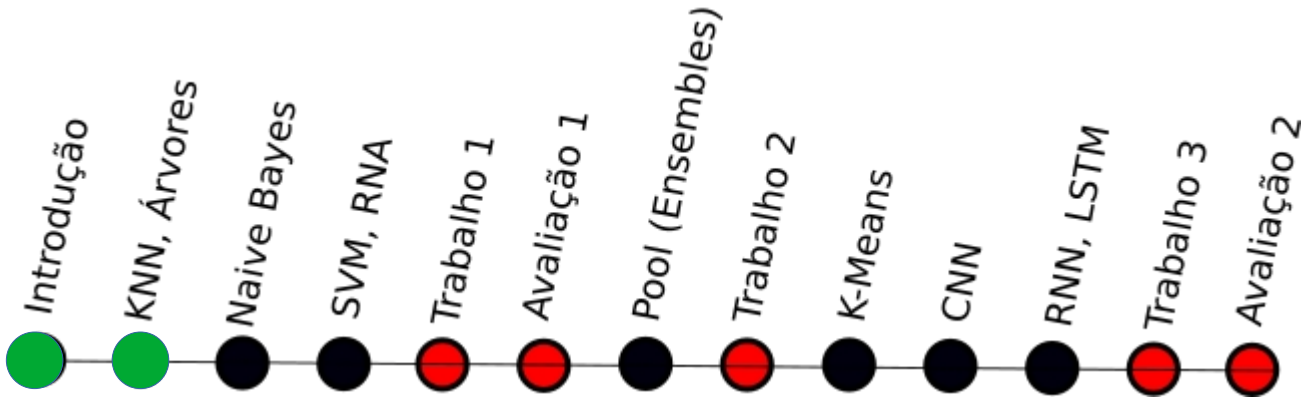
K-Nearest Neighbors (K-NN)

Prof. André Gustavo Hochuli

gustavo.hochuli@pucpr.br
aghochuli@ppgia.pucpr.br
github.com/andrehochuli/teaching

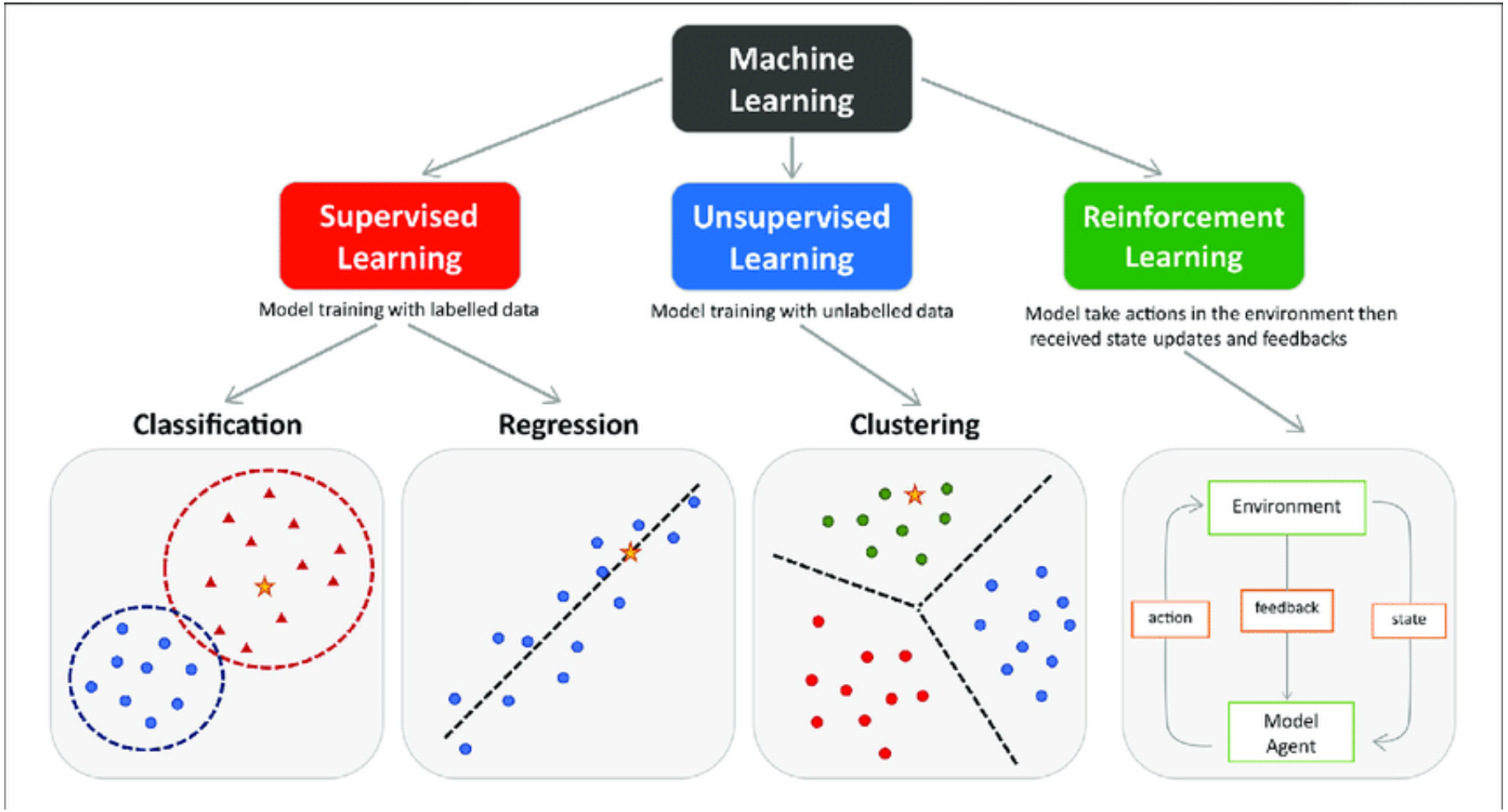
Plano de Aula

- Discussões Iniciais
- Aprendizado por Instâncias
- Algoritmo KNN
- Métricas de Avaliação
- Exercícios



Discussões Iniciais

Tipos de Aprendizado



Discussões Iniciais

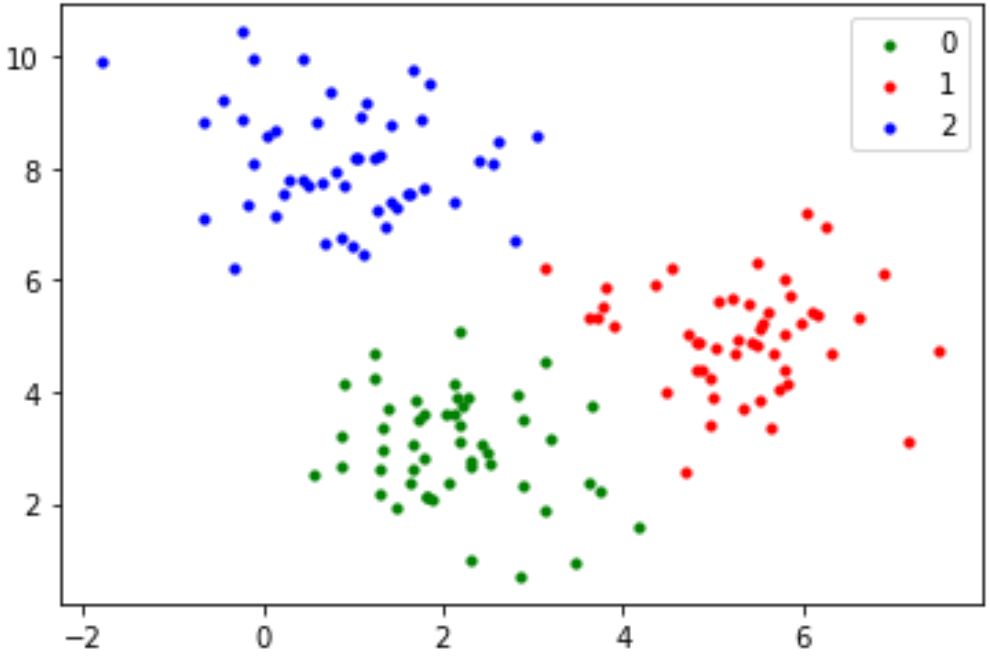
Representação

Tam	Pelo	Cor	Orelha	Focinho	Raça
G	Curta	Branco/ Cinza	Pontuda	Normal	Husky
P	Curta	Branco/ Preta	Caída	Achatado	Pug
P	Curta	Caramelo	Pontuda	Normal	Chihuahua
M	Curta	Branco/ Caramelo	Caída	Normal	Beagle
P	Longa	Preta/ Caramelo	Pontuda	Normal	Yorkshire
G	Longa	Caramelo	Pontuda	Normal	Pastor Alemão
G	Curta	Branco/ Caramelo /Preta	Caída	Normal	Labrador

Aprendizado por instâncias

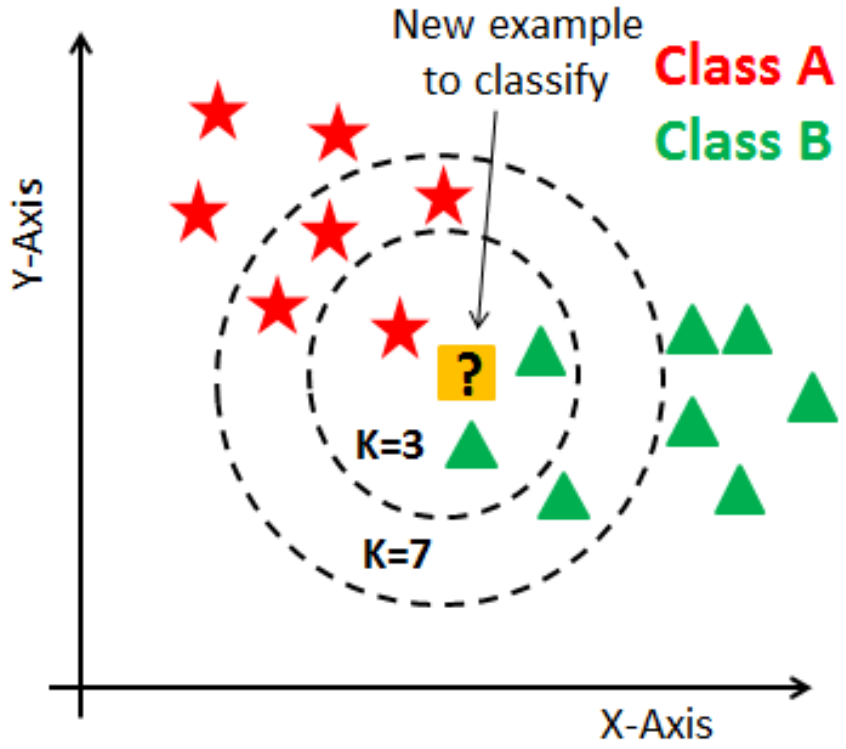
- Características são mapeadas no espaço Euclidiano
  - Métodos não paramétricos
  - Distribuições Arbitrárias
  - Sem suposição sobre as densidades

```
[-0.23685338  8.87583893] 2
[1.01652757 8.17718772] 2
[2.55880554 8.1094027 ] 2
[4.86355526 4.88094581] 1
[6.12141771 5.40890054] 1
[5.04366899 4.77368576] 1
[2.31563495 0.97779878] 0
[5.84616065 4.14048406] 1
[-0.2197444  10.44936865] 2
[1.6775828  2.61594565] 0
```



K-Nearest Neighbors (K-NN)

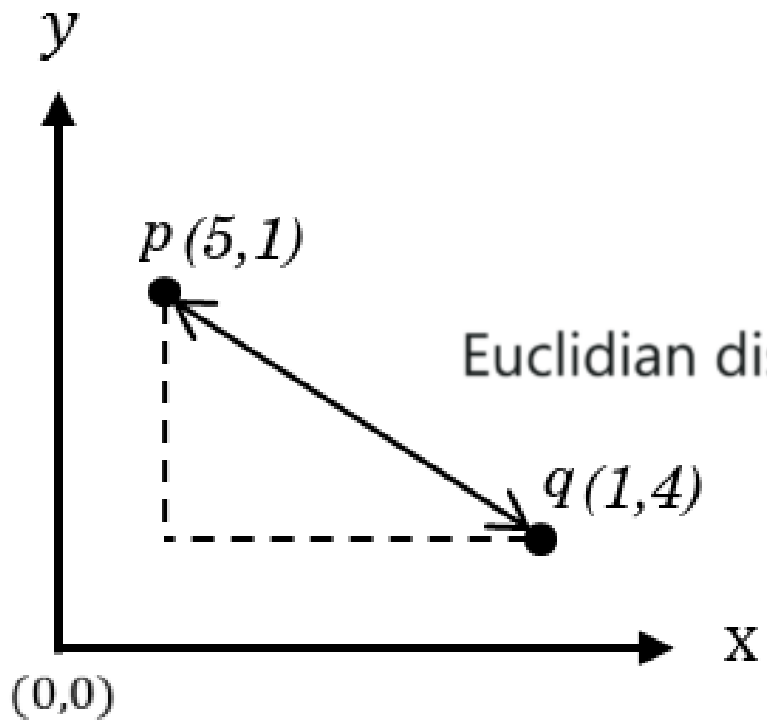
- Votação de ‘K’ vizinhos da amostra de teste



Distância Euclidiana

- Determina a distância entre dois pontos espaço euclidiano

$$c^2 = a^2 + b^2.$$



$$\sqrt{(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2}$$

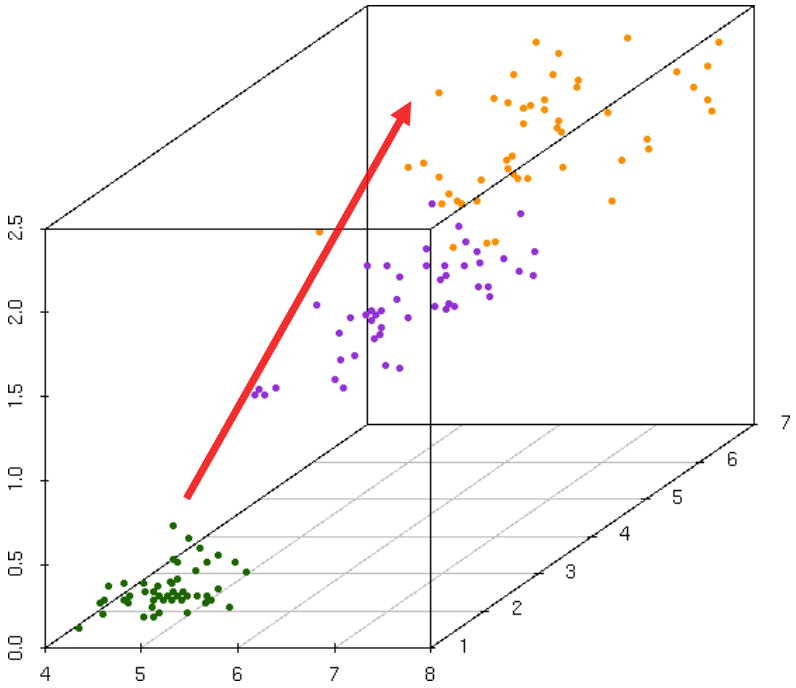
Euclidian distance = $\sqrt{(5-1)^2 + (4-1)^2} = 5$

Distância Euclidiana

- N-dimensional

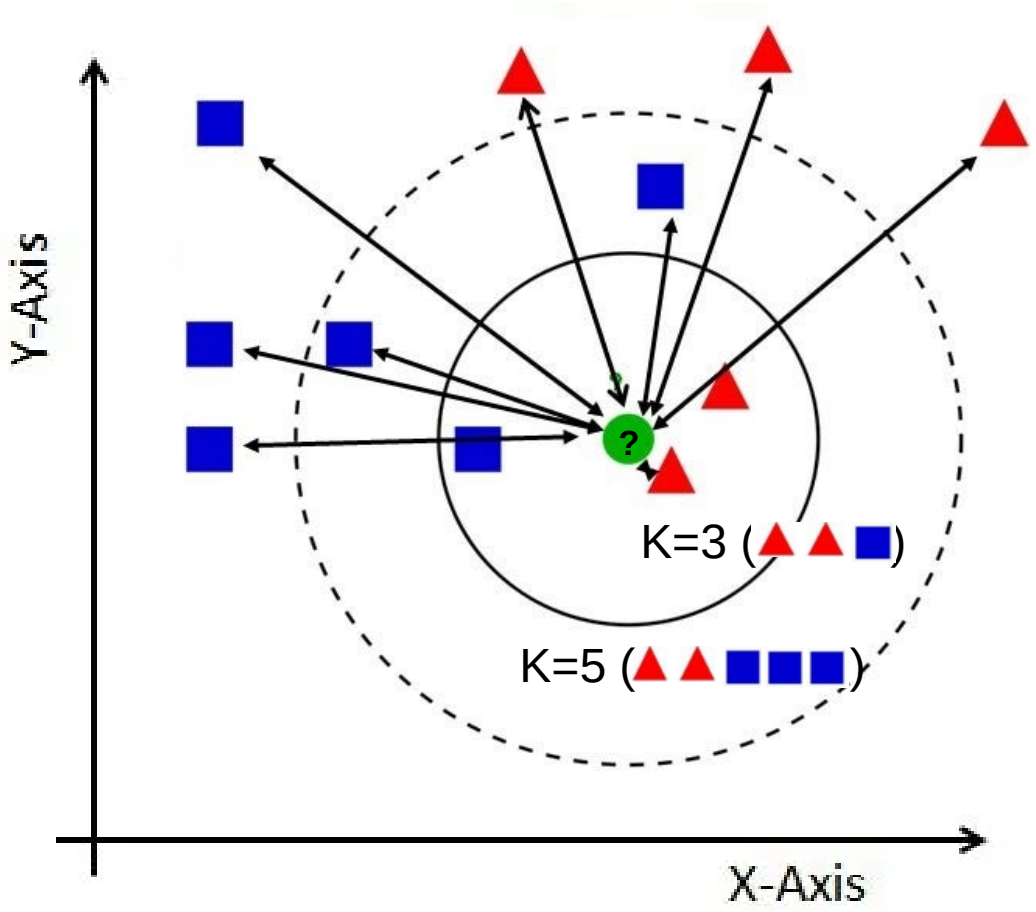
$$d(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = d(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sqrt{(q_1 - p_1)^2 + (q_2 - p_2)^2 + \cdots + (q_n - p_n)^2}$$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (q_i - p_i)^2}.$$



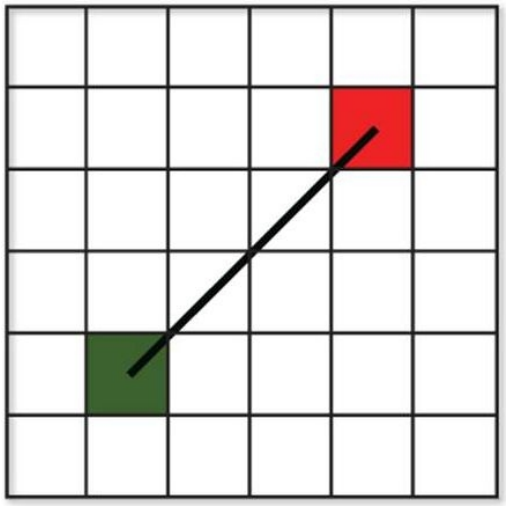
Inferência KNN

- Computar as distâncias entre a amostra de teste e as amostras de treino
- Selecionar os K vizinhos
- Votação

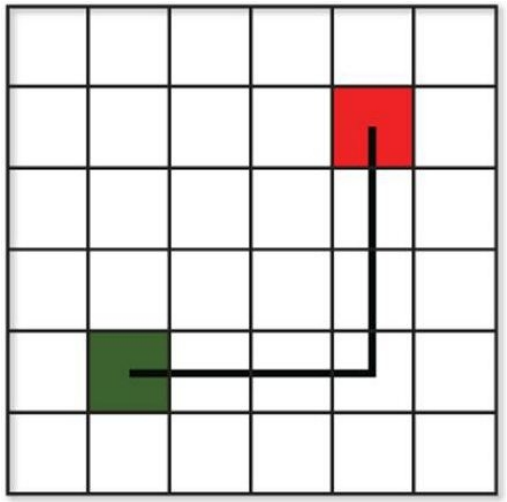


Outras métricas

- Distâncias



Euclidean Distance



Manhattan Distance

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

Minkowski distance

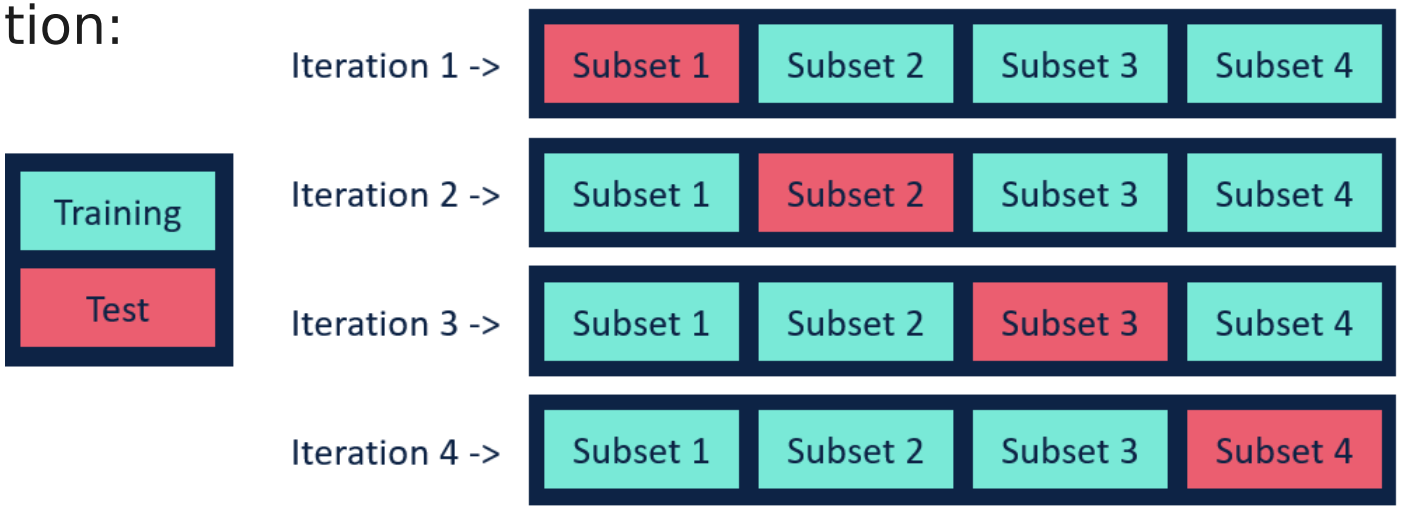
$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - y_i)^2}$$

$$d = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$$

Protocolo Experimental

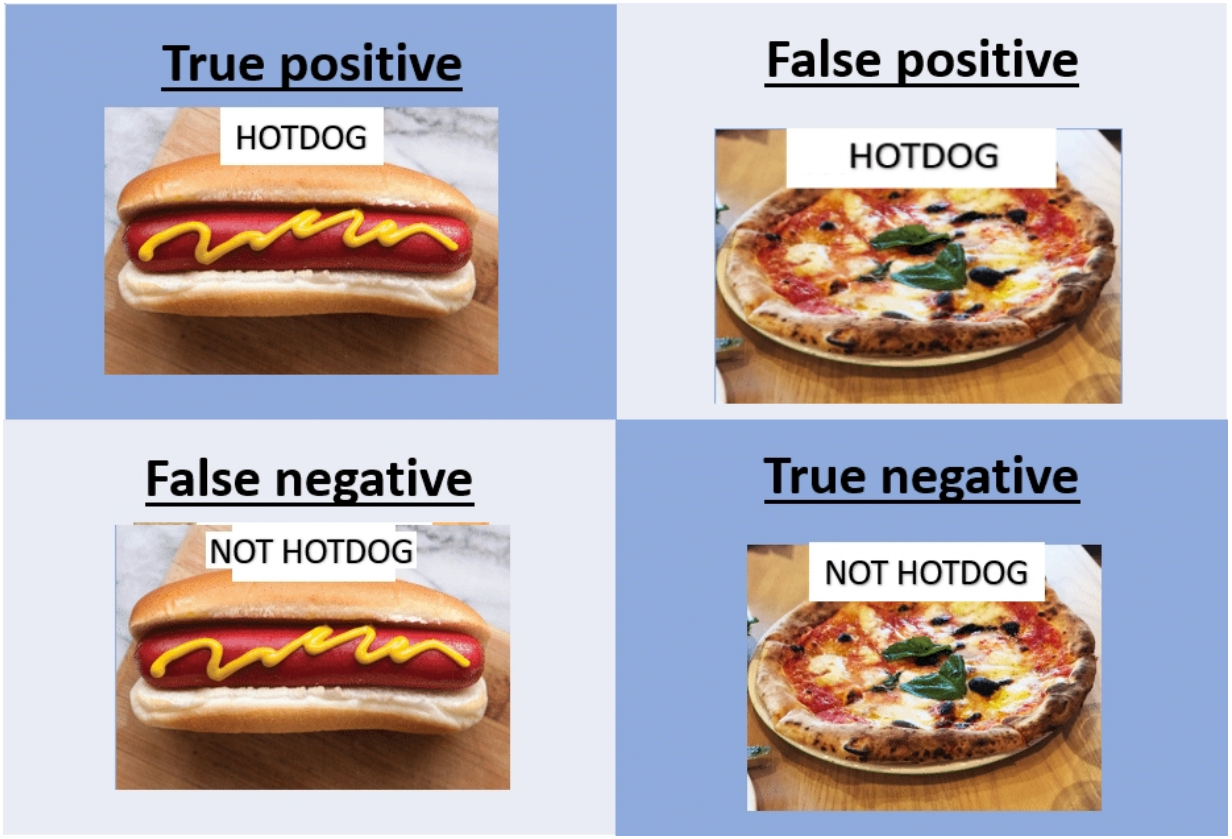
- Define como um modelo vai ser avaliado
- Define quais dados serão usados para treino, validação e teste
- Técnicas mais comuns:
  - Holdout

  - Cross-Validation:



Métricas de Desempenho

- Acertos:
  - TP (True Positive):
  - FN (False Negative)
- Erros:
  - FP (False Positive)
  - TN (True Negative)

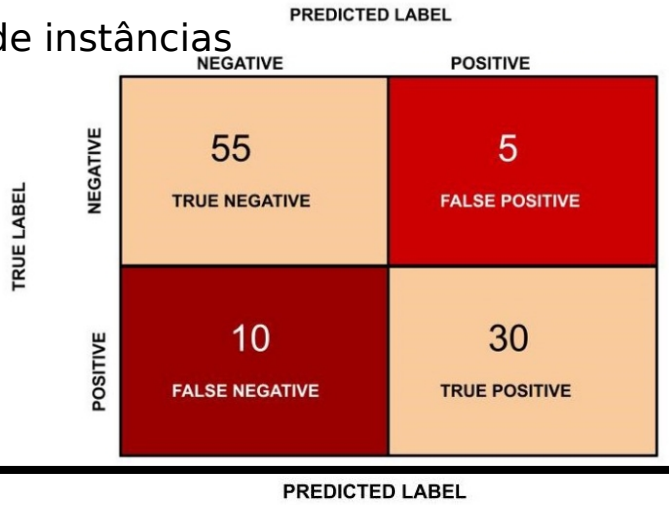


Métricas de Desempenho

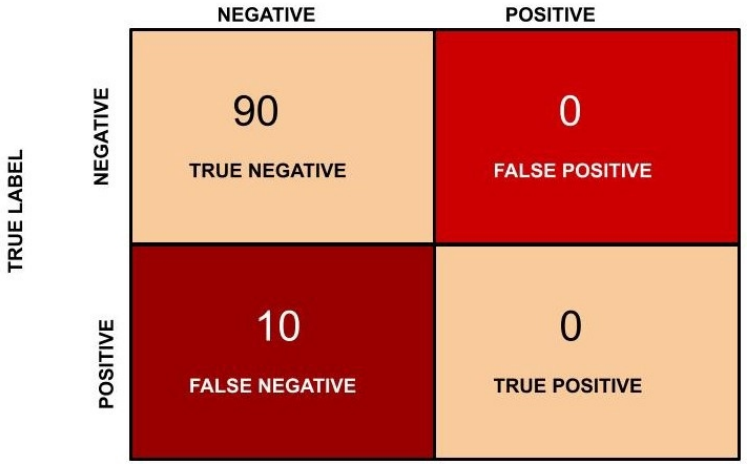
- Accuracy:
  - **Instâncias corretamente classificadas** sobre o total de instâncias

$$Accuracy = \frac{TN + TP}{TN + FP + TP + FN}$$

  - (55 + 30)/(55 + 5 + 30 + 10) = 0.850



- Qual o problema com *Accuracy*?
  - Dados desbalanceados
    - Acc: 90% (90/100)
    - Error TP: 100% (10/10)



Métricas de Desempenho

- Precisão:
  - **Instâncias positivas classificadas corretamente** sobre o total de instânc **classificadas** como positivas

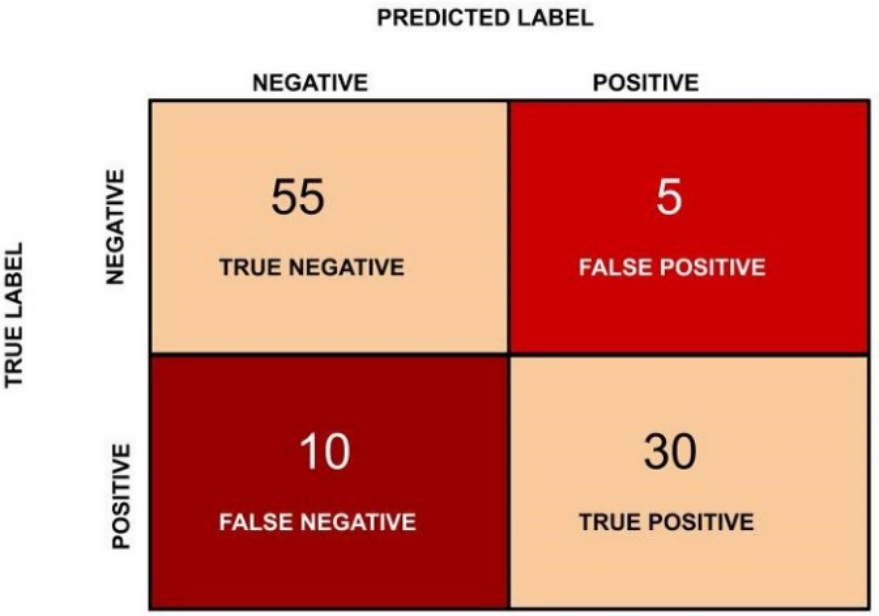
$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

30/(30+ 5) = 0.857

- Recall
  - **Instâncias positivas classificadas corretamente** sobre o **total de instâncias positivas** (A.K.A Sensitivity or TP Rate)

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

  - 30/(30+ 10) = 0.750

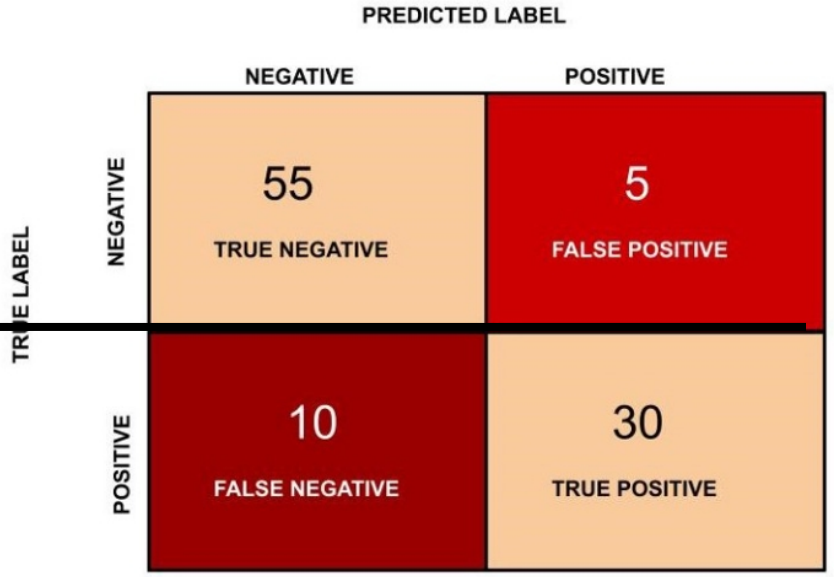


Métricas de Desempenho

- F1-SCORE:
  - Média Harmonica(*) entre precisão e recall

$$F1\ Score = 2 * \frac{Precision * Recall}{Precision + Recall}$$

  - 2* (0.857 * 0.75)/(0.857 + 0.75) = 0.79



- Discussão
  - Accuracy: 0.850
  - F1-Score: 0.799
    - Precision: 0.857
    - Recall: 0.750

(*) A média harmônica atribui menos peso aos valores maiores e mais peso aos valores menores.

Let’s Code

- Vamos implementar esses conceitos, siga o link:

  Tópico_02_Aprendizado_Supervisionado_KNN.ipynb

Considerações Finais

- KNN é um método não paramétrico, baseado na vizinhança Euclidiana
- Não tem treinamento
- Desempenho bom em cenários linearmente separáveis
- Tempo é um problema para bases grandes ou altas dimensões