

En Yakın k-Komsu (k-Nearest Neighbor)

Yapay Ogrenim alanında örnek bazlı öğrenen algoritmalarından bilinen kNN, eğitim verinin kendisini sınıflama (classification) amaçlı olarak kullanır, yeni bir model ortaya çıkartmaz. Algoritma şöyle işler: etiketleri bilinen eğitim verisi alınır ve bir kenarda tutulur. Yeni bir veri noktası sorgulunca bu veriye geri donulur ve o noktaya “en yakın” k tane nokta bulunur. Daha sonra bu noktaların etiketlerine bakılır ve çoğunluğun etiketi ne ise, o etiket yeni noktanın etiketi olarak kabul edilir. Mesela elde 1 kategorisi altında $[2 \ 2]$, 2 kategorisi altında $[5 \ 5]$ var ise, yeni nokta $[3, \ 3]$ için yakınlık açısından $[2 \ 2]$ bulunmalı ve etiket olarak 1 sonucu döndürülmelidir.

Ustte tarif edilen basit bir ihtiyaç, yöntem gibi görülebilir. Fakat yapay öğrenim ve yapay zeka çok boyutlarda oruntu tanıma (pattern recognition) ile uğraşır, ve milyonlarca satırlık veri, onlarca boyut (ustteki örnekte 2, fakat çoğunlukla çok daha fazla boyut vardır) işler hakikaten zorlaşabilir. Mesela görüntü tanımada veri $M \times N$ boyutundaki dijital imajlar (düzleştirilince $M \cdot N$ boyutunda), ve onların içindeki resimlerin kime ait olduğu etiket bilgisi olabilir. kNN bu tür multimedia, çok boyutlu veri ortamında başarılı şekilde çalışabilmektedir. Ayrıca en yakın k komşunun içeriği tarifsel bilgi çıkarımı (knowledge extraction) amacıyla da kullanılabilir [2].

“En yakın” sözü bir koordinat sistemi anlamına geliyor, ve kNN, aynen k-Means ve diğer pek çok koordinatsal öğrenme yöntemi gibi eldeki çok boyutlu veri noktalarının elemanlarını bir koordinat sistemindeymiş gibi görür. Kiyasla mesela APriori gibi bir algoritma metin bazlı veriyle olduğu gibi çalışabilirdi.

Peki arama bağlamında, bir veri obegi içinden en yakın noktaları bulmanın en basit yolu nedir? Listeyi bastan sonra taramak (kaba kuvvet yöntemi -brute force-) listedeki her nokta ile yeni nokta arasındaki mesafeyi teker teker hesaplayıp en yakın k taneyi içinden seçerdi, bu bir yöntemdir.. Bu basit algoritmanın yuku $O(N)$ 'dir. Eğer tek bir nokta ariyor olsaydık, kabul edilebilir olabilirdi. Fakat genellikle bir sınıflayıcı (classifier) algoritmasının sürekli işlemesi, mesela bir online site için günde milyonlarca kez bazı kararları alması gerekebilir. Bu durumda ve N 'in çok büyük olduğu şartlarda, ustteki hız bile yeterli olmayacaktır.

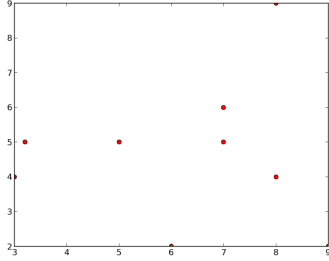
Arama işlemini daha hızlı yapmanın yolları var. Akıllı arama algoritmaları kullanarak eğitim verilerini bir ağac yapısı üzerinden tarayıp erişim hızını $O(\log N)$ 'e indirmek mümkündür.

Küre Ağaçları (Ball Tree, BT)

Bir noktanın diğer noktalara yakın olup olmadığının hesabında yapılması gereken en pahalı işlem nedir? Mesafe hesabıdır. BT algoritmasının puf noktası bu hesabi yapmadan, noktalara değil, noktaları kapsayan “kurelere” bakarak hız kazandırmasıdır. Noktaların her biri yerine o noktaları temsil eden kurenin mihenk noktasına (pivot -bu nokta kure içindeki noktaların ortalamasal olarak merkezi de olabilir, herhangi bir başka nokta da-) bakılır, ve oraya olan mesafeye göre bir kure altındaki noktalara olabilecek en az ve en fazla uzaklık hemen anlaşılmış olur.

Not: Kure kavrami uc boyutta anlamlı tabii ki, iki boyutta bir cemberden bahsetmek lazım, daha yüksek boyutlarda ise merkezi ve çapı olan bir “hiper yüzeyden” bahsetmek lazım. Tarifi kolaylastirdigi için cember ve kure tanımlarını kullanıyoruz.

Mesela elimizde alttaki gibi noktalar var ve kureyi oluşturduk.

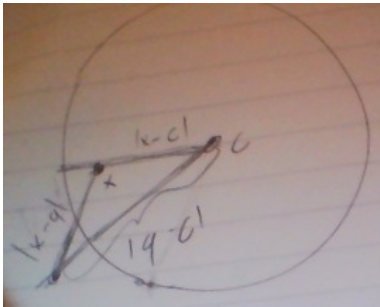


Bu kureyi kullanarak kure dışındaki herhangi bir nokta q 'nın kuredeki “diğer tüm noktalar x 'e” olabileceği en az mesafenin ne olacağını uçgenel eşitsizlik ile anlayabiliriz.

Uçgenel eşitsizlik

$$|x - y| \leq |x - z| + |z - y|$$

$\|$ operatörü norm operatörü anlamına gelir ve uzaklık hesabının genelleştirilmiş halidir. Konu hakkında daha fazla detay için *Fonksiyonel Analiz* ders notlarımıza bakabilirsiniz. Kısa söylemek istenen iki nokta arasında direk gitmek yerine yolu uzatırsak, mesafe artacaktır. Tabii uzaklık, yol, nokta gibi kavramlar tamamen soyut matematiksel ortamda da işleyecek şekilde ayarlanmıştır. Mesela mesafe (norm) kavramını değiştirebiliriz, Oklitsel yerine Manhattan mesafesi kullanırız, fakat bu kavram bir norm olduğu ve belirttiğimiz uzayda geçerli olduğu için uçgenel eşitsizlik üzerine kurulmuş tüm diğer kurallar geçerli olur.



Şimdi diyelim ki dışarıdaki bir q noktasından bir kure içindeki diğer tüm x noktalarına olan mesafe hakkında bir şeyler söylemek istiyoruz. Üstteki şekilde bir uçgenel eşitsizlik çıkarabiliriz,

$$|x - c| + |x - q| \geq |q - c|$$

Bunun dogru bir ifade oldugunu biliyoruz. Peki simdi yarıcapı bu ise dahil edelim, cunku yarıcap hesabi bir kere yapilip kure seviyesinde depolanacak ve bir daha hesaplanmasi gerekmeyecek, yani algoritmayı hizlandiracak bir sey olabilir bu, o zaman eger $|x - c|$ yerine yarıcapı kullanırsak, esitsizlik hala gecerli olur, sol taraf zaten buyuktu, simdi daha da buyuk olacak,

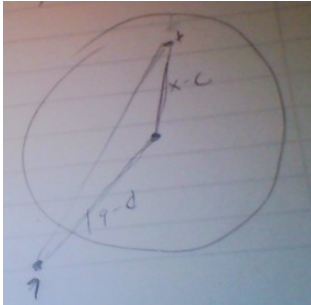
$$\text{radius} + |x - c| \geq |q - c|$$

Bunu nasıl böyle kesin bilebiliyoruz? Cunku BT algoritması radius'u $|x - c|$ 'ten kesinlikle daha büyük olacak şekilde secer). Simdi yarıcapı saga gecirelim,

$$|x - c| \geq |q - c| - \text{radius}$$

Boylece guzel bir tanım elde ettik. Yeni noktanin kuredeki herhangi bir nokta x 'e olan uzakligi, yeni noktanin mihenke olan uzakliginin yarıcapı cikartilmis halinden *muhtak* fazladir. Yani bu cikartma isleminden ele gecen rakam yeni noktanin x 'e uzakligina bir "alt sinir (lower bound)" olarak kabul edilebilir. Diger tum mesafeler bu rakamdan daha büyük olacaktır. Ne elde ettik? Sadece bir yeni nokta, mihenk ve yarıcap kullanarak kuredeki "diger tum noktalar hakkında" bir irdeleme yapmamiz mumkun olacak. Bu noktalara teker teker bakmamiz gerekmeyecek. Bunun nasıl ise yaradigini algoritma detaylarında gorecegiz.

Benzer şekilde



Bu ne diyor?

$$|q - c| + |x - c| \geq |q - x|$$

$|x - c|$ yerine yarıcapı kullanırsak, sol taraf buyuyecegi için buyukluk hala buyukluk olarak kalir,

$$|q - c| + \text{radius} \geq |q - x|$$

Ve yine daha genel ve hizli hesaplanan bir kural elde ettik (onceki ifadeye benzeri için yer duzenlemesi yapalım)

$$|q - x| \leq |q - c| + \text{radius}$$

Bu ifade ne diyor? Yeni noktanin mihenke olan uzakligina yaricap “eklenirse” bu uzakliktan, buyuklukten daha buyuk bir yeni nokta / kure mesafesi olamaz, kuredeki hangi nokta olursa olsun. Bu esitsizlik te bize bir ust sinir (upper bound) vermis oldu.

Algoritma

Kure Agaclari (BT) metodu once kureleri, agaclari olusturmalidir. Bu kureler hiyerarsik sekilde planlanir, tum noktalarin icinde oldugu bir “en ust kure” vardir her kurenin iki tane cocuk kuresi olabilir. Belli bir (disaridan tanimlanan) minimum r_{\min} veri noktasina gelinceye kadar sadece noktalar geometrik olarak kapsamakla goreli kureler olusturulur, kureler noktalar sahiplenmezler. Fakat bu r_{\min} sayisina erisince (artik oldukca alttaki) kurelerin uzerine noktalar konacaktır.

Once tek kurenin olusturulusuna bakalim. Bir kure olusumu icin eldeki veri icinden herhangi bir tanesi mihenk olarak kabul edilebilir. Daha sonra bu mihenkten diger tum noktalara olan uzaklik olculur, ve en fazla, en buyuk olan uzaklik yaricap olarak kabul edilir (her seyi kapsayabilmesi icin).

Not: Bu arada “tum diger noktalara bakilmasi” dedik, bundan kacinmaya calismiyor muyduk? Fakat dikkat, “kure olusturulmasi” evresindeyiz, k tane yakin nokta arama evresinde degiliz. Yapmaya calistigimiz aramalar hizlandirmak - egitim / kure olusturmasi bir kez yapilacak ve bu egitilmis kureler bir kenarda tutulacak ve surekli aramalar icin ardi ardina kullanilacaklar.

Kureyi olusturmanin algoritmasi soyledir: verilen noktalar icinde herhangi birisi mihenk olarak secilir. Sonra bu noktadan en uzakta olan nokta f_1 , sonra f_1 ’den en uzakta olan nokta f_2 secilir. Sonra tum noktalara teker teker bakilir ve f_1 ’e yakin olanlar bir gruba, f_2 ’ye yakin olanlar bir gruba ayrilir.

```
import itertools

def dist(vect, x):
    return np.fromiter(itertools.imap
                        (np.linalg.norm, vect-x), dtype=np.float)

def norm(x, y): return np.linalg.norm(x-y)

points = np.array([[3., 3.], [2., 2.]])
q = [1., 1.]
print 'diff', points-q
print 'dist', dist(points, q)

diff [[ 2.  2.]
      [ 1.  1.]]
dist [ 2.82842712  1.41421356]

# k-nearest neighbor Ball Tree algorithm in Python
import pprint
```

```

__rmin__ = 2

# node: [pivot, radius, points, [child1,child2]]
def new_node(): return [None, None, None, [None, None]]

def zero_if_neg(x):
    if x < 0: return 0
    else: return x

def form_tree(points, node, all_points, plot_tree=False):
    pivot = points[0]
    radius = np.max(dist(points, pivot))
    if plot_tree: plot_circles(pivot, radius, points, all_points)
    node[0] = pivot
    node[1] = radius
    if len(points) <= __rmin__:
        node[2] = points
        return
    idx = np.argmax(dist(points, pivot))
    furthest = points[idx, :]
    idx = np.argmax(dist(points, furthest))
    furthest2 = points[idx, :]
    dist1 = dist(points, furthest)
    dist2 = dist(points, furthest2)
    diffs = dist1 - dist2
    p1 = points[diffs <= 0]
    p2 = points[diffs > 0]
    node[3][0] = new_node() # left child
    node[3][1] = new_node() # right child
    form_tree(p1, node[3][0], all_points)
    form_tree(p2, node[3][1], all_points)

# knn: [min_so_far, [points]]
def search_tree(new_point, knn_matches, node, k):
    pivot = node[0]
    radius = node[1]
    node_points = node[2]
    children = node[3]

    # calculate min distance between new point and pivot
    # it is direct distance minus the radius
    min_dist_new_pt_node = norm(pivot, new_point) - radius

    # if the new pt is inside the circle, its potential minimum
    # distance to a random point inside is zero (hence
    # zero_if_neg). we can only say so much without looking at all
    # points (and if we did, that would defeat the purpose of this
    # algorithm)
    min_dist_new_pt_node = zero_if_neg(min_dist_new_pt_node)

    knn_matches_out = None

    # min is greater than so far
    if min_dist_new_pt_node >= knn_matches[0]:
        # nothing to do

```

```

        return knn_matches
    elif node_points != None: # if node is a leaf
        print knn_matches_out
        knn_matches_out = knn_matches[:] # copy it
        for p in node_points: # linear scan
            if norm(new_point,p) < radius:
                knn_matches_out[1].append([list(p)])
                if len(knn_matches_out[1]) == k+1:
                    tmp = [norm(new_point,x) \
                           for x in knn_matches_out[1]]
                    del knn_matches_out[1][np.argmax(tmp)]
                    knn_matches_out[0] = np.min(tmp)

        else:
            dist_child_1 = norm(children[0][0],new_point)
            dist_child_2 = norm(children[1][0],new_point)
            node1 = None; node2 = None
            if dist_child_1 < dist_child_2:
                node1 = children[0]
                node2 = children[1]
            else:
                node1 = children[1]
                node2 = children[0]

            knn_tmp = search_tree(new_point, knn_matches, node1, k)
            knn_matches_out = search_tree(new_point, knn_tmp, node2, k)

    return knn_matches_out

points = np.array([[3.,4.],[5.,5.],[9.,2.],[3.2,5.],[7.,5.],
                   [8.,9.],[7.,6.],[8,4],[6,2]])
tree = new_node()
form_tree(points,tree,all_points=points)
pp = pprint.PrettyPrinter(indent=4)
print "tree"
pp.pprint(tree)
newp = np.array([7.,7.])
dummysp = [np.Inf,np.Inf] # it should be removed immediately
res = search_tree(newp,[np.Inf, [dummysp]], tree, k=2)
print "done", res

tree
[ array([ 3.,  4.]),
  7.0710678118654755,
  None,
  [ [ array([ 8.,  9.]),
        3.1622776601683795,
        array([ 8.,  9.],
              [ 7.,  6.])],
    [None, None]],
  [ array([ 3.,  4.]),
    6.324555320336759,
    None,
    [ [ array([ 9.,  2.]),
        3.6055512754639891,
        None,
```

```

Procedure BallKNN( $PS^{in}, Node$ )
begin
  if ( $D_{\min}^{Node} \geq D_{\text{sofar}}$ ) then                                /* If this condition is satisfied, then impossible
    Return  $PS^{in}$  unchanged.                                for a point in Node to be closer than the
                                                            previously discovered  $k^{th}$  nearest neighbor.*/

  else if (Node is a leaf)
     $PS^{out} = PS^{in}$ 
     $\forall \mathbf{x} \in \text{Points}(Node)$ 
    if ( $|\mathbf{x} - \mathbf{q}| < D_{\text{sofar}}$ ) then                            /* If a leaf, do a naive linear scan */
      add  $\mathbf{x}$  to  $PS^{out}$ 
      if ( $|PS^{out}| == k + 1$ ) then
        remove furthest neighbor from  $PS^{out}$ 
      update  $D_{\text{sofar}}$ 

  else                                                        /*If a non-leaf, explore the nearer of the two
     $node_1 = \text{child of Node closest to } \mathbf{q}$                   child nodes, then the further. It is likely that
     $node_2 = \text{child of Node furthest from } \mathbf{q}$             further search will immediately prune itself.*/
     $PS^{temp} = \text{BallKNN}(PS^{in}, node_1)$ 
     $PS^{out} = \text{BallKNN}(PS^{temp}, node_2)$ 
end

```

Bu iki grup, o anda islemekte oldugumuz agac dugumun (node) iki cocuklari olacaktir. Cocuk noktalari kararlstirildiktan sonra artik sonraki asamaya gecilir, fonksiyon `form_tree` bu cocuk noktalari alarak, ayri ayri, her cocuk grubu icin ozyineli (recursive) olarak kendi kendini cagirir. Kendi kendini cagiran `form_tree`, tekrar basladiginda kendini yeni (bir) nokta grubu ve yeni bir dugum objesi ile basbasa bulur, ve hicbir seyden habersiz olarak isleme koyulur. Tabii her ozyineli cagri yeni dugum objesini yaratirken bir referansi ustteki ebeveyn dugume koymayi unutmamistir, boylece ozyineli fonksiyon dunyadan habersiz olsa bile, agacin en ustunden en altina kesintisiz bir baglanti zinciri hep elimizde olur.

Not: `form_tree` icinde bir numara yaptik, tum noktalarin f_1 'e olan uzakligi `dist1`,

f_2 'e olan uzakligi ise `dist2`. Sonra `diffs = dist1-dist2` ile bu iki uzakligi birbirinden cikartiyoruz ve mesela `points[diffs <= 0]` ile f_1 'e yakin olanlari buluyoruz, cunku bir tarafta f_1 'e yakinlik 4 diger tarafta f_2 'ye yakinlik 6 ise, $4-6=-2$ ie o nokta f_1 'e yakin demektir. Ufak bir numara ile Numpy dilimleme (slicing) teknigini kullanabilmis olduk ve bu onemli cunku Boylece `for` dongusu yazmıyoruz, Numpy'in arka planda C ile yazilmis hizli rutinlerini kullaniyoruz.

Ek bazı bilgiler: kurelerin sinirlari kesisebilir.

Arama

Ustte sozde program (pseudocode) BallKNN olarak gosterilen ve bizim kodda `search_tree` olarak anilan fonksiyon arama fonksiyonu. Aranan `new_point`'e olan k en yakin diger veri noktalar. Disaridan verilen degisken `knn_matches` uzerinde fonksiyon ozyineli bir sekilde arama yaparken "o ana kadar bulunmus en yakin k nokta" ve o noktalarin `new_point`'e olan en yakin mesafesi saklanir, arama isleyisi sirasinda `knn_matches`, `knn_matches_out` surekli verilip geri dondurulen degiskenlerdir, sozde programdaki P^{in} , P^{out} 'un karsiligidir.

Arama algoritmasi soyle isler: simdi onceden olusturulmus kure hiyerarisisini ustten alta dogru gezmeye baslari. Her basamakta yeni nokta ile o kurenin mi-henkini, yaricapini kullanarak bir "alt sinir mesafe hesabi" yapariz, bu mesafe hesabinin arkasinda yatan dusunceyi yazinin basinda anlatmistik. Bu mesafe kure icindeki tum noktalara olan bir en az mesafe idi, ve eger eldeki `knn_matches` uzerindeki simdiye kadar bulunmus mesafelerin en azindan daha az ise, o zaman bu kure "bakmaya deger" bir kuredir, ve arama algoritmasi bu kureden isleme devam eder. Simdiye kadar bulunmus mesafelerin en azi `knn_matches` veri yapisi icine `min_so_far` olarak saklaniyor, sozde programdaki D_{sofar} .

Bu irdeleme sonrasi (yani vs kuresinden yola devam karari arkasindan) isleme iki sekilde devam edilebilir, cunku bir kure iki turden olabilir; ya nihai en alt kurelerden biridir ve uzerinde gercek noktalar depolanmistir, ya da ara kurelerden biridir (sona gelmedik ama dogru yoldayiz, daha alta inmeye devam), o zaman fonksiyon yine ozyineli bir sekilde bu kurenin cocuklarina bakacaktır - her cocuk icin kendi kendini cagiracaktır. Ikinci durumda, kurede noktalar depolanmistir, artik basit lineer bir sekilde o tum noktalara teker teker bakilir, eldekilerden daha yakin olani alinir, eldeki liste sismeye baslamissa (k 'den daha fazla ise) en buyuk noktalardan biri atilir [3], vs.

Daha alta inmemiz gereken birinci durumda yapilan iki cagrinin bir ozelligine dikkat çekmek isterim. Yeni noktanin bu cocuklara olan uzakligi da olculuyor, ve en once, en yakin olan cocuga dogru bir ozyineleme yapiliyor. Bu nokta cok onemli: niye Boyle yapildi? Cunku icinde muhtemelen daha yakin noktalarin olabilecegi kurelere dogru gidersek, ozyineli cagrilarin teker teker bitip yukari dogru cikmaya baslamasi ve kaldiklari yerden bu sefer ikinci cocuk cagrilarini yapmaya baslamasi ardindan, elimizdeki `knn_matches` uzerinde en yakin noktalar buyuk bir ihtimalle zaten bulmus olacagiz. Bu durumda ikinci cagri yapilsa bile tek bir alt sinir hesabi o kurede dikkate deger hicbir nokta olamayacagini or-

taya cikaracak (cunku en iyiler zaten elimizde), ve ikinci cocuga olan cagrlar hic alta inmeden pat diye geri donecektir, hic asagi inilmeyecektir.

Bu muthis bir kazanimdir: zaten bu stratejiye liteturde "budamak (pruning)" adi veriliyor, bu da cok uygun bir kelime aslinda, cunku agaclarla ugrasiyoruz ve bir dugum (kure) ve onun altindaki hicbir alt kureye ugramaktan kurtularak o dallarin tamamini bir nevi "budamis" oluyoruz. Bir suru gereksiz islemden de kurtuluyoruz bu arada, ve aramayi hizlandiriyoruz.

Mesafeler

Algoritmanin mesafeleri anlatan kisminda norm ve uzaylar gibi kavramlardan bahsettik. Yeni noktanin mihenke olan uzakliginin o kure icindeki tum diger noktalara olan uzakligini temsil edebilecegini soyledik: peki niye bu kavramlari direk bu sekilde anlatmadik, ve norm, ucgensel esitsizlik gibi kavramlardan bahsettik? Cunku 2 ve 3 boyut sonrasi uzaylari gorsel olarak dusunmek mumkun degildir, istedigimiz kadar ellerimizi kollarimizi sallayalim, bu kavramlari gorsel olarak tarif edemeyiz, ve degisik bir norm (mesafe) olcutu kullanmayi secebiliriz. Bu her iki durumda da elimizde soyut matematik baglaminda saglam bir temel oldugunu bilmek algoritmanin genelligini, ve degisik sartlarda uygulanabilirliğini arttirir. Mesela Oklit mesafesi yerine Manhattan mesafesi kullansam bile, bu mesafenin olcutunun norm kurallarini uydugunu bildigim icin kNN yapisinin geri kalanini oldugu gibi kullanabilirim, cunku o yapinin gecerliliğini normlar uzerinde gecerli ucgensel esitsizlik uzerinde ispat ettim.

Model

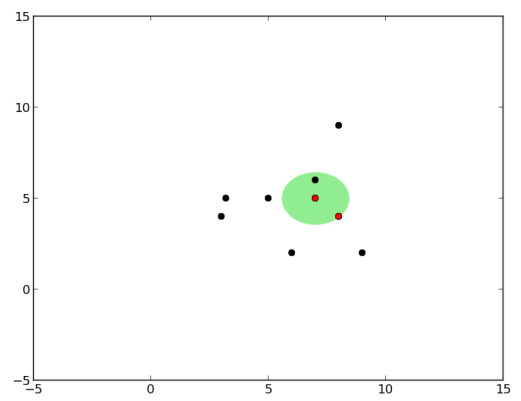
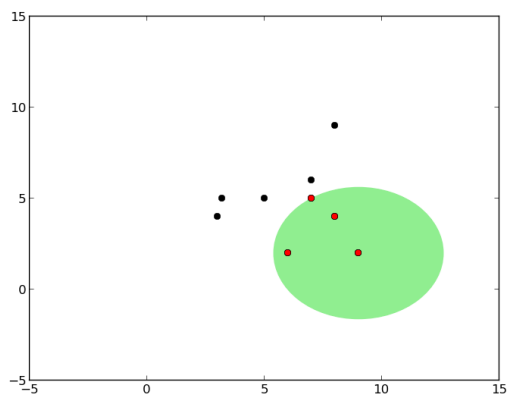
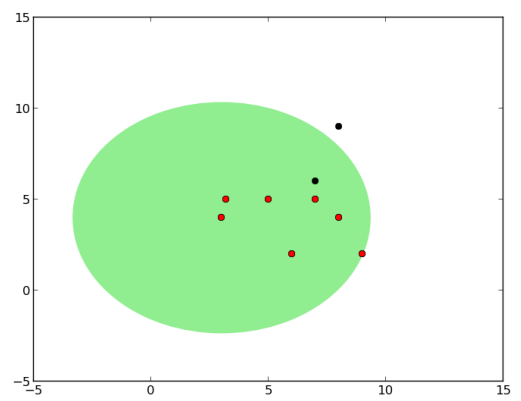
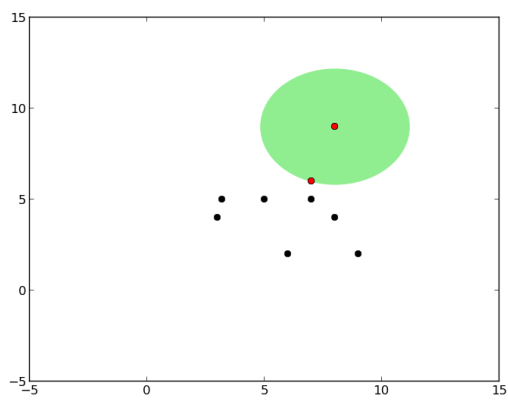
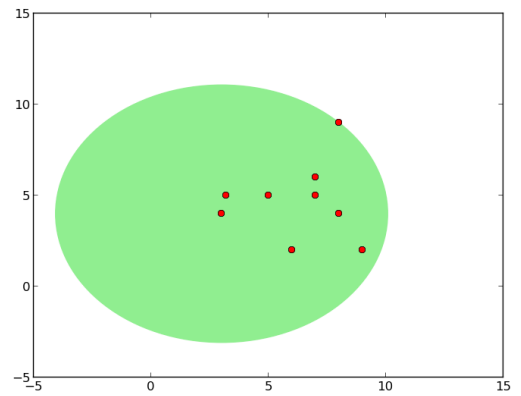
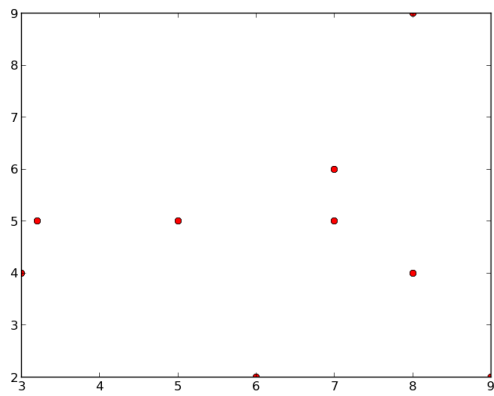
kNN'in model kullanmayan, model yerine verinin kendisini kullanan bir algoritma olarak tanittik. Peki "egitim" evresi sonrasi ele gecen kureler ve agac yapisi bir nevi model olarak gorulebilir mi?

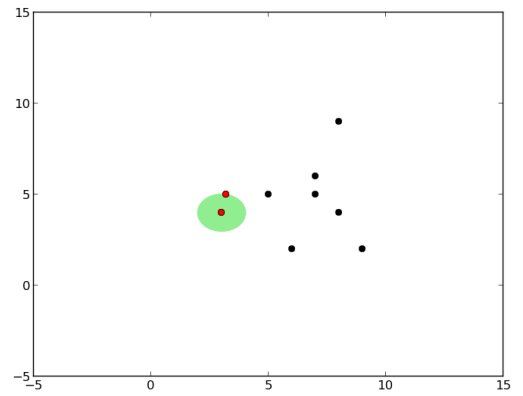
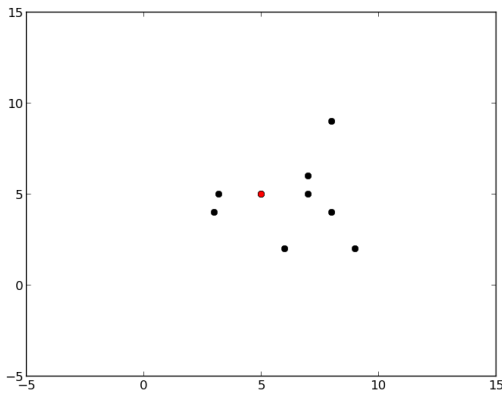
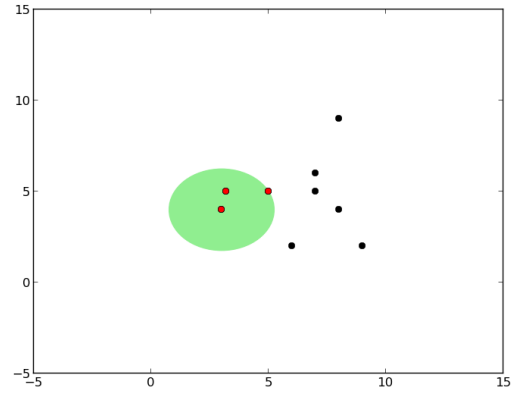
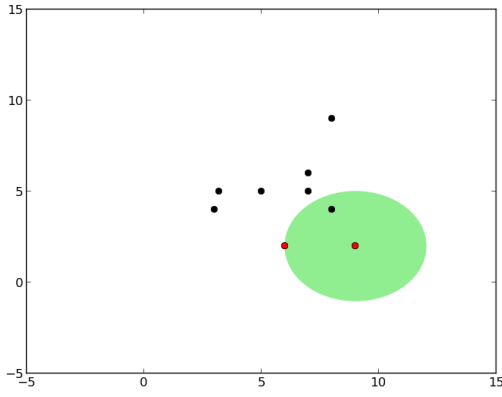
Bu onemli bir soru, ve bir bakima, evet agac yapisi sanki bir modelmis gibi duruyor. Fakat, mesela istatistiksel, grafiksel, yapay sinir aglari (neural net) baglaminda bakilirsa bu yapiya tam bir model denemez. Model bazli metotlarda model kurulunca veri atilir, ona bir daha bakilmaz. Fakat kNN, kure ve agac yapisini hala eldeki veriye erismek icin kullanmaktadir. Yani bir bakima veriyi "indeksliyoruz", ona erisimi kolaylastirip hizlandiriyoruz, ama ondan model cikartmiyoruz.

Not: Verilen Python kodu ve algoritma yakin noktaları hesapliyor sadece, onların etiketlerinden hareketle yeni noktanin etiketini tahmin etme asamasini gerceklestirmiyor. Fakat bu son asama isin en basit tarafı, egitim veri yapısına eklenecek bir etiket bilgisi ve siniflama sonrasi k noktanin agirlikli etiketinin hesabi ile basit sekilde gerceklestirilebilir.

```
!python plot_circles.py
```

Agaci olusumu sirasinda kurelerin grafigi alttadir.





Kaynaklar, Notlar

[1] Liu, Moore, Gray, New Algorithms for Efficient High Dimensional Non-parametric Classification

[2] Alpaydın, Introduction to Machine Learning

[3] Silme islemi ornek kodumuzda Python `del` ile gercekleştirildi. Eger bu islem de hizlandirilmak istenirse, en alt kure seviyesindeki veriler bir oncelik kuyrug (priority queue) üzerinde tutulabilir, ve silme islemi hep en sondaki elemani siler, ekleme islemi ise yeni elemani (hep sirali olan) listede dogru yere koyar.