

Машинное обучение

Лекция 3
Метод k ближайших соседей
Линейная регрессия

Андрей Нарцев
andrei.nartsev@gmail.com
anartsev@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2025

План лекции

Overview

Метод k ближайших соседей

- Оценка обобщающей способности и подбор гиперпараметров
- Взвешенный kNN
- kNN для задачи регрессии

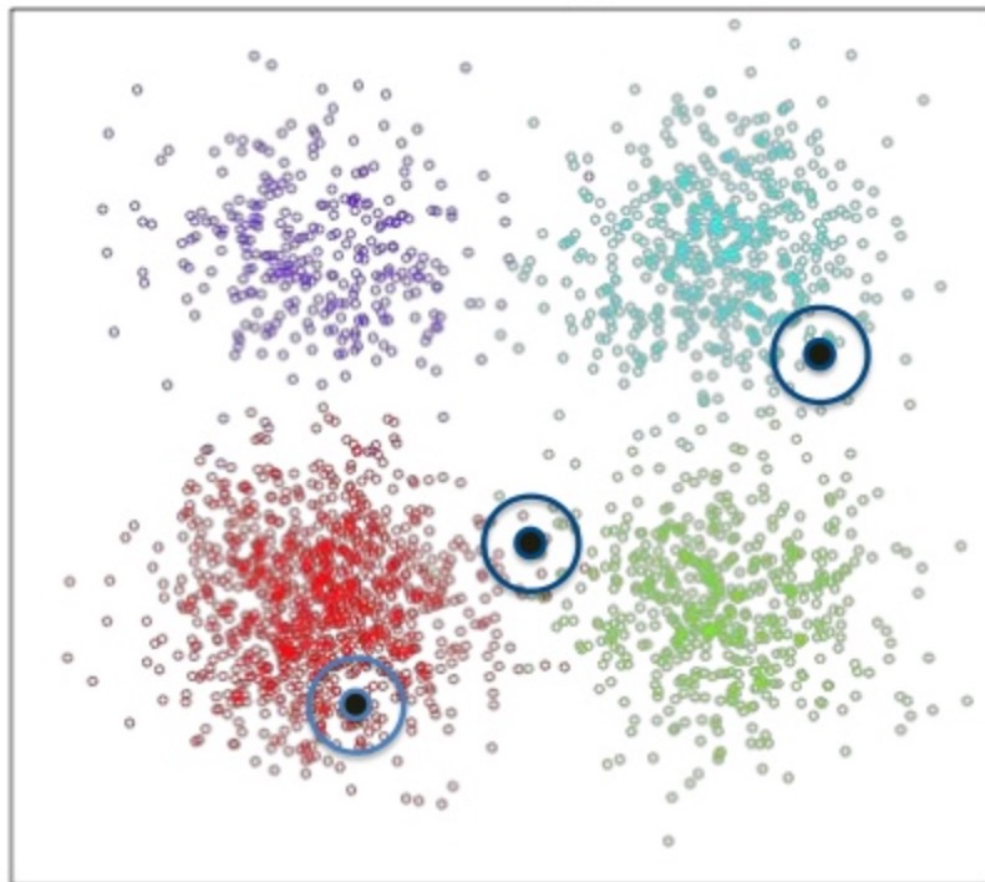
Линейная регрессия (intro)

Overview

- Основные понятия:
 - пространство объектов
 - пространство ответов,
 - признаковое описание,
 - обучающая выборка,
 - функционал ошибки
- Типы задач:
 - обучение с учителем: регрессия, классификация, ранжирование
 - обучение без учителя: кластеризация, понижение размерности
- Типы признаков:
 - бинарные
 - порядковые
 - категориальные
 - числовые

Гипотеза компактности и knn

Гипотеза компактности



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:
 $\rho(x, x_{(1)}) \leq \rho(x, x_{(2)}) \leq \dots \leq \rho(x, x_{(\ell)})$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \dots, x_{(k)}$
- 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:

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

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

Измерение ошибки модели

Вопросы

- Как сравнить две модели?
- Как подобрать k и метрику?

Accuracy

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Всегда смотрите на баланс классов!
- Доля верных ответов не обязательно меняется от 0.5 до 1 для разумных моделей

Как выбрать k?

Обучающая выборка

| На каком классе чаще всего ездит | Ближайшее к дому метро | Способ оплаты | Согласился повысить категорию? |
|----------------------------------|------------------------|---------------|--------------------------------|
| Эконом | Таганская | Карта | да |
| Комфорт | Юго-Западная | Наличные | нет |
| Комфорт | Строгино | Карта | да |

Применяем модель:

| | | | |
|--------|-----------|-------|---|
| Эконом | Таганская | Карта | ? |
|--------|-----------|-------|---|

Как выбрать k ?

Обучающая выборка

| На каком классе чаще всего ездит | Ближайшее к дому метро | Способ оплаты | Согласился повысить категорию? |
|----------------------------------|------------------------|---------------|--------------------------------|
| Эконом | Таганская | Карта | да |
| Комфорт | Юго-Западная | Наличные | нет |
| Комфорт | Строгино | Карта | да |

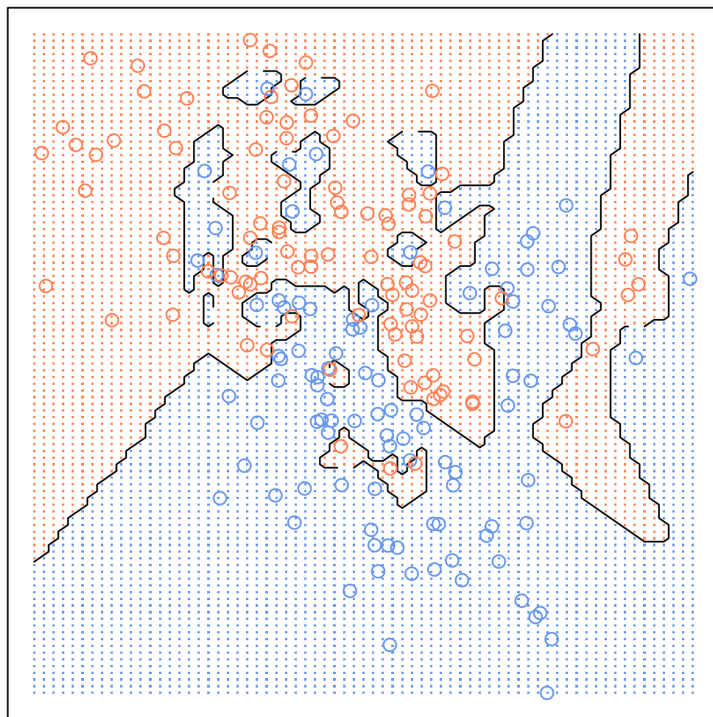
Применяем модель:

| | | | |
|--------|-----------|-------|----|
| Эконом | Таганская | Карта | да |
|--------|-----------|-------|----|

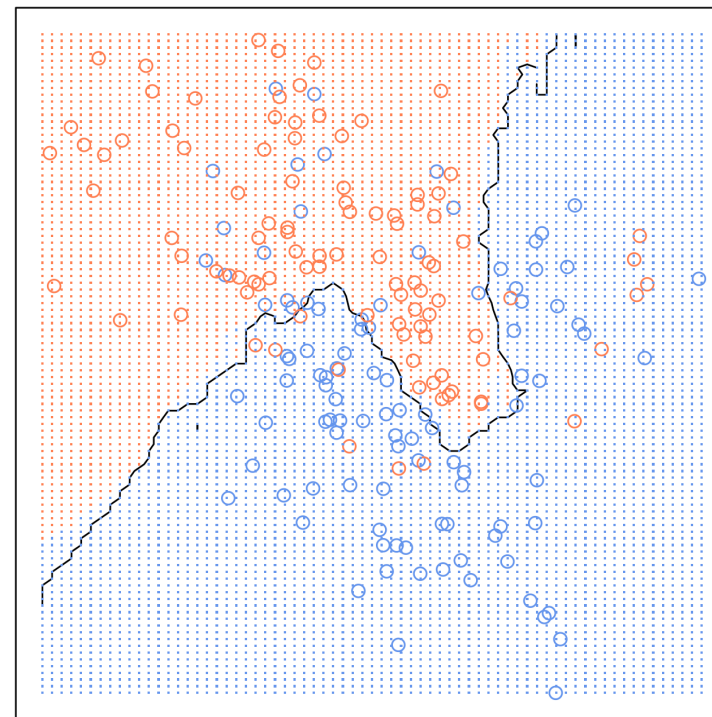
С точки зрения качества на обучающей выборке лучший выбор $k = 1$

Как выбрать k ?

1-nearest neighbours



20-nearest neighbours



<https://kevinzakka.github.io/2016/07/13/k-nearest-neighbor/>

Гиперпараметры

- Нельзя подбирать k по обучающей выборке — **гиперпараметр**
- Нужно использовать дополнительные данные

Обобщающая способность

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с
занятий

Переобучение (overfitting)

Хорошее качество на обучении
Низкое качество на новых данных

Разобраться в предмете и
усвоить алгоритмы решения
задач

Обобщение (generalization)

Хорошее качество на обучении
Хорошее качество на новых
данных

Отложенная выборка



Обучение



Тест

Отложенная выборка



- Слишком большое обучение — тестовая выборка нерепрезентативна
- Слишком большой тест — модель не сможет обучиться
- Обычно: 70/30, 80/20

Кросс-валидация

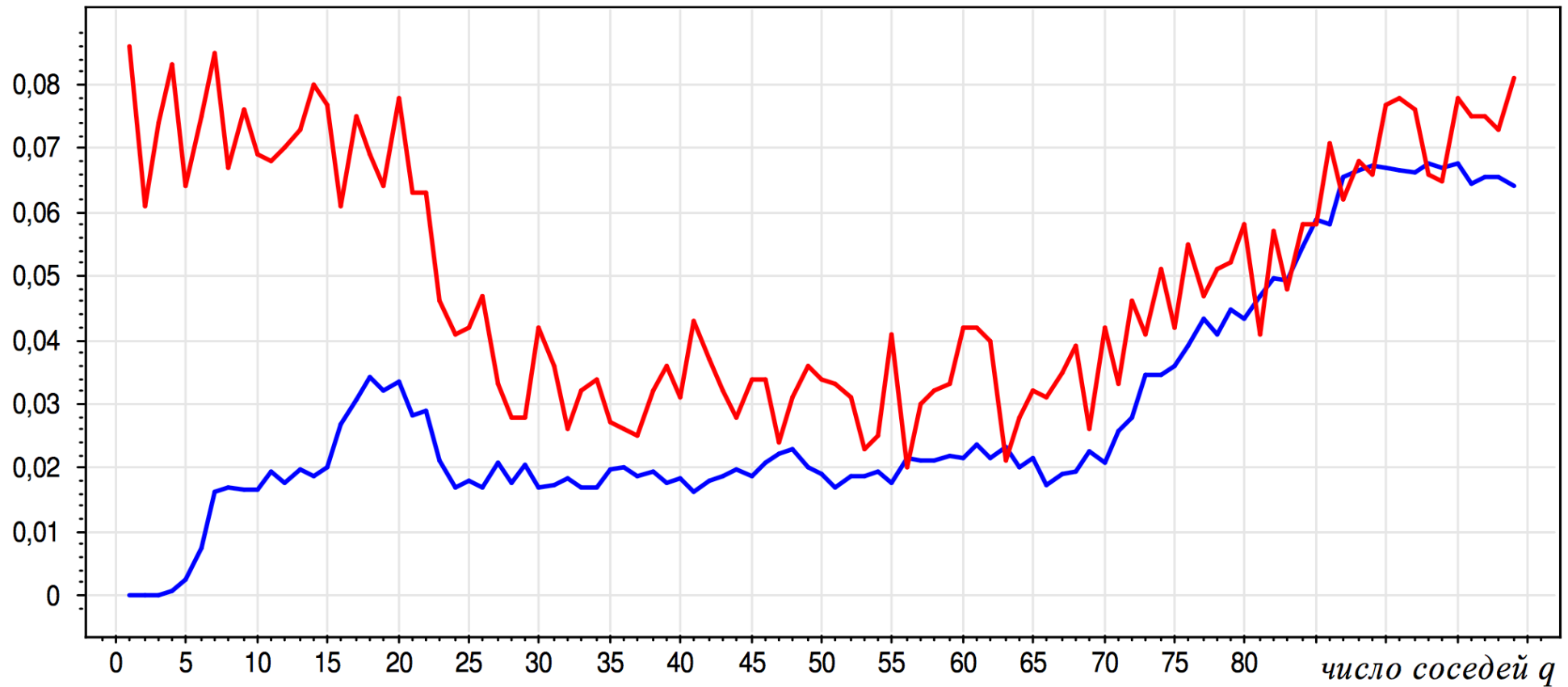


Кросс-валидация

- Надёжнее отложенной выборки, но медленнее
- Параметр — количество разбиений n (фолдов, folds)
- Хороший, но медленный вариант — $n = \ell$ (leave-one-out)
- Обычно: $n = 3$ или $n = 5$ или $n = 10$

Подбор числа соседей

частота ошибок



Чуть больше терминов

- После подбора всех гиперпараметров стоит проверить на совсем новых данных, что модель работает
- Обучающая выборка — построение модели
- Валидационная выборка — подбор гиперпараметров модели
- Тестовая выборка — финальная оценка качества модели

Метод k ближайших соседей с
весами

kNN: применение

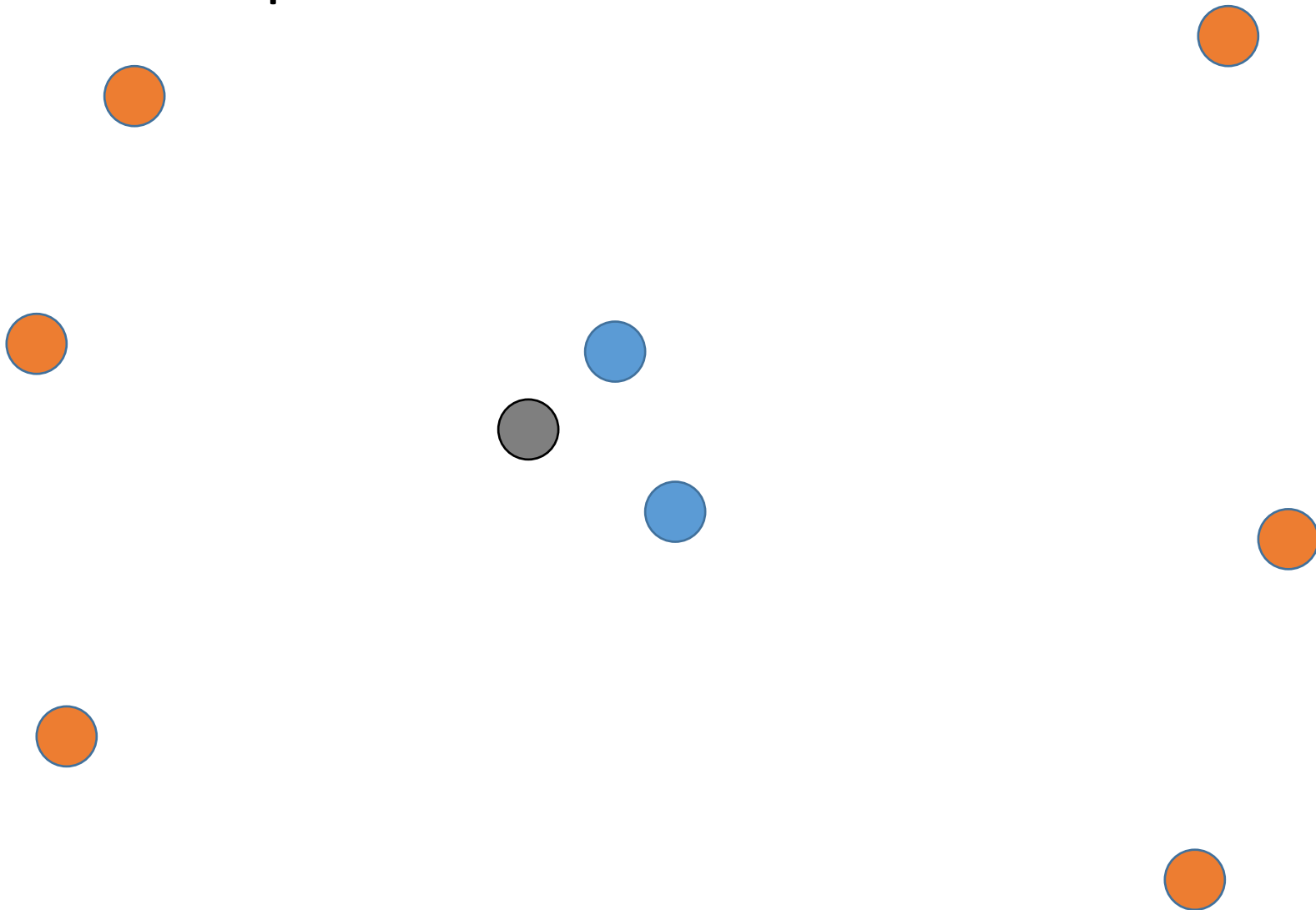
Дано: новый объект x

Применение модели:

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

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

Проблема с расстояниями



Взвешенный knn

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

Варианты:

- $w_i = \frac{k+1-i}{k}$
- $w_i = q^i$
- Не учитывают сами расстояния

Взвешенный knn

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

Парзеновское окно:

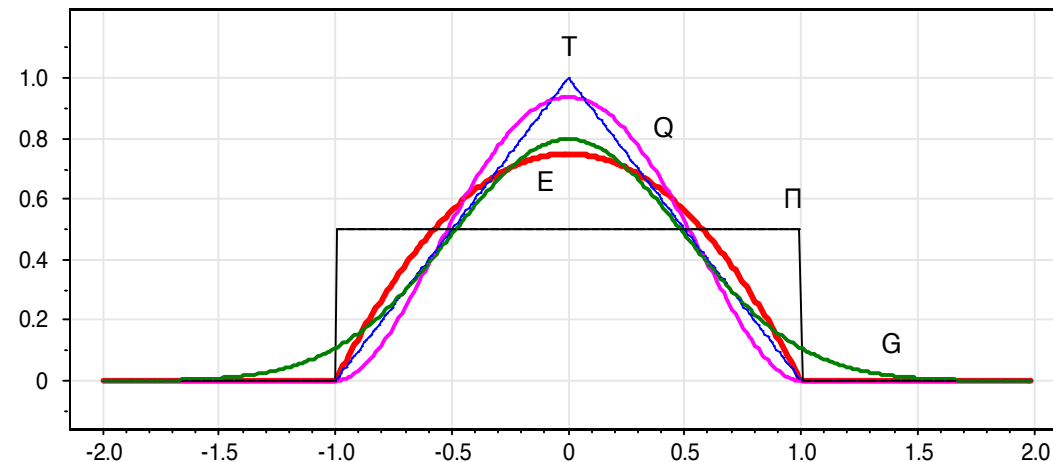
- $w_i = K \left(\frac{\rho(x, x_{(i)})}{h} \right)$
- K — ядро
- h — ширина окна

Ядра для весов

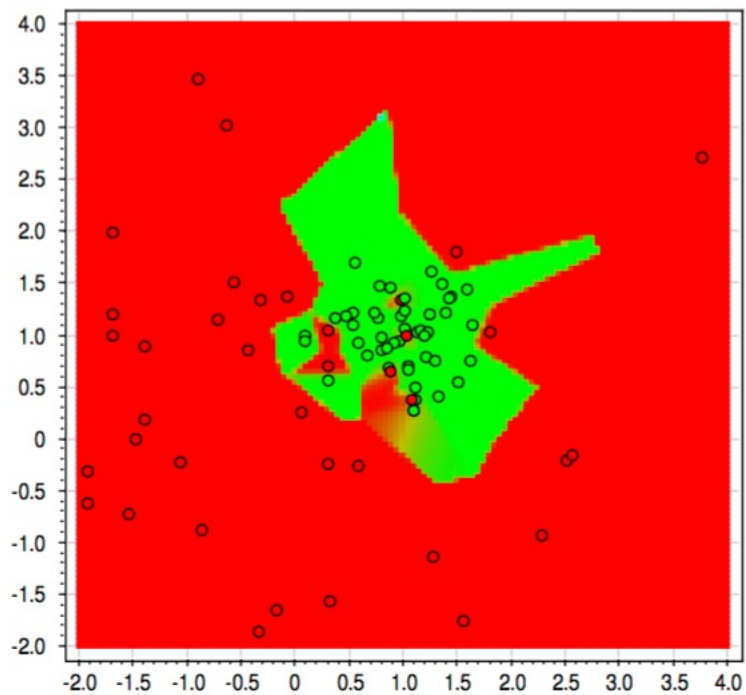
- Гауссовское ядро:

$$K(z) = (2\pi)^{-0.5} \exp\left(-\frac{1}{2}z^2\right)$$

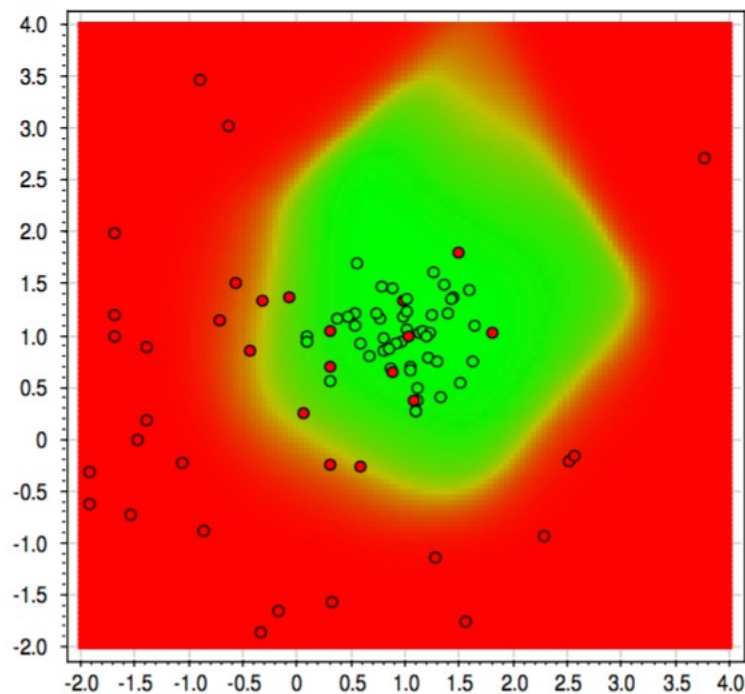
- И много других:



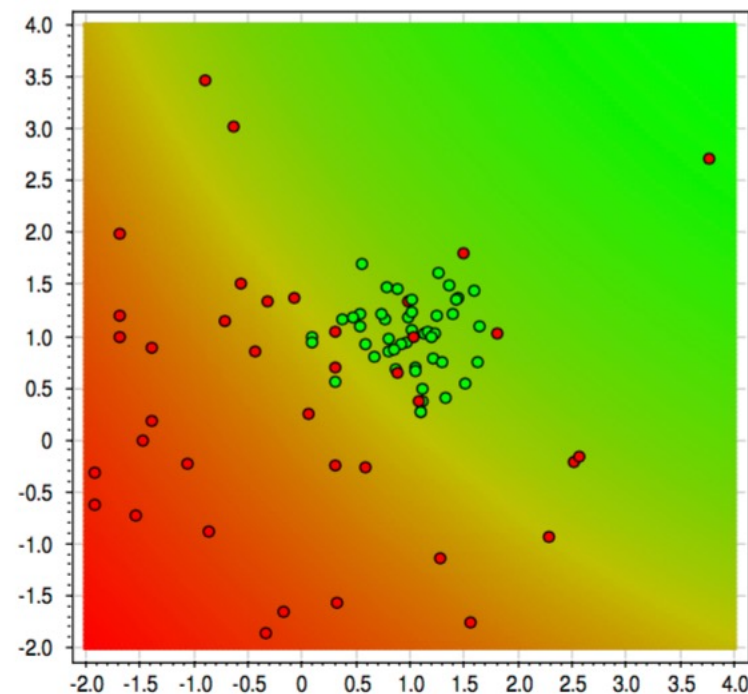
Ядра для весов



$h = 0.05$



$h = 0.5$



$h = 5$

kNN для регрессии

kNN: обучение

- Дано: обучающая выборка $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$
- Задача регрессии (ответы из множества $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$)
- Обучение модели:
 - Запоминаем обучающую выборку X

kNN: применение

Дано: новый объект x

Применение модели:

- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до нового объекта:
 $\rho(x, x_{(1)}) \leq \rho(x, x_{(2)}) \leq \dots \leq \rho(x, x_{(\ell)})$
- Выбираем k ближайших объектов: $x_{(1)}, \dots, x_{(k)}$
- Усредняем ответы:

$$a(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{(i)}$$

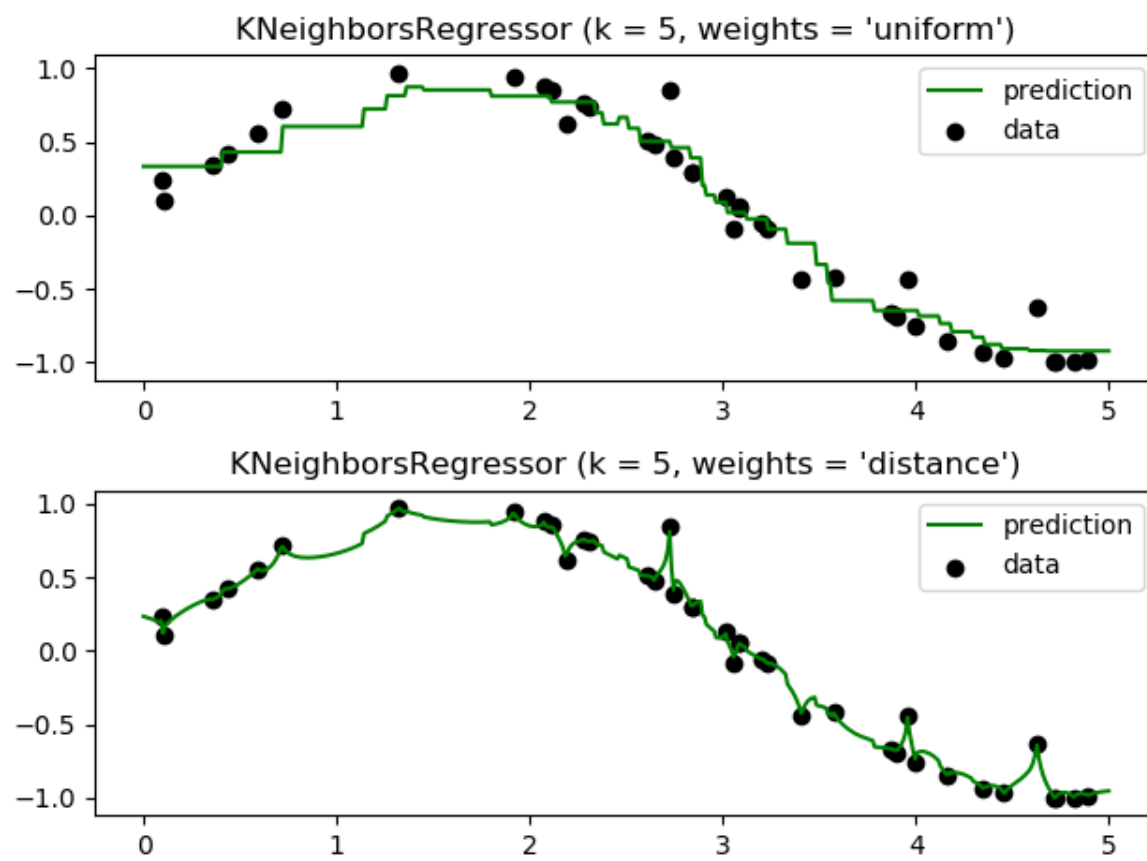
kNN: применение

- Можно добавить веса:

$$a(x) = \frac{\sum_{i=1}^k w_i y_{(i)}}{\sum_{i=1}^k w_i}$$

- $w_i = K \left(\frac{\rho(x, x_{(i)})}{h} \right)$
- Формула Надарая-Ватсона

kNN: применение



Функция потерь для регрессии

- Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y, a) = (a - y)^2$$

- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

Функция потерь для регрессии

- Ещё один вариант — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

- Слабее штрафует за серьёзные отклонения от правильного ответа

Резюме

Плюсы kNN

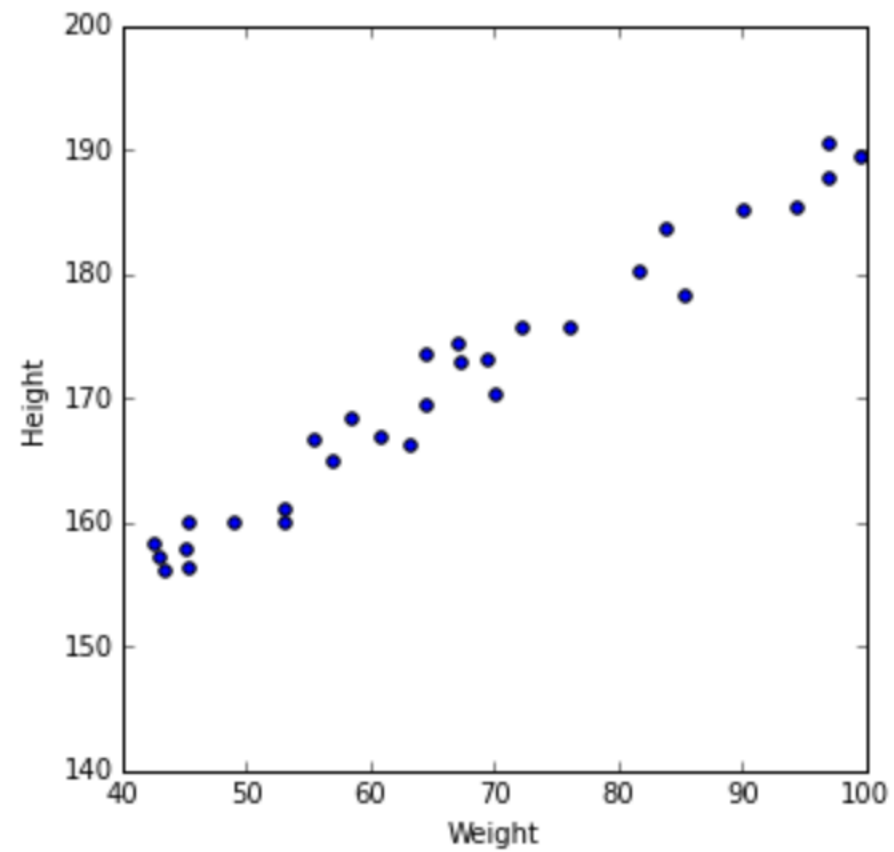
- Если данных много и для любого объекта найдётся похожий в обучающей выборке, то это лучшая модель
- Очень простое обучение
- Мало гиперпараметров
- Бывают задачи, где гипотеза компактности уместна
 - Классификация изображений
 - Классификация текстов на много классов

Минусы kNN

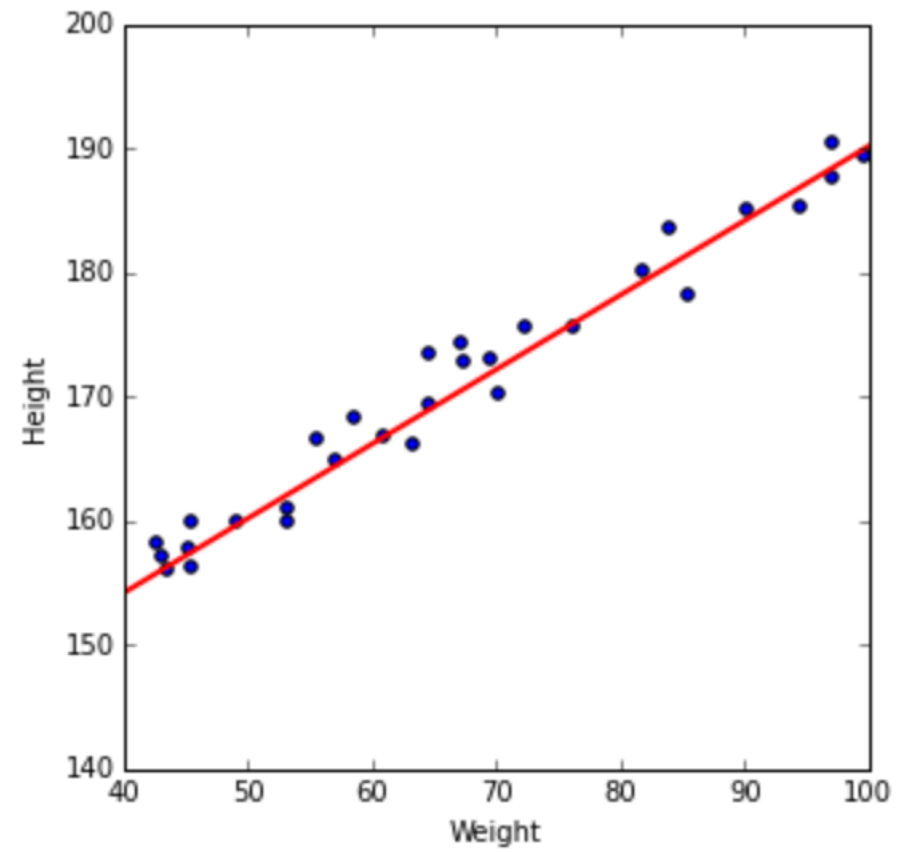
- Часто другие модели оказываются лучше
- Надо хранить в памяти всю обучающую выборку
- Искать k ближайших соседей довольно долго
- Мало способов настроить модель

Линейная регрессия

Парная регрессия



Парная регрессия



Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1 x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- w_1 — тангенс угла наклона
- w_0 — где прямая пересекает ось ординат

Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1x_1 + \dots + w_dx_d$$

- Количество параметров: $d + 1$

Много признаков

Запишем через скалярное произведение:

$$\begin{aligned} a(x) &= w_0 + w_1x_1 + \dots + w_dx_d = \\ &= w_0 + \langle w, x \rangle \end{aligned}$$

Будем считать, что есть признак, всегда равный единице:

$$\begin{aligned} a(x) &= w_1x_1 + \dots + w_dx_d = \\ &= w_1 * 1 + w_2x_2 + \dots + w_dx_d = \\ &= \langle w, x \rangle \end{aligned}$$

Применимость линейной регрессии

Модель линейной регрессии

$$a(x) = w_1x_1 + \dots + w_dx_d = \langle w, x \rangle$$

- Нет гарантий, что целевая переменная именно так зависит от признаков
- Надо формировать признаки так, чтобы модель подходила

Предсказание стоимости квартиры

- Признаки: площадь, район, расстояние до метро
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры
- Линейная модель:

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ & + w_2 * (\text{район}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) \end{aligned}$$

Предсказание стоимости квартиры

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ & + w_2 * (\text{район}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) \end{aligned}$$

Предсказание стоимости квартиры

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ & + w_2 * (\text{район}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) \end{aligned}$$

- За каждый квадратный метр добавляем w_1 к прогнозу

Предсказание стоимости квартиры

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ & + w_2 * (\text{район}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) \end{aligned}$$

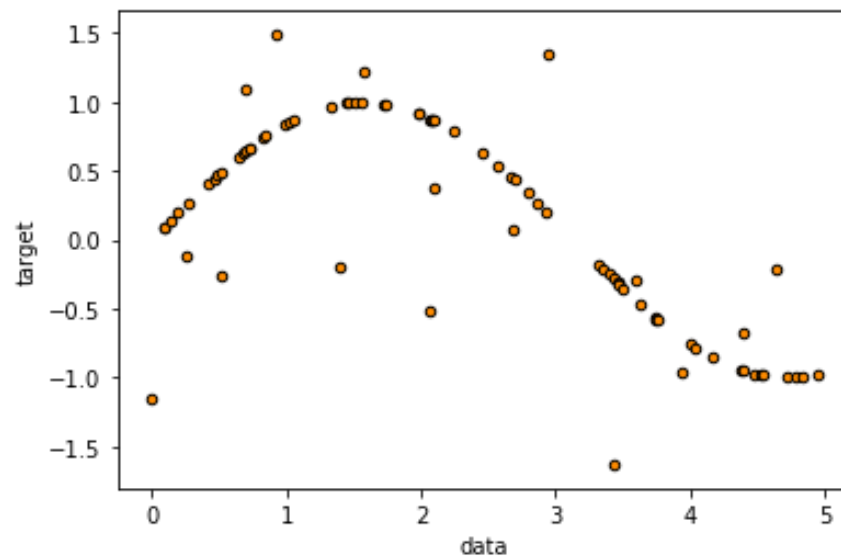
- Что-то странное

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$




Кодирование категориальных признаков

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j : $[x_j = u_1], \dots, [x_j = u_m]$
- One-hot кодирование

Кодирование категориальных признаков

| Район | | ЦАО | ЮАО | САО |
|-------|--|-----|-----|-----|
| ЦАО | | 1 | 0 | 0 |
| ЮАО | | 0 | 1 | 0 |
| ЦАО | | 1 | 0 | 0 |
| САО | | 0 | 0 | 1 |
| ЮАО | | 0 | 1 | 0 |

Кодирование категориальных признаков

| Район | | ЦАО | ЮАО | САО |
|-------|--|-----|-----|-----|
| ЦАО |  | 1 | 0 | 0 |
| ЮАО | | 0 | 1 | 0 |
| ЦАО | | 1 | 0 | 0 |
| САО | | 0 | 0 | 1 |
| ЮАО | | 0 | 1 | 0 |
| | | | | |

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{квартира в ЦАО?})$$

$$+ w_3 * (\text{квартира в ЮАО?})$$

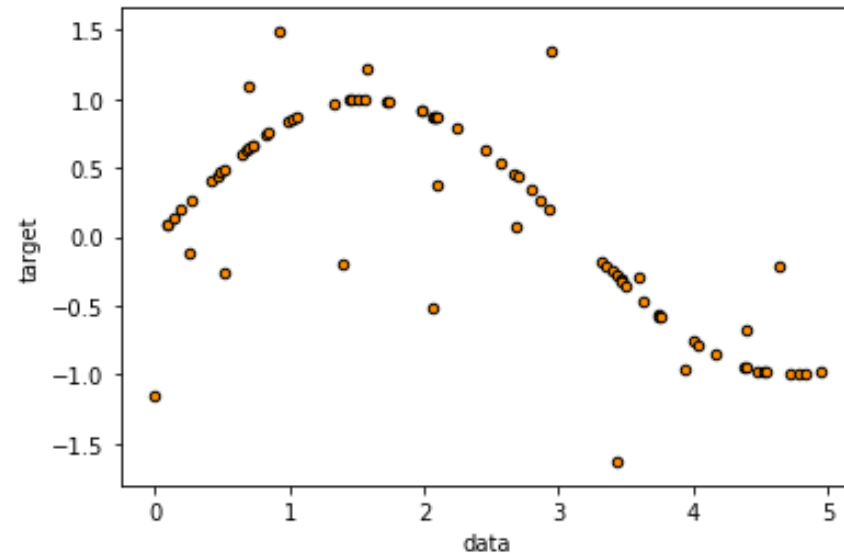
$$+ w_4 * (\text{квартира в САО?})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

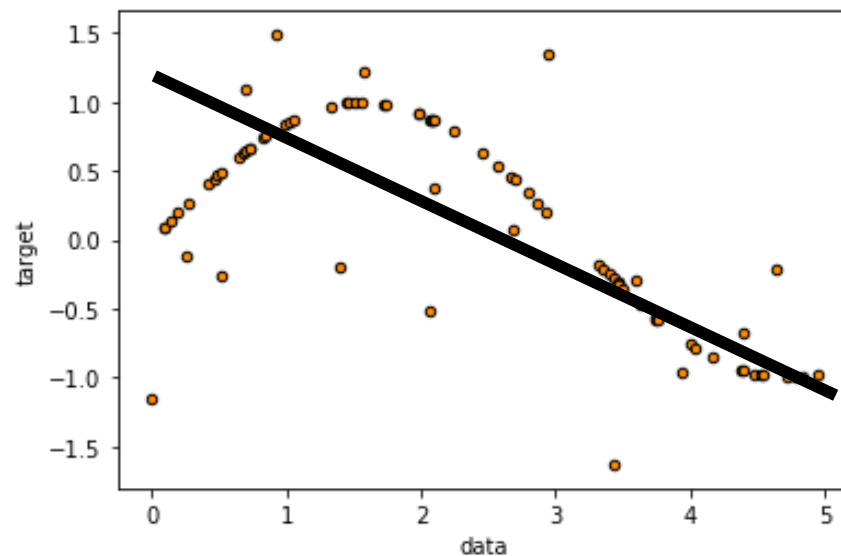


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

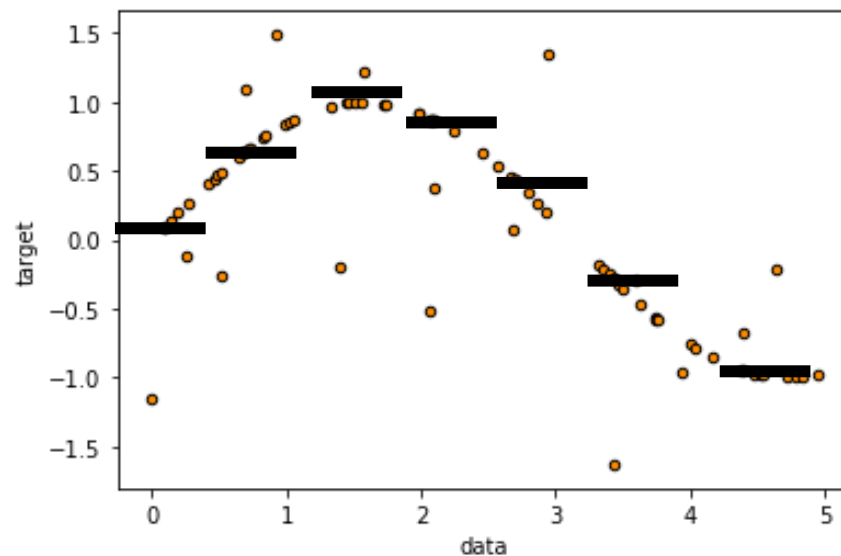
$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$



Предсказание стоимости квартиры

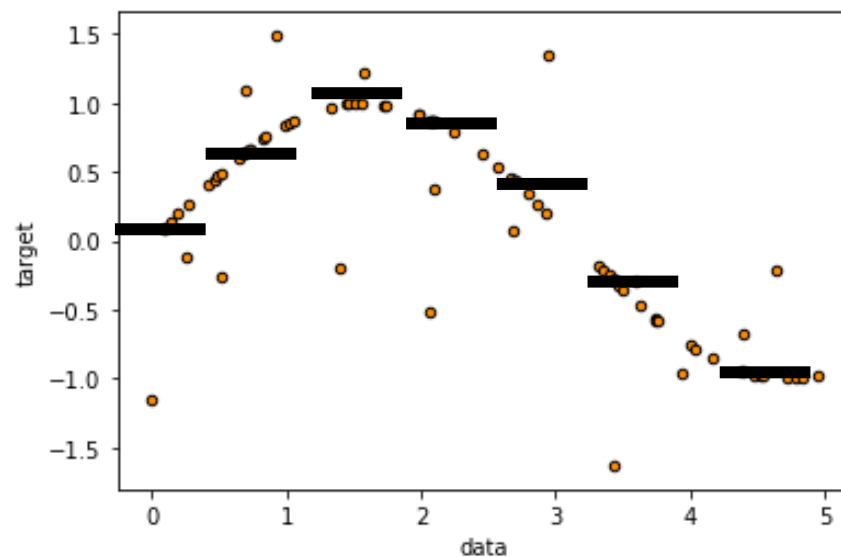
$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ + w_2 * (\text{район}) \\ + w_3 * (\text{расстояние до метро})$$



Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) \\ + w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * [t_0 \leq x_3 < t_1] + \dots + w_{3+n} [t_{n-1} \leq x_3 < t_n]$$



Нелинейные признаки

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2 \\ & + w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2 \\ & + w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \dots \end{aligned}$$

Линейные модели

- Модель линейной регрессии хороша, если признаки сделаны специально под неё
- Пример: one-hot кодирование категориальных признаков или бинаризация числовых признаков