

Введение в анализ данных

Лекция 2. Метод k ближайших соседей - kNN

Гипотеза компактности и knn

Как отличить ель от сосны?



Как отличить ель от сосны?



Как отличить ель от сосны?



Ель:

- Ветки смотрят вверх
- Ствол не видно
- Густые иголки
- Цвет ближе к зелёному



Сосна:

- Ветки параллельны земле
- Ствол видно
- Иголки более редкие
- Цвет ближе к жёлтому

Как отличить ель от сосны?



Ветки вверх
Ствол не видно
Густые иголки
Цвет ближе к синему

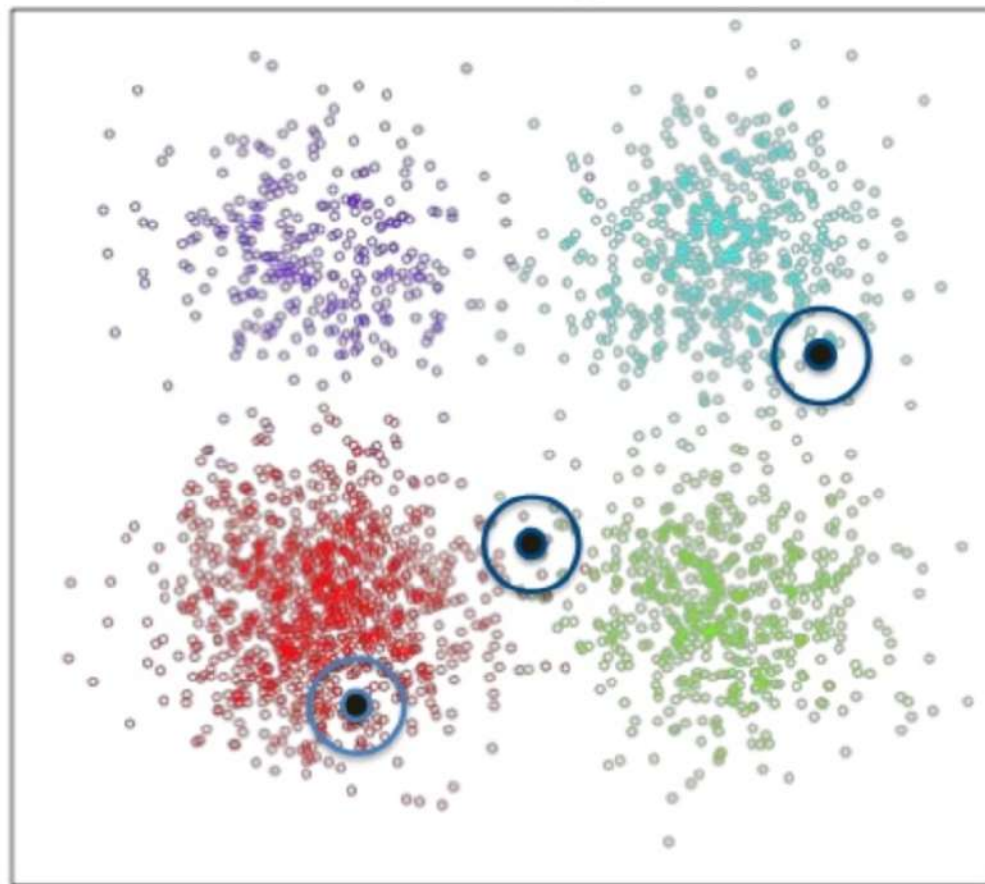


Скорее всего ель

Что такое обучение?

- Запоминаем примеры (объекты и ответы)
- Когда приходит новый объект, сравниваем с запомненными примерами
- Выдаём ответ от наиболее похожего примера

Гипотеза компактности



Гипотеза компактности



Гипотеза компактности

Если два объекта похожи друг на друга, то ответы на них
тоже похожи

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

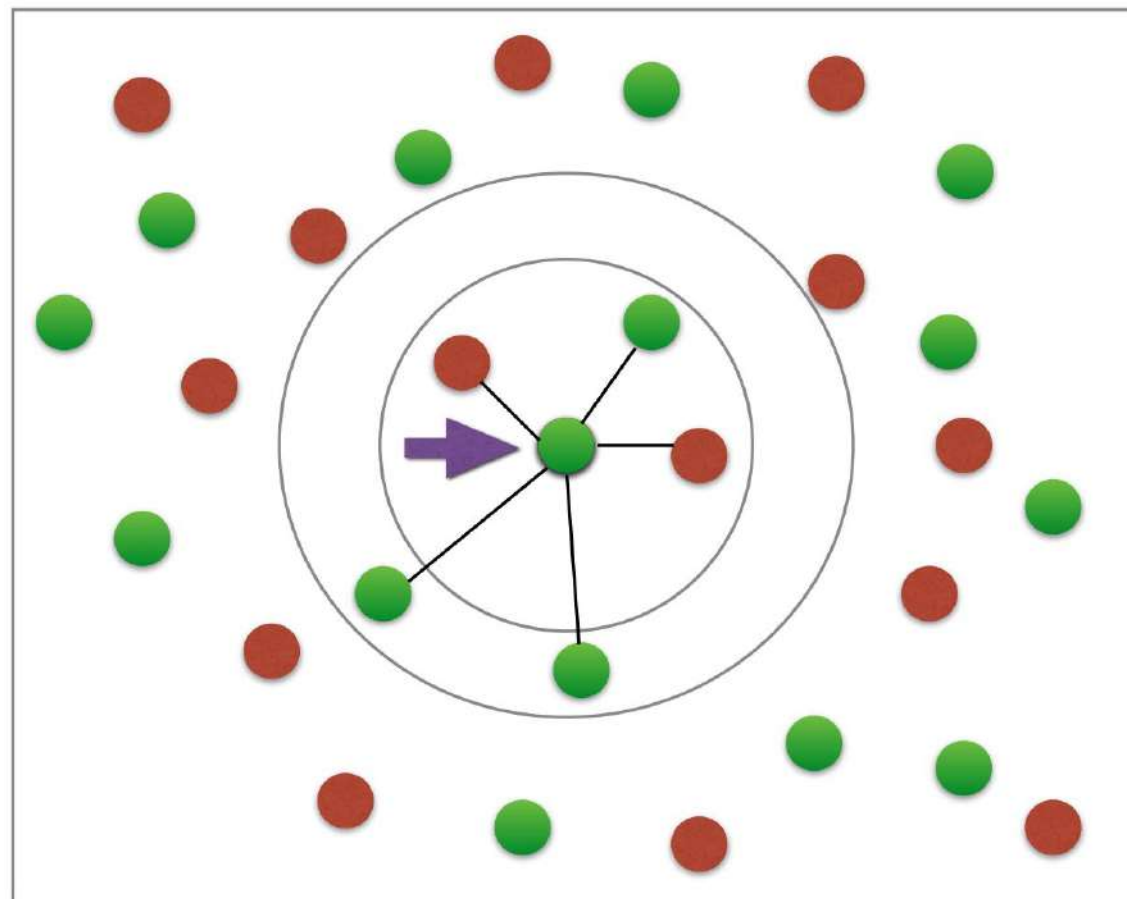
Дано: новый объект x

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:

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

kNN: применение



Измерение ошибки модели

Вопросы

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

Функция потерь для классификации

- Частый выбор — бинарная функция потерь

$$L(y, a) = [a \neq y]$$

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

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

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

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

Функция потерь для классификации

ВАЖНО

Accuracy — не точность!

Accuracy

$a(x)$	y
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

Accuracy

$a(x)$	y
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

Доля ошибок: 0.2

Доля верных ответов: 0.8

Accuracy

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

Решаем задачу выявления редкого заболевания

- 950 здоровых ($y = +1$)
- 50 больных ($y = -1$)

Модель: $a(x) = +1$

Доля ошибок: 0.05

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

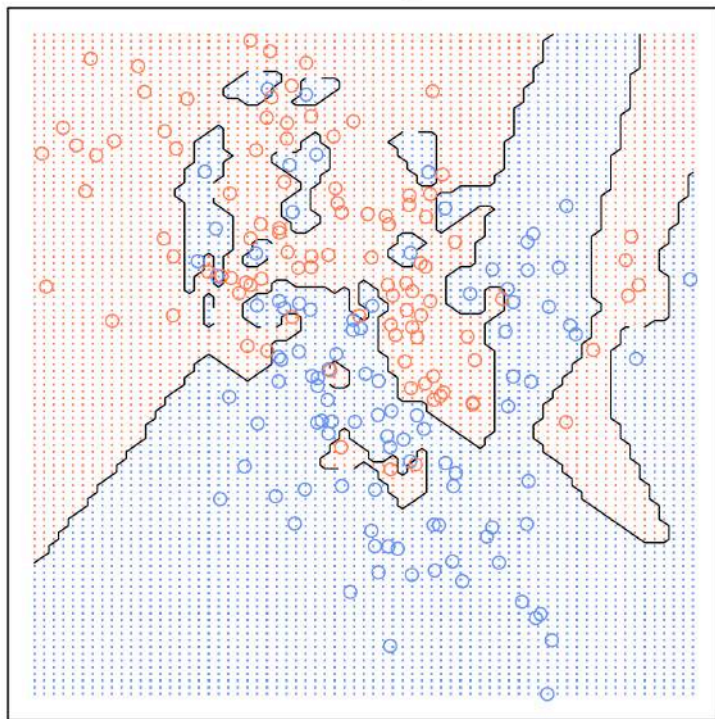
Применяем модель:

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

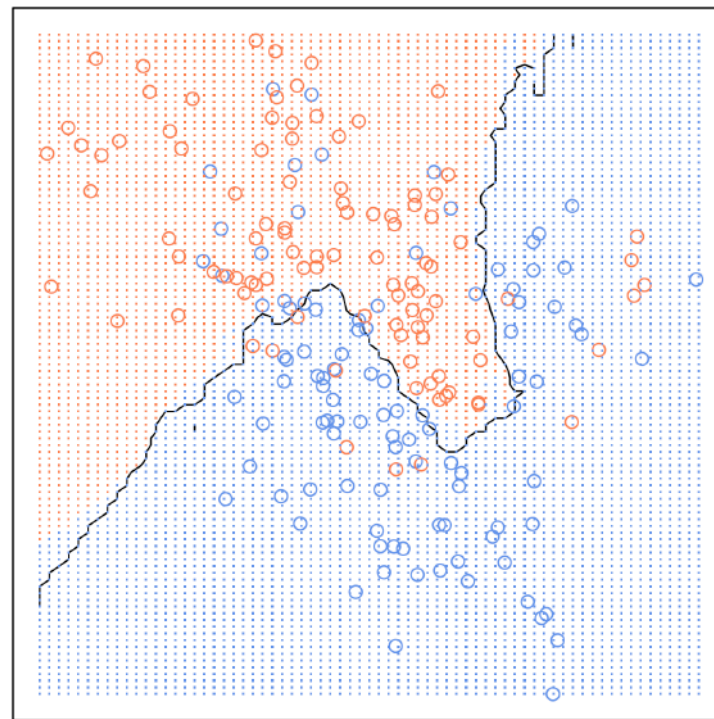
С точки зрения качества на обучающей выборке лучший выбор $k = 1$

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

Метод k ближайших соседей с
весами

kNN: применение

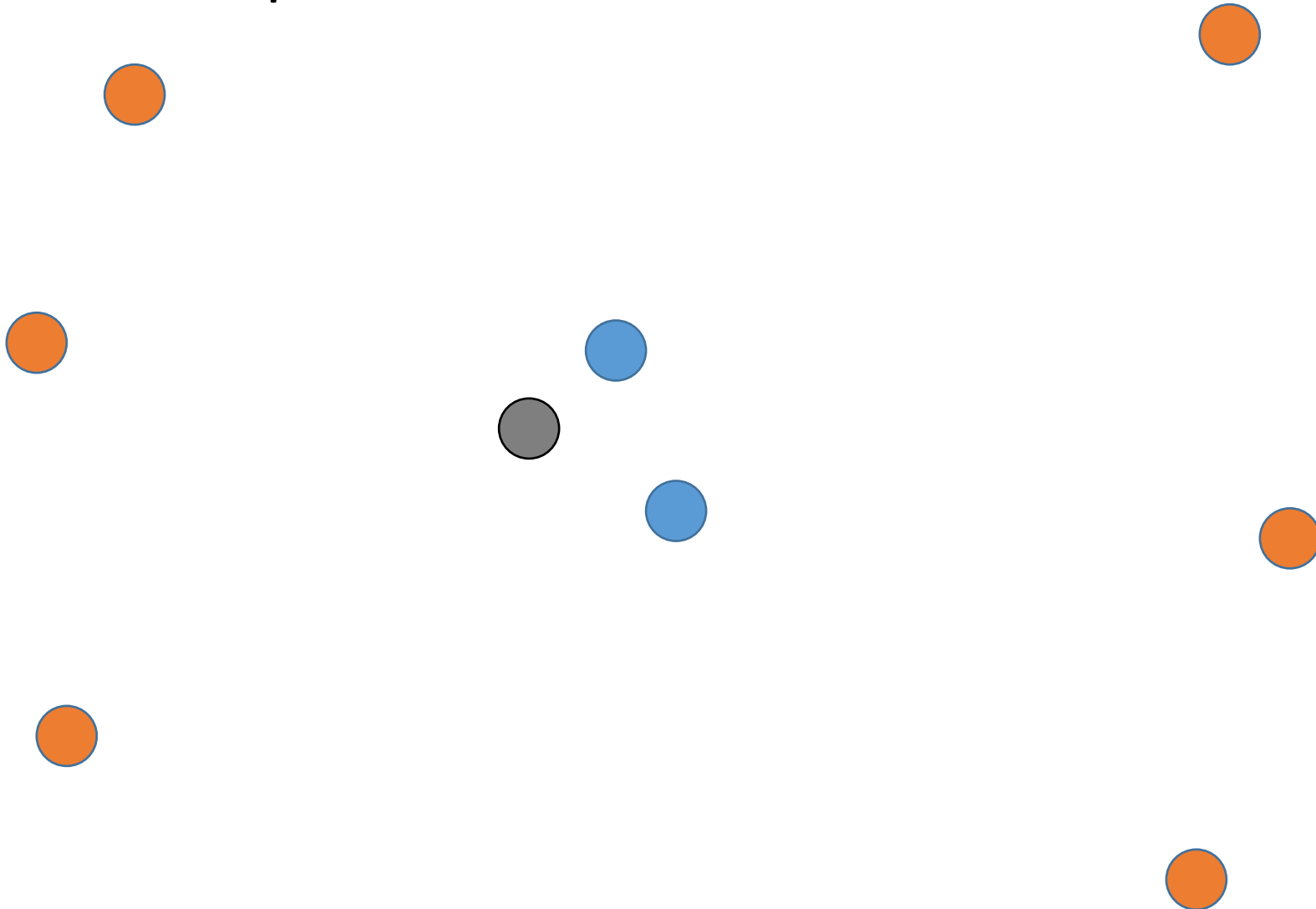
Дано: новый объект x

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:

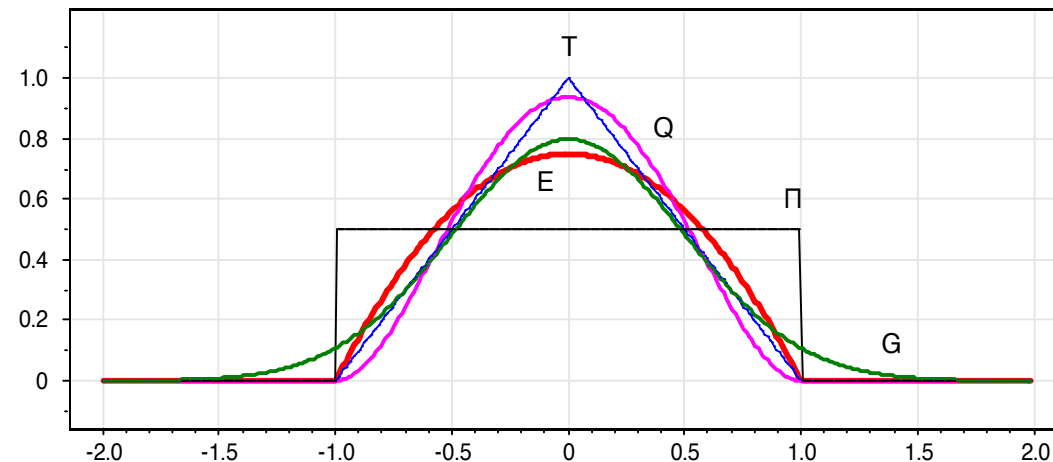
- $w_i = K \left(\frac{\rho(x, x_{(i)})}{h} \right)$
- K — ядро
- h — ширина окна

Ядра для весов

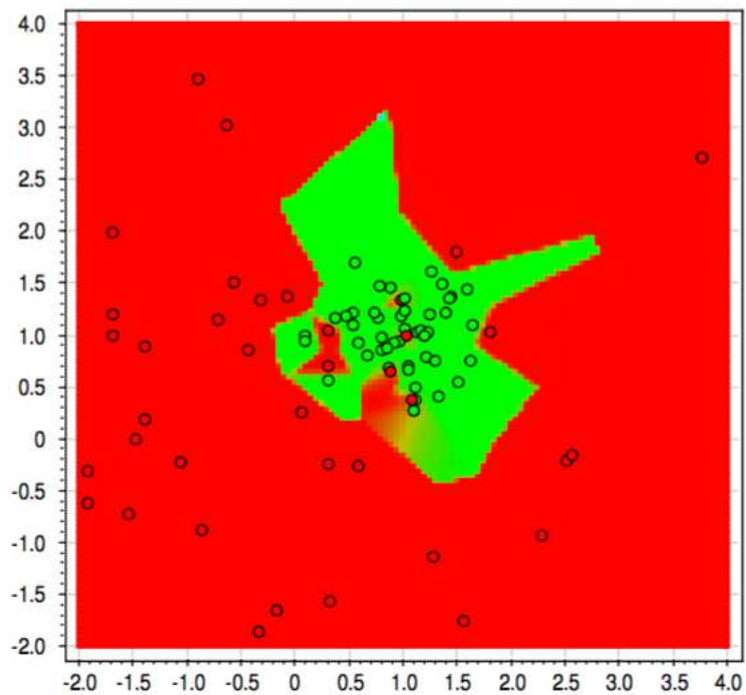
- Гауссовское ядро:

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

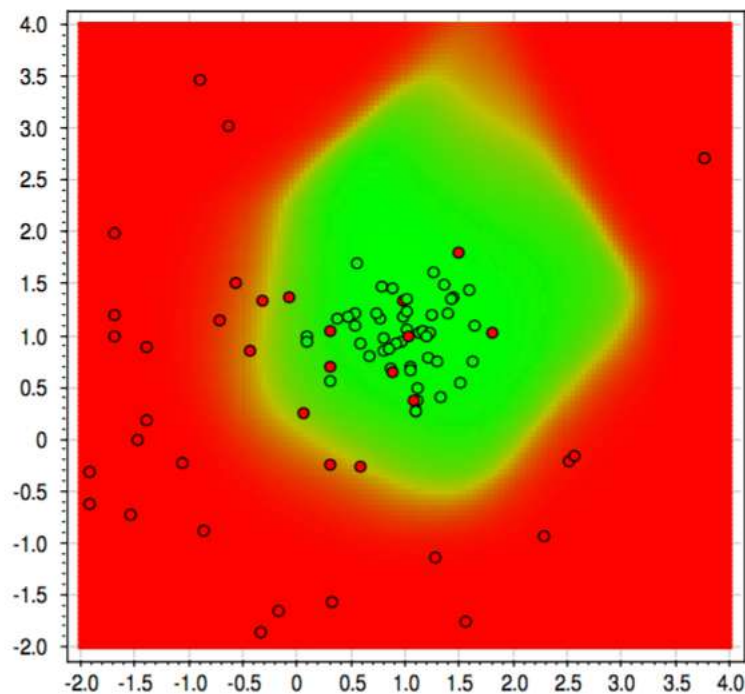
- И много других:



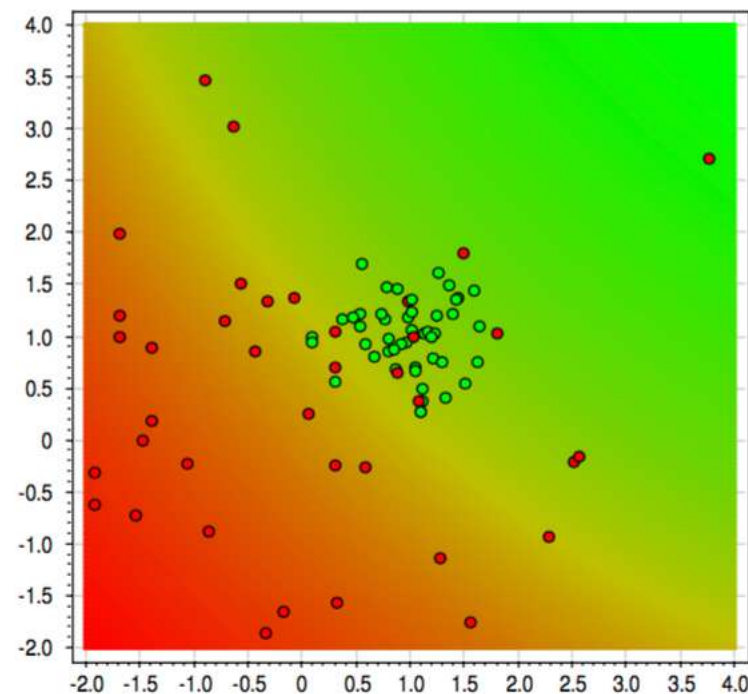
Ядра для весов



$h = 0.05$



$h = 0.5$



$h = 5$

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:

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

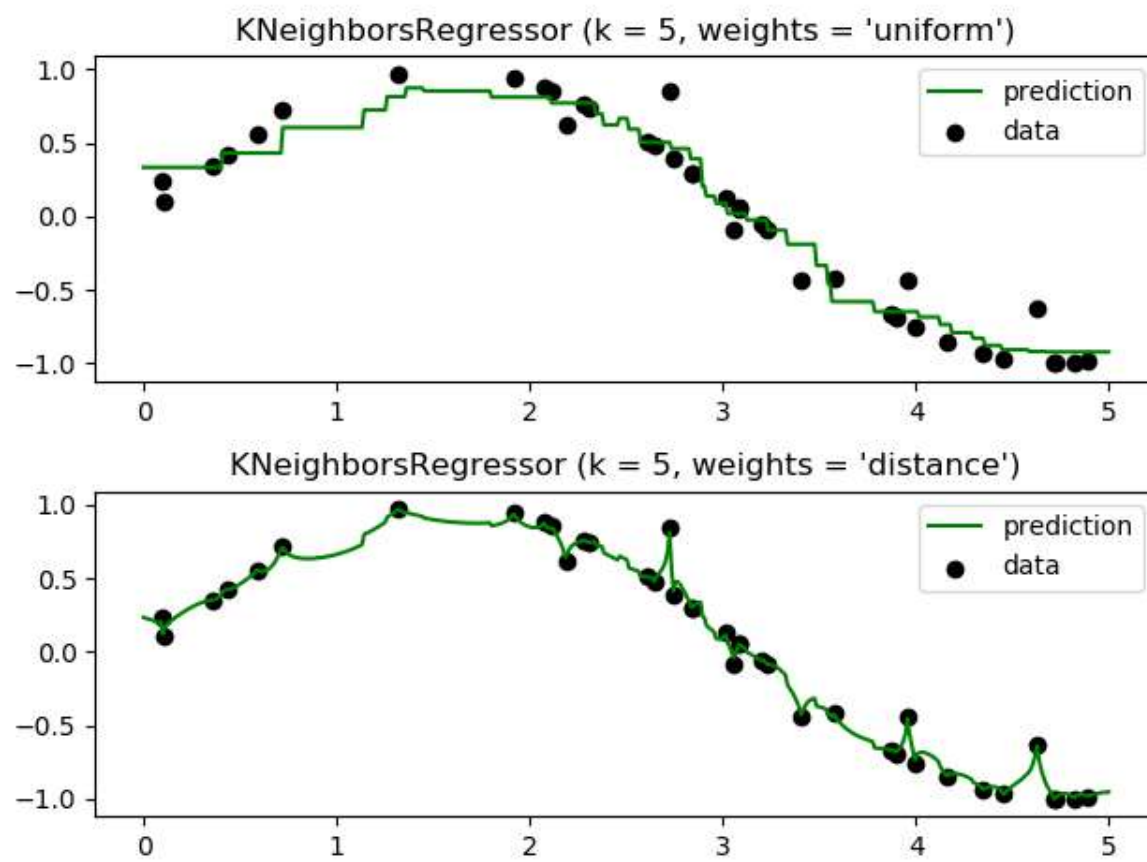
kNN: применение

- 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