En Yakin k-Komsu (k-Nearest Neighbor)

Yapay Ogrenim alanında ornek bazlı ogrenen algoritmalardan bilinen kNN, egitim verinin kendisini siniflama (classification) amaclı olarak kullanır, yeni bir model ortaya cikartmaz. Algoritma soyle isler: etiketleri bilinen egitim verisi alinir ve bir kenarda tutulur. Yeni bir veri noktasi xqgorulunce bu veriye geri donulur ve o noktaya "en yakın" k tane nokta bulunur. Daha sonra bu noktaların etiketlerine bakılır ve cogunlugun 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] icin yakınlık acisindan [2 2] bulunmalı ve etiket olarak 1 sonucu dondurulmelidir.

Ustte tarif edilen basit bir ihtiyac, yontem gibi gorulebilir. Fakat yapay ogrenim ve yapay zeka cok boyutlarda oruntu tanima (pattern recognition) ile ugrasir, ve milyonlarca satirlik veri, onlarca boyut (ustteki ornekte 2, fakat cogunlukla cok daha fazla boyut vardir) isler hakikaten zorlasabilir. Mesela goruntu tanimada veri $\mathbf{M} \times \mathbf{N}$ boyutundaki dijital imajlar (duzlestirilince $M \cdot N$ boyutunda), ve onlarin icindeki resimlerin kime ait oldugu etiket bilgisi olabilir. kNN bu tur multimedya, cok boyutlu veri ortaminda basarili sekilde calisabilmektedir. Ayrica en yakin k komsunun icerigi tarifsel bilgi cikarimi (knowledge extraction) amaciyla da kullanilabilir [2].

"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-) listedeki her nokta ile yeni nokta arasindaki mesafeyi teker teker hesaplayip en yakin k taneyi icinden secerdi, bu bir yontemdir.. Bu basit algoritmanin yuku O(N)'dir. Eger tek bir nokta ariyor olsaydik, kabul edilebilir olabilirdi. Fakat genellikle bir siniflayici (classifier) algoritmasinin 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 olmayacaktir.

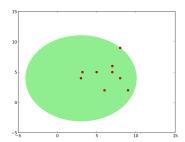
Arama islemini daha hizli yapmanin yollari var. Akilli arama algoritmalari kullanarak egitim verilerini bir agac yapisi uzerinden tarayip erisim hizini $O(\log N)$ 'e indirmek mumkundur.

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.

Not: Kure kavrami uc boyutta anlamli tabii ki, iki boyutta bir cemberden bahsetmek lazim, daha yuksek boyutlarda ise merkezi ve capi olan bir "hiper yuzeyden" bahsetmek lazim. Tarifi kolaylastirdigi icin cember ve kure tanimlarini kullaniyoruz.

Mesela elimizde alttaki gibi noktalar var ve kureyi olusturduk.

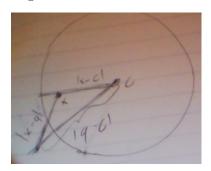


Bu kureyi kullanarak kure disindaki herhangi bir nokta q'nun kuredeki "diger tum noktalar x'e" olabilecegi en az mesafenin ne olacagini ucgensel esitsizlik ile anlayabiliriz.

Ucgensel esitsizlik

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

|| 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,

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

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,

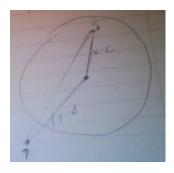
$$radius + |x - q| \ge |q - c|$$

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

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

Boylece guzel bir tanim elde ettik. Yeni noktanin kuredeki herhangi bir noktax'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?

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

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

$$|q-c|+radius > |q-x|$$

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

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

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.

```
\_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(points,pivot))
    node[0] = pivot
    node[1] = radius
    if len(points) <= __rmin__:</pre>
        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]</pre>
    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 = 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:</pre>
                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:</pre>
            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)
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
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,
                           array([ 7., 5.]),
                      1.4142135623730951,
                           array([[ 7., 5.],
       [8., 4.]]),
                           [None, None]],
                       array([ 9., 2.]),
                           3.0,
                           array([[ 9., 2.],
       [6., 2.]]),
                           [None, None]]]],
               array([ 3., 4.]),
                   2.2360679774997898,
                   None,
                   [
                           array([5., 5.]),
                           0.0,
                           array([[ 5., 5.]]),
                           [None, None]],
                       array([ 3., 4.]),
                           1.019803902718557,
                           array([[ 3. , 4. ],
       [3.2, 5.]]),
                           [None, None]]]]]]]
None
done [1.0, [[[8.0, 9.0]], [[7.0, 6.0]]]]
```

```
Procedure BallKNN (PSin, Node)
begin
  if (D_{\min}^{\text{Node}} \ge D_{\text{sofar}}) then
                                                /* If this condition is satisfied, then impossible
    Return PSin unchanged.
                                                   for a point in Node to be closer than the
                                                    previously discovered kth nearest neighbor.*/
  else if (Node is a leaf)
    PS^{out} = PS^{in}
    \forall \mathbf{x} \in Points(Node)
    if (|\mathbf{x} - \mathbf{q}| < D_{\text{sofar}}) then
                                                /* If a leaf, do a naive linear scan */
      add x to PSout
      if (|PS^{out}| = k+1) then
        remove furthest neighbor from PSout
        update D_{sofar}
                                                  /*If a non-leaf, explore the nearer of the two
  else
    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 bir-birinden 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

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 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, 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 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 [3], 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.

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 uygulanabilirligini 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 gecerliligini normlar uzerinde gecerli ucgensel esitsizlik uzerinde ispat ettim.

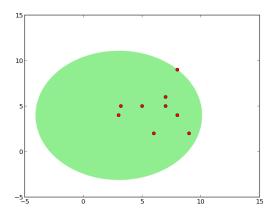
Model

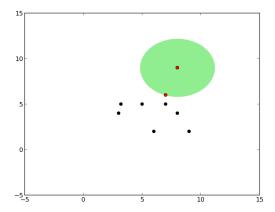
kNN'in model kullanmayan, model yerine verinin kendisini kullanan bir algoritma olarak tanittik. Peki "egitim" evresi sonrasi ele gecen kureler ve agac yapisi bir nevi model olarak gorulebilir mi?

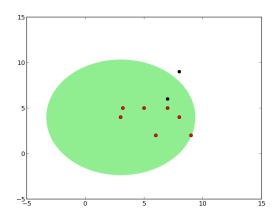
Bu onemli bir soru, ve bir bakima, evet agac yapisi sanki bir modelmis gibi duruyor. Fakat, mesela istatistiksel, grafiksel, yapay sinir aglari (neural net) baglaminda bakilirsa bu yapiya tam bir model denemez. Model bazli metotlarda model kurulunca veri atilir, ona bir daha bakilmaz. Fakat kNN, kure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

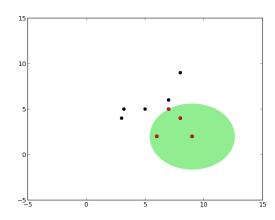
Not: Verilen Python kodu ve algoritma yakin noktalari hesapliyor sadece, onlarin etiketlerinden hareketle yeni noktanin etiketini tahmin etme asamasini gerceklestirmiyor. Fakat bu son asama isin en basit tarafi, egitim veri yapisina eklenecek bir etiket bilgisi ve siniflama sonrasi k noktanin agirlikli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

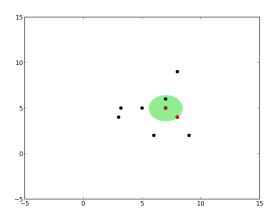
Agaci olusumu sirasinda kurelerin grafigi alttadir.

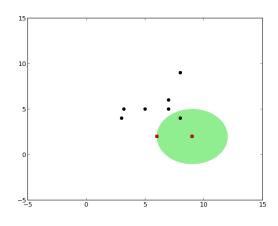


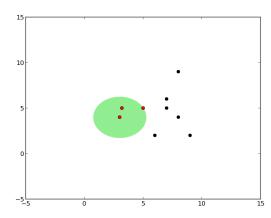


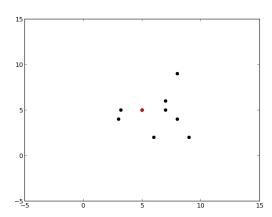


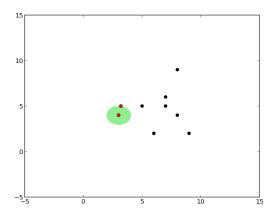












Kaynaklar, Notlar

- [1] Liu, Moore, Gray, New Algorithms for Efficient High Dimensional Non-parametric Classification
- [2] Alpaydin, Introduction to Machine Learning
- [3] Silme islemi ornek kodumuzda Python del ile gerceklestirildi. Eger bu islem de hizlandirilmak istenirse, en alt kure seviyesindeki veriler bir oncelik kuyrugu (priority queue) uzerinde tutulabilir, ve silme islemi hep en sondaki elemani siler, ekleme islemi ise yeni elemani (hep sirali olan) listede dogru yere koyar.