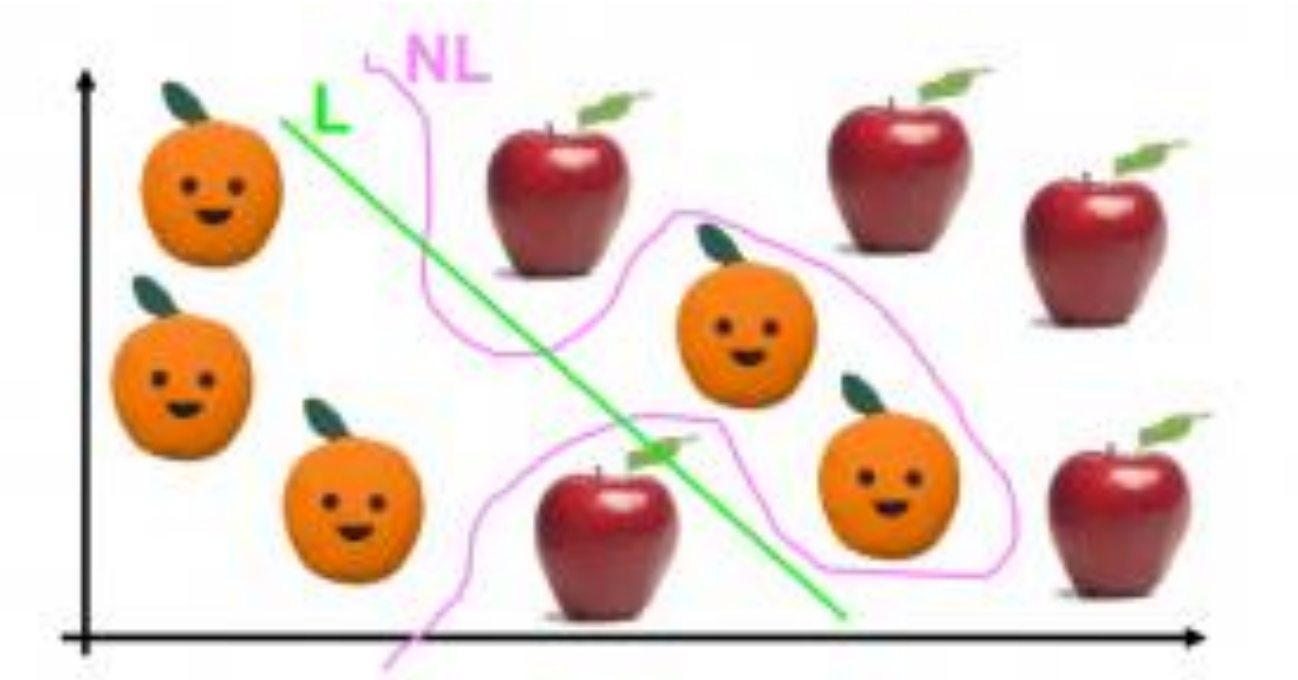
Регрессия

- Вещественные ответы: $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$
- (вещественные числа — числа с любой дробной частью)
- Пример: предсказание роста по весу



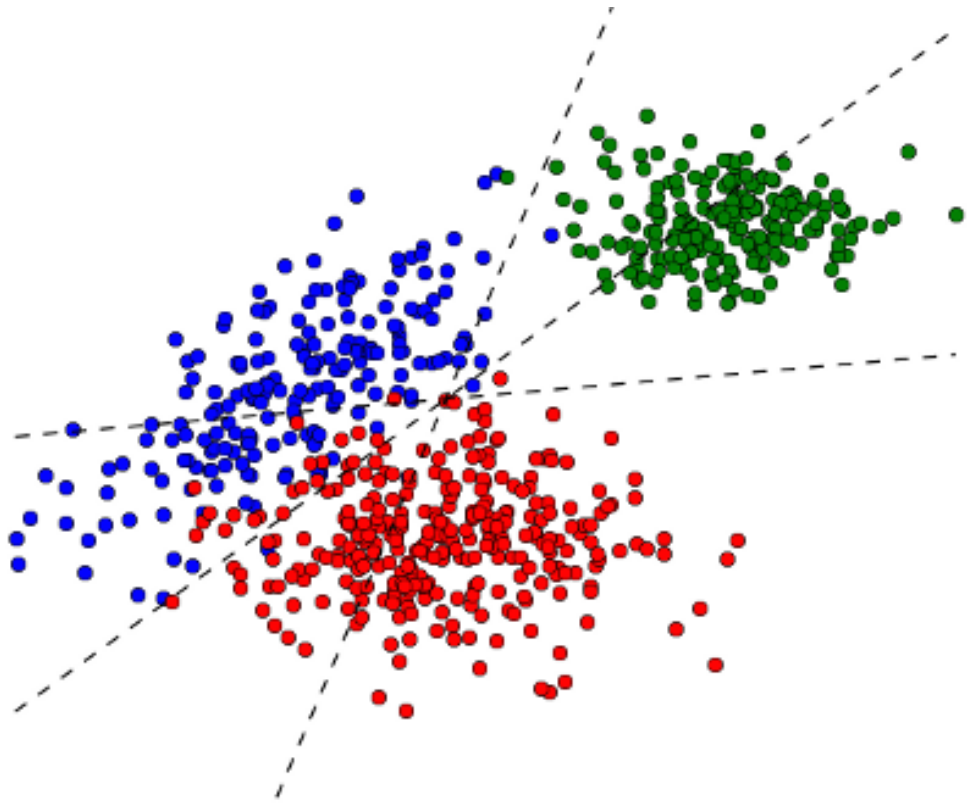
Классификация

- Конечное число ответов: $|\mathbb{Y}| < \infty$
- Бинарная классификация: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$



Классификация

- Многоклассовая классификация: $\mathbb{Y} = \{1, 2, \dots, K\}$



Классификация

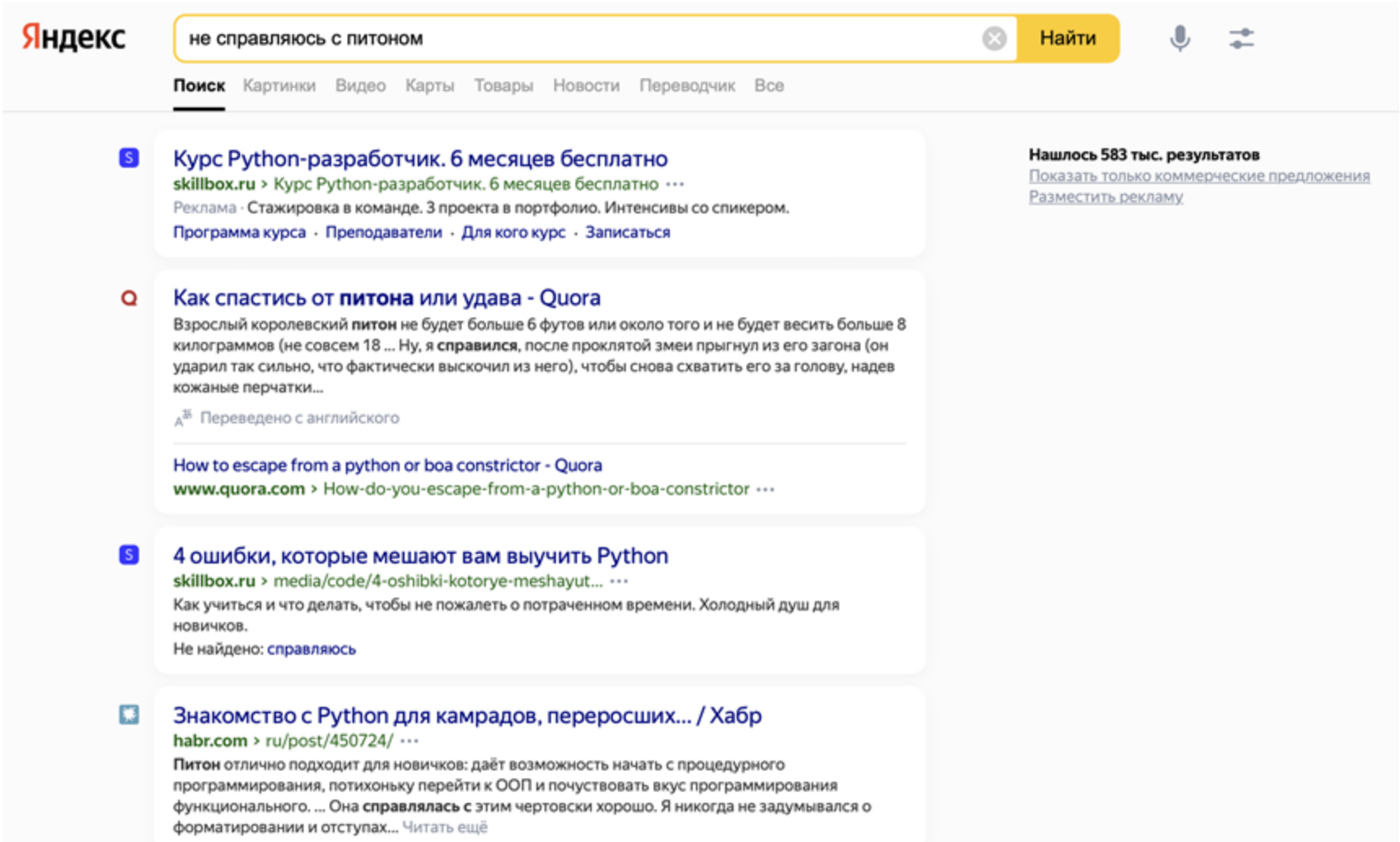
- Классификация с пересекающимися классами: $\mathbb{Y} = \{0, 1\}^K$
  - (multi-label classification)
- Ответ — набор из К нулей и единиц
- i-й элемент ответа — принадлежит ли объект i-му классу

- Какие темы присутствуют в статье?
- (математика, биология, экономика)

Ранжирование

- Набор документов $d_1, \ldots, d_n$
- Запрос q
- Задача: отсортировать документы по *релевантности* запросу
- $a(q, d)$ — оценка релевантности

Ранжирование

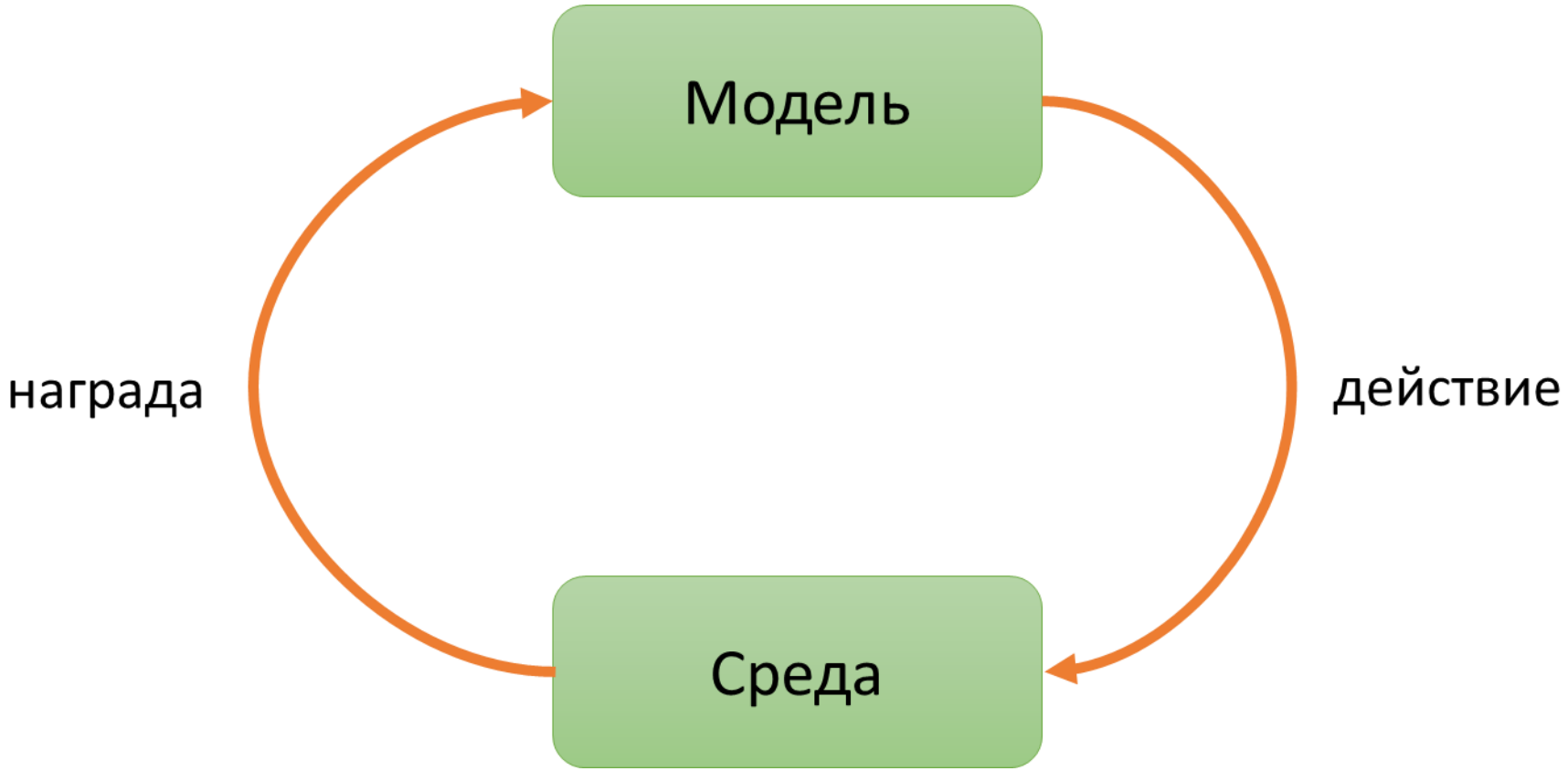


Кластеризация

- $\mathbb{Y}$ — отсутствует
- Нужно найти группы похожих объектов
- Сколько таких групп?
- Как измерить качество?

- Пример: сегментация пользователей мобильного оператора

Обучение с подкреплением



Типы задач

- Регрессия
- Классификация
- Кластеризация
- Много других: ранжирование, поиск аномалий и т.д.

Типы признаков

Типы признаков

- D_j — множество значений признака

Бинарные признаки

- $D_j = \{0, 1\}$
- Доход клиента выше среднего по городу?
- Цвет фрукта — зеленый?

Вещественные признаки

- $D_j = \mathbb{R}$
- Возраст
- Площадь квартиры
- Количество звонков в колл-центр

Категориальные признаки

- D_j — неупорядоченное множество
- Цвет глаз
- Город
- Образование (может быть упорядоченным)

- Очень трудны в обращении

Порядковые признаки

- D_j — упорядоченное множество
- Воинское звание
- Роль в фильме (первого плана, второго плана, массовка)
- Тип населенного пункта

Типы признаков

- Бинарные
- Числовые
- Категориальные и порядковые
- Есть и более сложные: тексты, изображения, звук и т.д.

Гипотеза компактности и knn

Как отличить ель от сосны?

Как отличить ель от сосны?

Как отличить ель от сосны?

Ель:

- Ветки смотрят вверх
- Ствол не видно
- Густые иголки
- Цвет ближе к зелёному

Сосна:

- Ветки параллельны земле
- Ствол видно
- Иголки более редкие
- Цвет ближе к жёлтому

Как отличить ель от сосны?

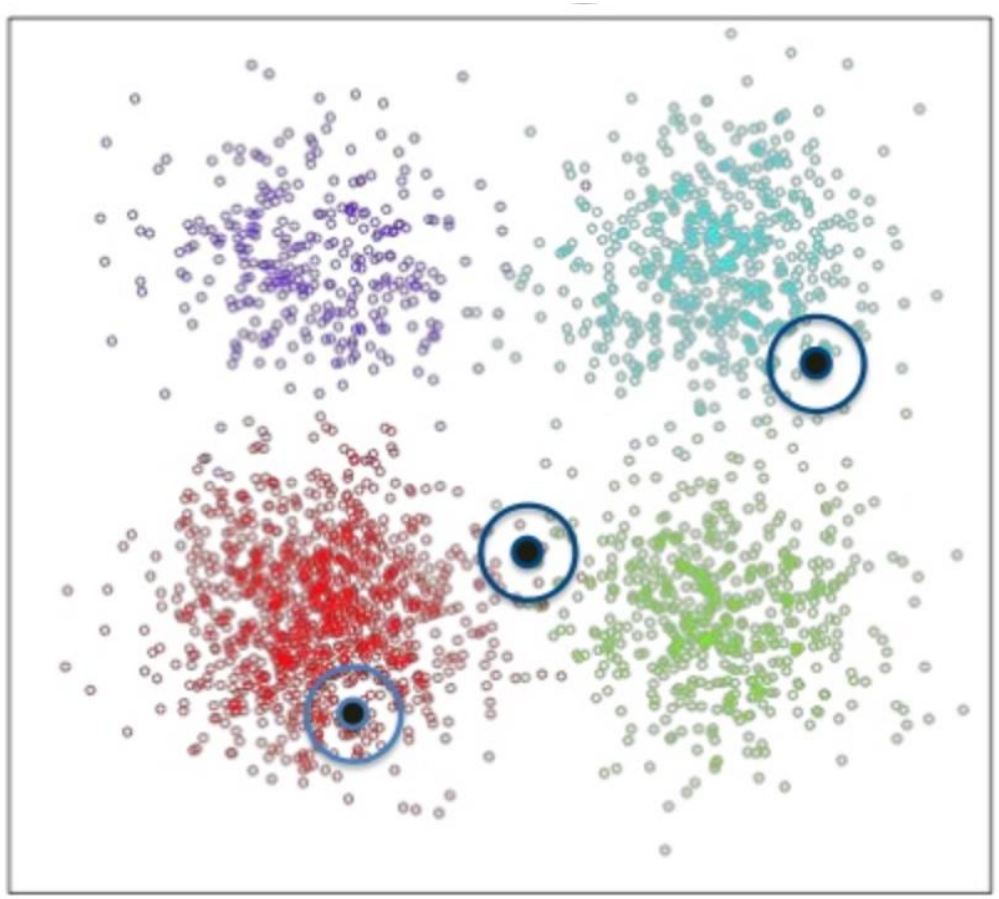
Ветки вверх
Ствол не видно
Густые иголки
Цвет ближе к синему

Скорее всего ель

Что такое обучение?

- Запоминаем примеры (объекты и ответы)
- Когда приходит новый объект, сравниваем с запомненными примерами
- Выдаём ответ от наиболее похожего примера

Гипотеза компактности



Гипотеза компактности

Гипотеза компактности

Если два объекта похожи друг на друга, то ответы на них тоже похожи

kNN: обучение

- Дано: обучающая выборка $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$
- Задача классификация (ответы из множества $\mathbb{Y} = \{1, \dots, K\}$)

- Обучение модели:
  - Запоминаем обучающую выборку X

kNN: применение

Дано: новый объект x

Применение модели:

- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до нового объекта: $\rho\left(x, x_{(1)}\right) \leq \rho\left(x, x_{(2)}\right) \leq \cdots \leq \rho\left(x, x_{(\ell)}\right)$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \ldots, x_{(k)}$
- Выдаём наиболее популярный среди них класс:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} [y_{(i)} = y]$$

kNN: применение

Дано: новый объект x

Применение модели:

- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до нового объекта: $\rho(x, x_{(1)}) \leq \rho(x, x_{(2)}) \leq \cdots \leq \rho(x, x_{(\ell)})$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \ldots, x_{(k)}$
- Выдаём наиболее популярный среди них класс:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} [y_{(i)} = y]$$

kNN: применение

Дано: новый объект x

Применение модели:

- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до нового объекта: $\rho(x, x_{(1)}) \leq \rho(x, x_{(2)}) \leq \cdots \leq \rho(x, x_{(\ell)})$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \ldots, x_{(k)}$
- Выдаём наиболее популярный среди них класс:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} [y_{(i)} = y]$$

kNN: применение

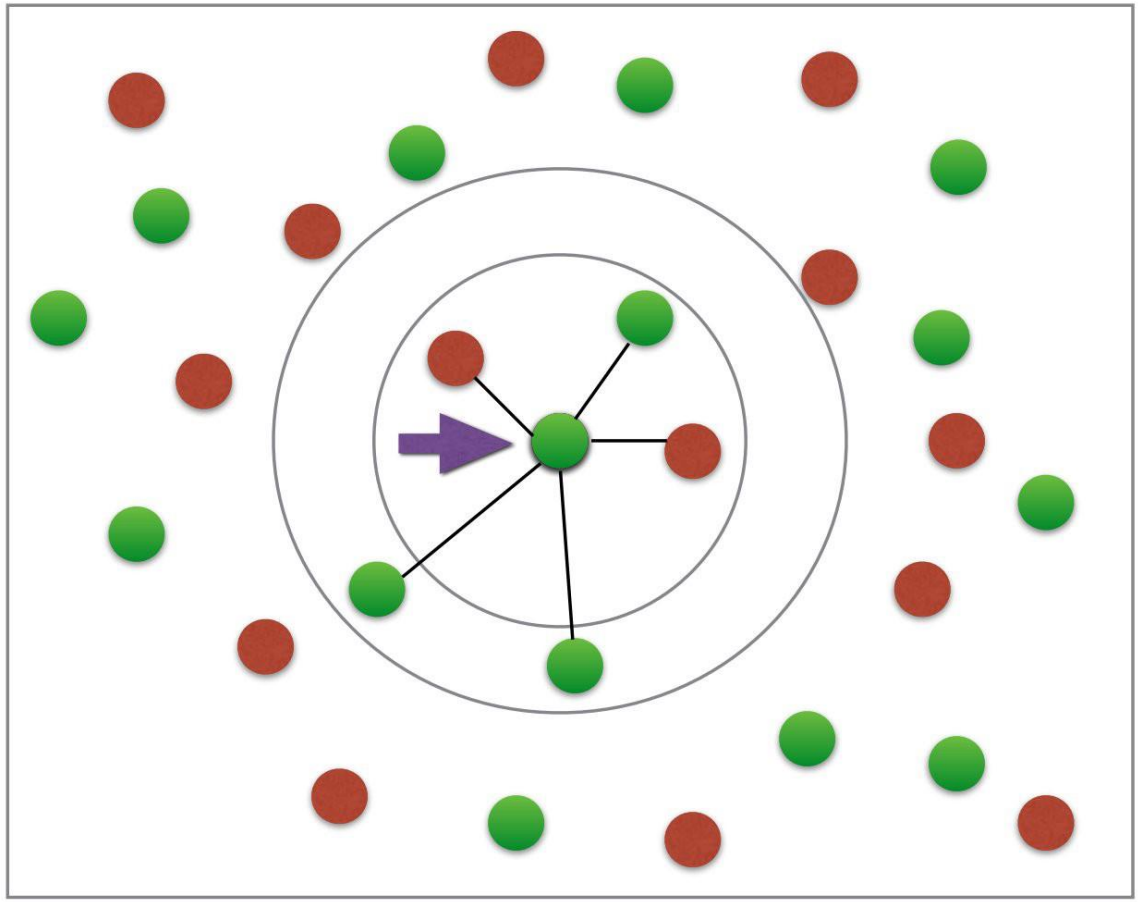
Дано: новый объект x

Применение модели:

- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до нового объекта: $\rho(x, x_{(1)}) \leq \rho(x, x_{(2)}) \leq \cdots \leq \rho(x, x_{(\ell)})$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \ldots, x_{(k)}$
- Выдаём наиболее популярный среди них класс:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} [y_{(i)} = y]$$

kNN: применение



Сравнение объектов и метрики

Числовые данные

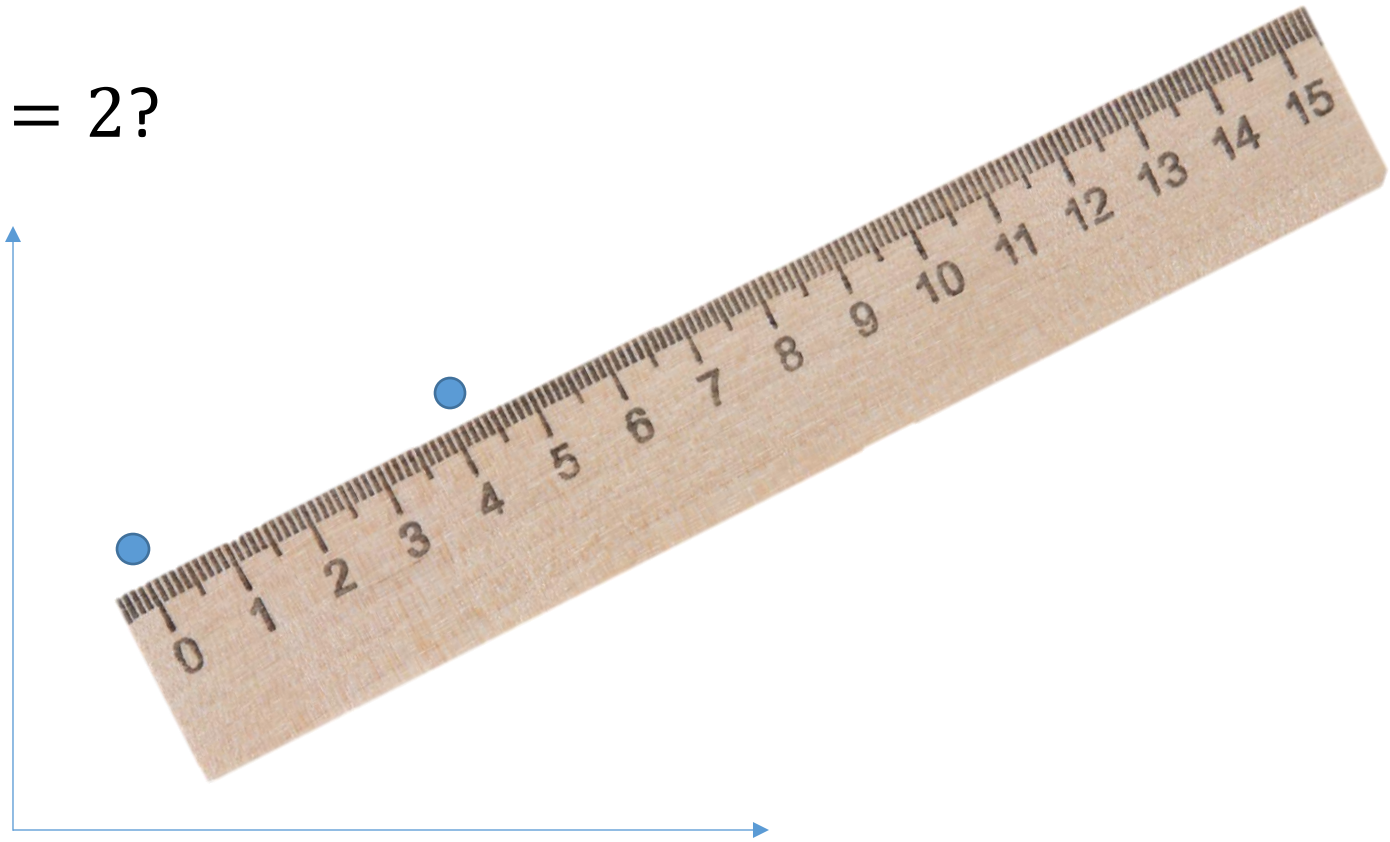
Сколько раз в день вызывает такси	Средние расходы на такси в день	Как часто вызывал комфорт	Возраст	Согласился повысить категорию?
2	400	0.3	29	да
0.3	80	0	28	нет
…	…	…	…	…

Числовые данные

- Каждый объект описывается набором из d чисел — **вектором**
- Если x — вектор, то x_i — его i-я координата
- Если x_i — вектор, то x_{ij} — его j-я координата

Числовые данные

- Каждый объект описывается набором из d чисел — **вектором**
- Что, если $d = 2$?



Метрика

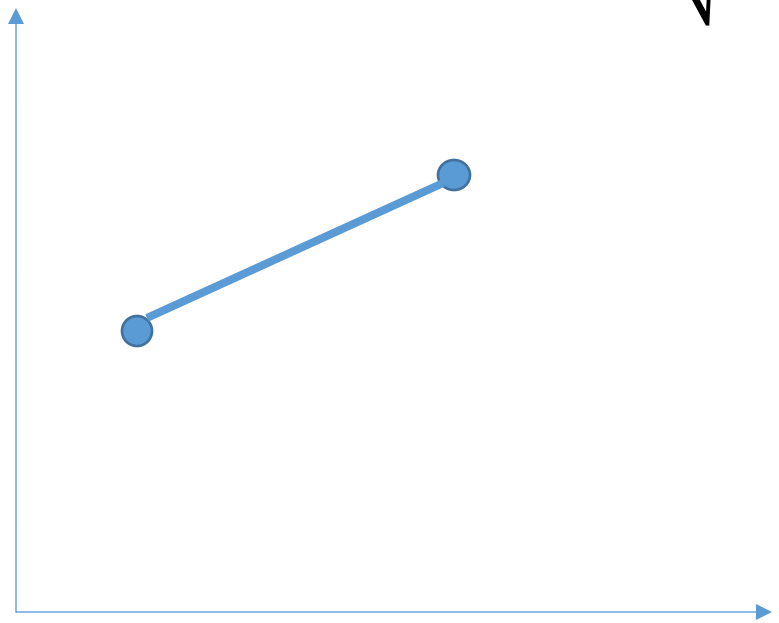
Метрика — обобщение расстояния на многомерные пространства

Метрика — это функция ρ с двумя аргументами, удовлетворяющая трём требованиям:

- $\rho(x, z) = 0$ тогда и только тогда, когда $x = z$
- $\rho(x, z) = \rho(z, x)$
- $\rho(x, z) \leq \rho(x, v) + \rho(v, z)$ — неравенство треугольника

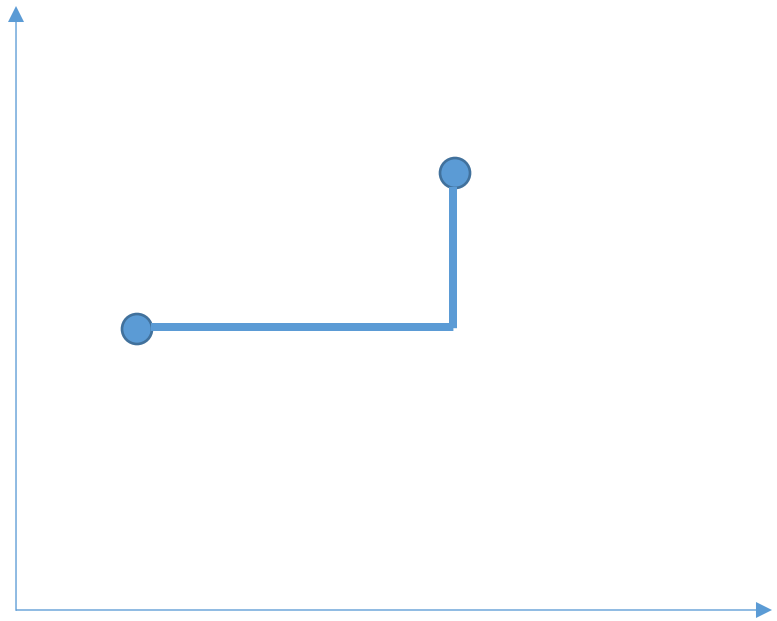
Евклидова метрика

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

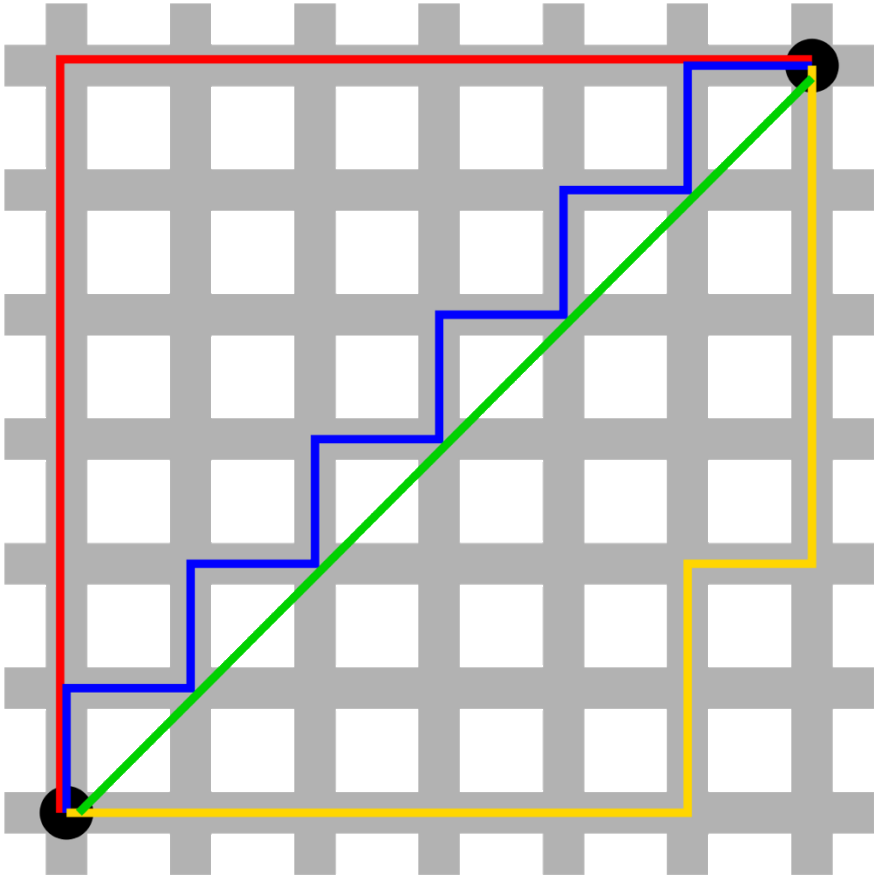


Манхэттенская метрика

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



Сравнение



Обобщение

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

- Метрика Минковского
- Можно подбирать p под конкретную задачу