Advanced Institute for Artificial Intelligence

k-Vizinhos mais Próximos

Advanced Institute for Artificial Intelligence – AI2

https://advancedinstitute.ai

Introdução

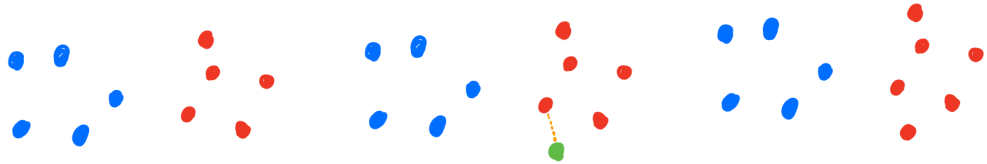
Uma das técnicas mais tradicionais em aprendizado de máquina é conhecida por k-Vizinhos mais Próximos, do inglês *k-Nearest Neighbours* - k-NN. Esta técnica é uma generalização de outra mais antiga conhecida por Vizinhos mais Próximos, do inglês *Nearest Neighbours* - NN. Ambas são abordagens bastante simples, pois **não existe etapa de treinamento**, muito embora tenhamos ainda o conjunto de treinamento.

Definição do problema: dado um conjunto de treinamento rotulado com m amostras $\mathcal{X}^1 = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$, queremos classificar corretamente uma amostra $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}^2$.

Objetivo: dada uma amostra $\boldsymbol{x}$ qualquer do conjunto de teste, o seu rótulo y será o mesmo da amostra mais próxima do conjunto de treinamento, ou seja, aquela que satisfaz a seguinte equação:

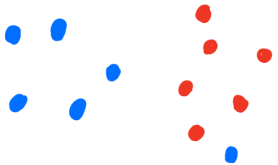
$$y = \underset{y_i | \boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}^1}{\arg\min} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i\|. \tag{1}$$

Vejamos um exemplo do funcionamento da técnica NN.

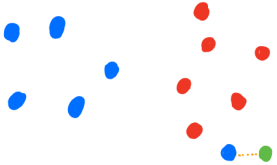


Conjunto de treinamento | Amostra a ser classificada | Amostra classificada

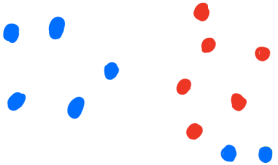
Quando o conjunto de dados está "bem comportado", NN é uma das melhores técnicas a serem utilizadas. No entanto, isso nem sempre acontece. Problema? "Ruídos"no conjunto de dados de treinamento.



Conjunto de treinamento

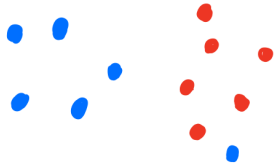


Amostra a ser classificada

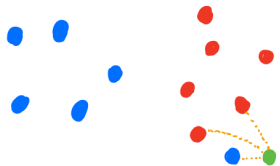


Amostra classificada

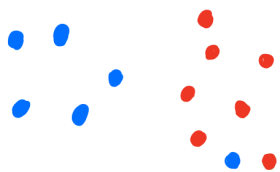
Uma generalização da técnica NN seria, então, conectar a amostra de teste aos seus k vizinhos mais próximos, dando origem ao classificador k-NN. Desta forma, considerando o exemplo anterior, a amostra seria corretamente classificada caso considerássemos $k = 3$, por exemplo (geralmente utilizamos valores ímpares para k para evitarmos desempates).



Conjunto de treinamento



Amostra a ser classificada



Amostra classificada

A técnica k-NN é interessante para problemas de **recomendação** e **recuperação**, dado que faz uso das amostras mais próximas para tomada de decisão. Esses dados podem ser, então, utilizados para fins de recomendação. Outro ponto importante diz respeito à **regressão** por k-NN, que também é bastante simples. Neste caso, ao conectar à amostra de teste aos seus k vizinhos mais próximos, basta utilizar, por exemplo, o valor médio de suas saídas como sendo o valor a ser estimado.

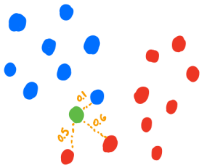
O k-NN pode fazer uso de diferentes métricas de distâncias:

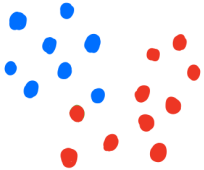
- Euclidiana;
- Minkowski - É uma forma generalizada de distância euclidiana;
- Manhattan - Calcula a distância entre vetores reais usando a soma de sua diferença absoluta;
- Hamming - A distância entre duas sequências de comprimento igual é o número de posições nas quais os símbolos correspondentes são diferentes;
- Similaridade do cosseno - Varia entre -1 e 1. O valor -1 indica exatamente o oposto, 1 indica o mesmo, 0 indica ortogonalidade ou decorrelação e todos os outros valores indicam similaridade ou dissimilaridade intermediária.

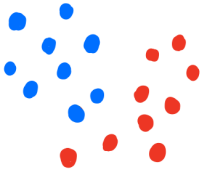
Variantes

Uma variante conhecida da técnica k-NN é a sua versão **ponderada**, conhecida por *weighted k-NN*. A ideia consiste em associar pesos à cada um dos k vizinhos mais próximos, que podem ser, por exemplo, o **inverso de sua distância** para a amostra em questão. Esses pesos são normalizados e utilizados para ponderar a decisão. A ideia é que amostras mais longes tenham menos influência durante o processo de decisão.

Vejamos um exemplo do k-nn ponderado versus a sua versão tradicional.







Conjunto de treinamento | Classificação por k-NN | Classificação por k-NN ponderado

Seja $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^3$ o vetor de pesos, tal que $w_1 = 1/0.1$ (classe azul), $w_2 = 1/0.5$ (classe vermelha) e $w_3 = 1/0.6$ (classe vermelha). Normalizando os mesmos, temos que $w_1 = 0.74$, $w_2 = 0.17$ e $w_3 = 0.09$. Muito embora a amostra verde esteja ligada às duas amostras da classe vermelha, o peso desta classe ($w_2 + w_3 = 0.26$) é menor do que aquele dado pela amostra da classe azul, ou seja, $w_1 = 0.74$.