En Yakin k-Komsu (k-Nearest Neighbor)

Yapay Ogrenim alaninda ornek bazli ogrenen algoritmalardan bilinen kNN, egitim verinin kendisini siniflama (classification) amacli olarak kullanir, yeni bir model ortaya cikartmaz. Algoritma soyle isler: etiketleri bilinen egitim verisi alinir ve bir kenarda tutulur. Yeni bir veri noktasi gorulunce bu veriye geri donulur ve o noktaya "en yakin" k tane nokta bulunur. Daha sonra bu noktalarin etiketlerine bakilir ve cogunlugun etiketi ne ise, o etiket yeni noktanin etiketi olarak kabul edilir.

"En yakin" sozu bir kordinat sistemi anlamina geliyor, ve kNN, aynen k-Means ve diger pek cok kordinatsal ogrenme yontemi gibi eldeki cok boyutlu veri noktalarinin elemanlarini bir kordinat sistemindeymis gibi gorur. Kiyasla mesela APriori gibi bir algoritma metin bazli veriyle oldugu gibi calisabilirdi.

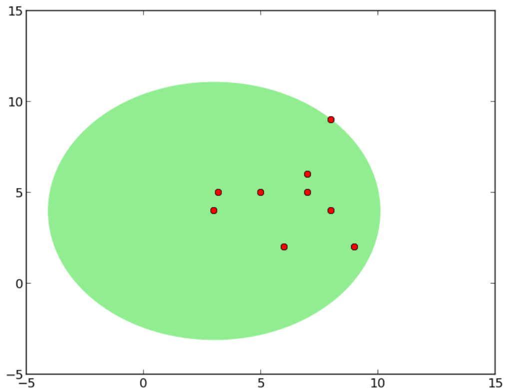
Peki arama baglaminda, bir veri obegi icinden en yakin noktalari bulmanin en basit yolu nedir? Listeyi bastan sonra taramak (kaba kuvvet yontemi -brute force-) ve her listedeki nokta ile yeni nokta arasindaki mesafeyi teker teker hesaplayip en yakin k taneyi icinden secmek bir yontem. Bu basit algoritmanin yuku $O(N)$'dir. Eger tek bir nokta ariyor olsaydik, bu kabul edilebilir olabilirdi. Fakat genellikle bir siniflayici algoritmanin surekli islemesi, mesela bir online site icin gunde milyonlarca kez bazi kararlari almasi gerekebilir. Bu durumda ve N'in cok buyuk oldugu sartlarda, ustteki hiz bile yeterli olmayabilir.

Arama islemini daha hizli yapmanin yollari var. Akilli arama algoritmalari kullanarak egitim verilerini bir agac yapisi uzerinden tarayip erisim hizini $O(\log N)$'e indirmek mumkundur.

Küre Agaçları (Ball Tree, BT)

Bir noktanin diger noktalara yakin olup olmadiginin hesabinda yapilmasi gereken en pahali islem nedir? Mesafe hesabidir. BT algoritmasinin puf noktasi bu hesabi yapmadan, noktalara degil, noktalari kapsayan "kurelere" bakarak hiz kazandirmasidir. Noktalarin her biri yerine o noktalari temsil eden kurenin mihenk noktasina (pivot -bu nokta kure icindeki noktalarin ortalamasal olarak merkezi de olabilir, herhangi bir baska nokta da-) bakilir, ve oraya olan mesafeye gore bir kure altindaki noktalara olabilecek en az ve en fazla uzaklik hemen anlasilmis olur.

Mesela elimizde alttaki gibi noktalar var ve kureyi olusturduk.

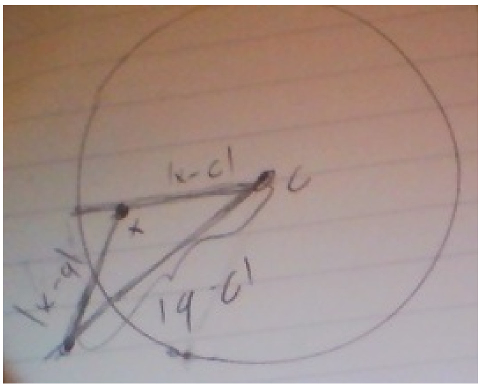


Bu kureyi kullanarak kure disindaki herhangi bir nokta q'nun kuredeki "diger tum noktalar x'e" olabilecegi en az mesafenin ne olacagini ucgensel esitsizlik ile anlayabiliriz.

Ucgensel esitsizlik

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

$||$ operatoru norm operatoru anlamina gelir ve uzaklik hesabinin genellestirilmis halidir. Konu hakkinda daha fazla detay icin *Fonksinel Analiz* ders notlarimiza bakabilirsiniz. Kisaca soylenmek istenen iki nokta arasinda direk gitmek yerine yolu uzatirsak, mesafe artacagidir. Tabii uzaklik, yol, nokta gibi kavramlar tamamen soyut matematiksel ortamda da isleyecek sekilde ayarlanmistir. Mesela mesafe (norm) kavramini degistirebiliriz, Oklitsel yerine Manhattan mesafesi kullaniriz, fakat bu kavram bir norm oldugu ve belirttigimiz uzayda gecerli oldugu icin ucgensel esitsizlik uzerine kurulmus tum diger kurallar gecerli olur.



Simdi diyelim ki disaridaki bir q noktasindan bir kure icindeki diger tum x noktalarina olan mesafe hakkinda bir seyler soylemek istiyoruz. Ustteki sekilden bir ucgensel esitsizlik cikartabiliriz,

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

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

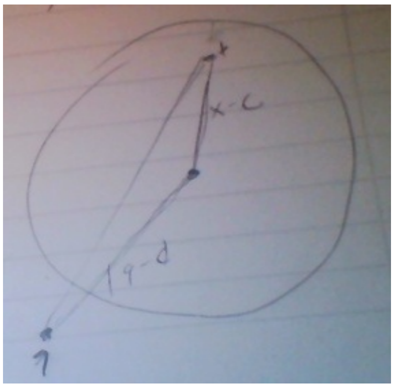
$radius + |x-q| \geq |q-c|$

Bunu nasil boyle kesin bilebiliyoruz? Cunku BT algoritmasi radius'u $|x-c|$'ten kesinlikle daha buyuk olacak sekilde secer). Simdi yaricapi saga gecirelim,

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

Boylece guzel bir tanim elde ettik. Yeni noktanin kuredeki herhangi bir nokta x'e olan uzakligi, yeni noktanin mihenke olan uzakliginin yaricapi cikartilmis halinden *muhakkak* 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 buyuk olacaktir. Ne elde ettik? Sadece bir yeni nokta, mihenk ve yaricap kullanarak kuredeki "diger tum noktalar hakkinda" bir irdeleme yapmamiz mumkun olacak. Bu noktalara teker teker bakmamiz gerekmeyecek. Bunun nasil ise yaradigini algoritma detaylarinda gorecegiz.

Benzer sekilde



Bu ne diyor?

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

$|x-c|$ yerine yaricap kullanirsak, sol taraf buyuyecegi icin buyukluk hala buyukluk olarak kalir,

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

Ve yine daha genel ve hizli hesaplanan bir kural elde ettik (onceki ifadeye benzemesi icin yer duzenlemesi yapalim)

$|q-x| \leq |q-c| + radius$

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) metotu 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 noktalari geometrik olarak kapsamakla goreli kureler olusturulur, kureler noktalari sahiplenmezler. Fakat bu r_{min} sayisina erisince (artik oldukca alttaki) kurelerin uzerine noktalar konacaktir.

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 aramalari 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 pprint
import numpy as np
import dist

__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):
    pivot = points[0]
    radius = np.max(dist.dist(points,pivot))
    node[0] = pivot
    node[1] = radius
    if len(points) <= __rmin__:
        node[2] = points
        return
    idx = np.argmax(dist.dist(points,pivot))
    furthest = points[idx,:]
    idx = np.argmax(dist.dist(points,furthest))
    furthest2 = points[idx,:]
    dist1=dist.dist(points,furthest)
    dist2=dist.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])
    form_tree(p2,node[3][1])

# 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 = dist.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 dist.norm(new_point,p) < radius:
                knn_matches_out[1].append([list(p)])
                if len(knn_matches_out[1]) == k+1:
                    tmp = [dist.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 = dist.norm(children[0][0],new_point)
        dist_child_2 = dist.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

if __name__ == "__main__":
    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)
    pp = pprint.PrettyPrinter(indent=4)
    print "tree"
    pp.pprint(tree)
    newp = np.array([7.,7.])
    dummyp = [np.Inf,np.Inf] # it should be removed immediately
    res = search_tree(newp,[np.Inf, [dummyp]], tree, k=2)
    print "done", res
```

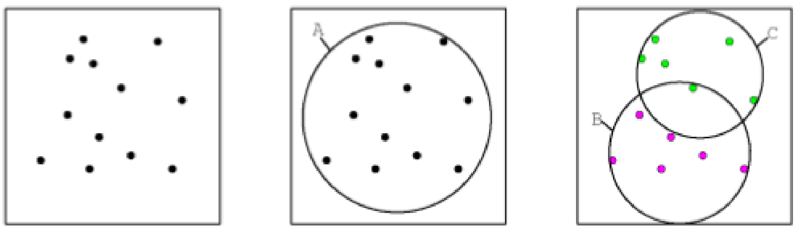
```
import numpy as np
import itertools

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)

if __name__ == "__main__":
    # small test
    points = np.array([[3.,3.],[2.,2.]])
    q = [1.,1.]
    print "diff", points-q
    print "dist", dist(points,q)
```

Procedure BallKNN (PS^{in}, $Node$)
begin
  if ($D^{\text{Node}}_{\text{minp}} \geq D_{\text{sofar}}$) **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)
    $PS^{out} = PS^{in}$
    $\forall \mathbf{x} \in Points(Node)$
    if ($|\ \mathbf{x} - \mathrm{q}\ | < D_{\text{sofar}}$) **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_{sofar}
  else /*If a non-leaf, explore the nearer of the two
    $node_1$ = child of Node closest to q child nodes, then the further. It is likely that
    $node_2$ = child of Node furthest from q further search will immediately prune itself.*/
    $PS^{temp} = BallKNN(PS^{in}, node_1)$
    $PS^{out} = BallKNN(PS^{temp}, node_2)$
end

Bu iki grup, o anda islemekte oldugumuz agac dugumun (node) iki cocuklari olacaktir. Cocuk noktalari kararlastirildiktan 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 yazmiyoruz, Numpy'in arka planda C ile yazilmis hizli rutinlerini kullaniyoruz.

Ek bazi bilgiler: kurelerin sinirlari kesisebilir.



Arama

Ustteki imaj icinde $BallKNN$ 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, Ingilizce koddaki P^{in}, P^{out}'un karsiligidirlar.

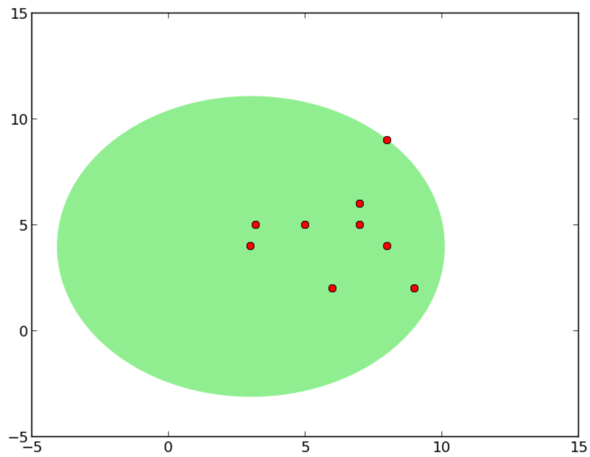
Arama algoritmasi soyle isler: simdi onceden olusturulmus kure hiyerarisisini ustten alta dogru gezmeye baslariz. Her basamakta yeni nokta ile o kurenin mihenkini, yaricapini kullanarak bir "alt sinir mesafe hesabi" yapariz, bu mesafe hesabinin arkasinda yatan dusunceyi yazinin basinda anlatmistik. Bu 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, Ingilizce kodda D_{sofar}.

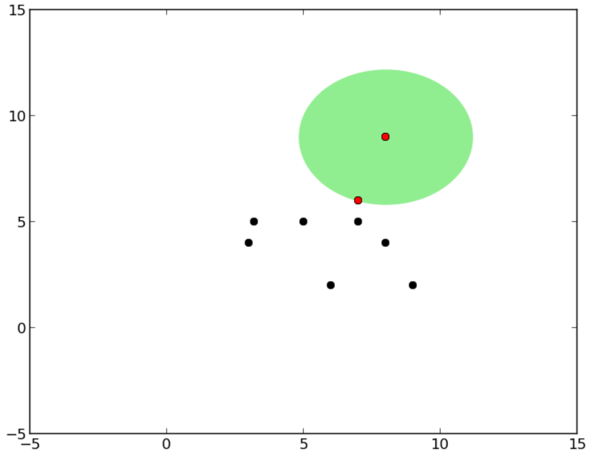
Bu irdeleme sonrasi (yani vs kuresinden yola devam karari arkasindan) isleme iki sekilde devam edilebilir, cunku bir kure iki turden olabilir; ya nihai en alt kurelerden biridir ve uzerinde gercek noktalar depolanmistir, ya da ara kurelerden biridir (sona gelmedik ama dogru yoldayiz, daha alta inmeye devam), o zaman fonksiyon yine ozyineli bir sekilde bu kurenin cocuklarina bakacaktir - her cocuk icin kendi kendini cagiracaktir. 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, vs.

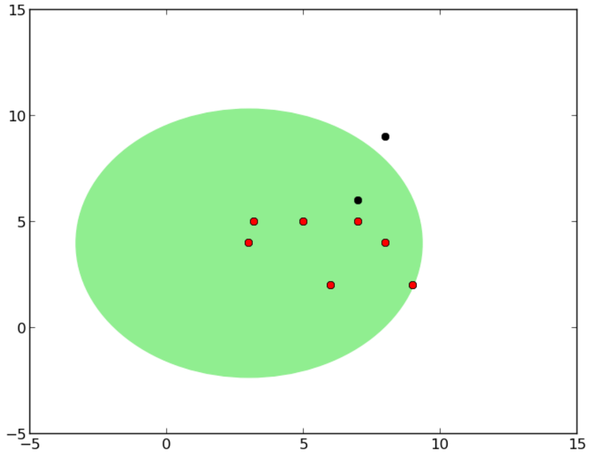
Daha alta inmemiz gereken birinci durumda yapilan iki cagrinin bir ozelligine dikkat cekmek isterim. Yeni noktanin bu cocuklara olan uzakligi da olculuyor, ve en once, en yakin olan cocuga dogru bir ozyineleme yapiliyor. Bu nokta cok onemli: niye boyle yapildi? Cunku icinde muhtemelen daha yakin noktalarin 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 noktalari buyuk bir ihtimalle zaten bulmus olacagiz. Bu durumda ikinci cagri yapilsa bile tek bir alt sinir hesabi o kurede dikkate deger hicbir nokta olamayacagini ortaya cikaracak (cunku en iyiler zaten elimizde), ve ikinci cocuga olan cagrilar hic alta inmeden pat diye geri donecektir, hic asagi inilmeyecektir.

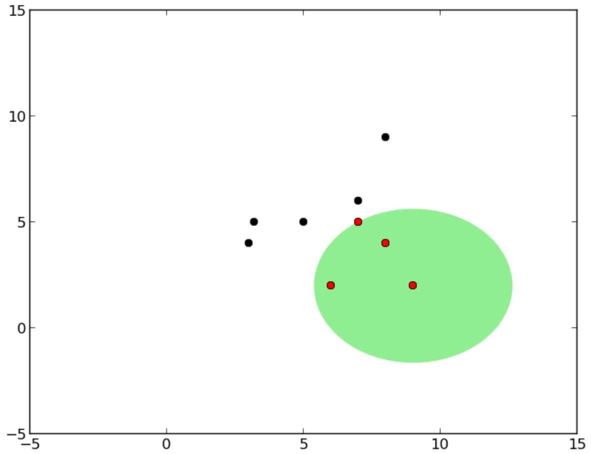
Bu muthis bir kazanimdir: zaten bu stratejiye liteturde "budamak (pruning)" adi veriliyor, bu da cok uygun bir kelime aslinda, cunku agaclarla ugrasiyoruz ve bir dugum (kure) ve onun altindaki hicbir alt kureye ugramaktan kurtularak o dallarin tamamini bir nevi "budamis" oluyoruz. Bir suru gereksiz islemden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

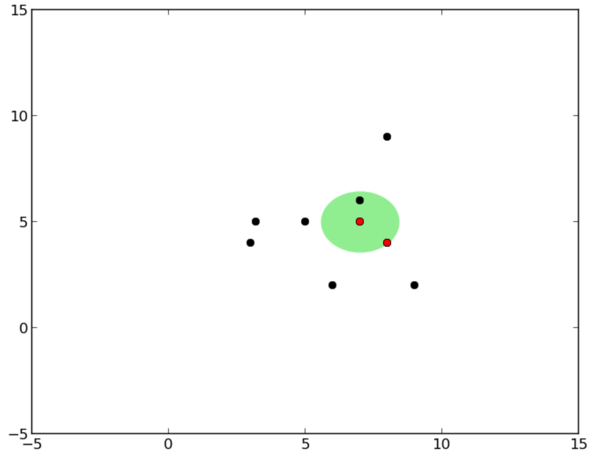
Agaci olusumu sirasinda kurelerin grafigi alttadir.

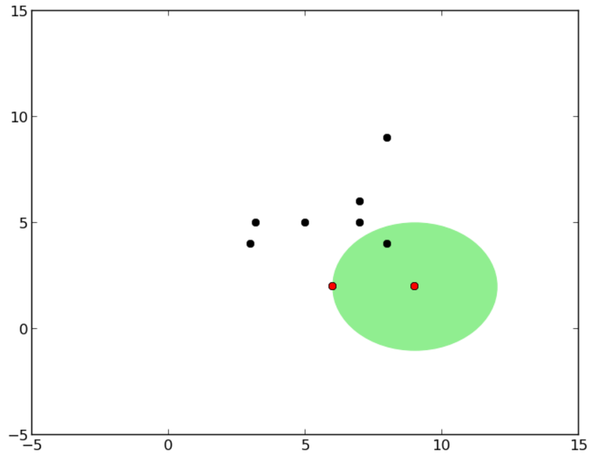


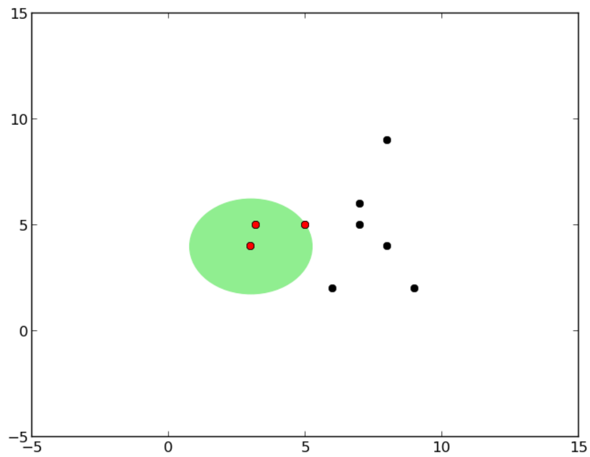

15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15

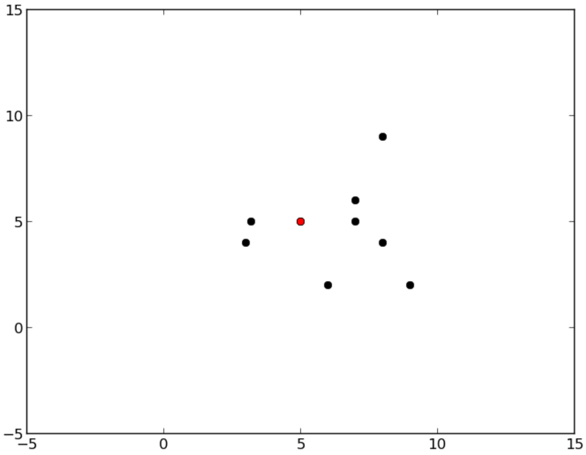

15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15

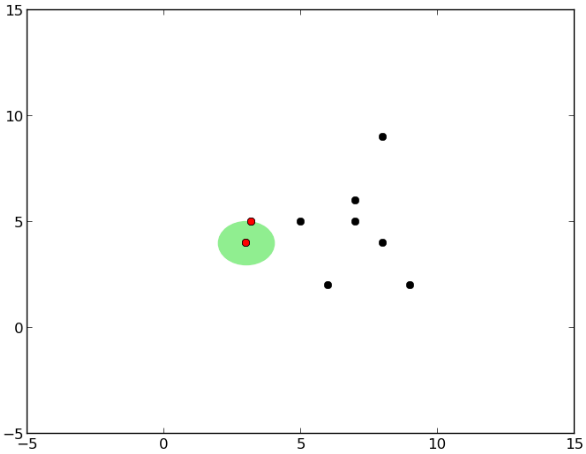

15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15


15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15


15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15


15
10
5
0
−5
−5
0
5
10
15





Kaynaklar

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