Mašinsko učenje
k-Najbližih Suseda

Bojan Furlan

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Osnovni oblici mašinskog učenja

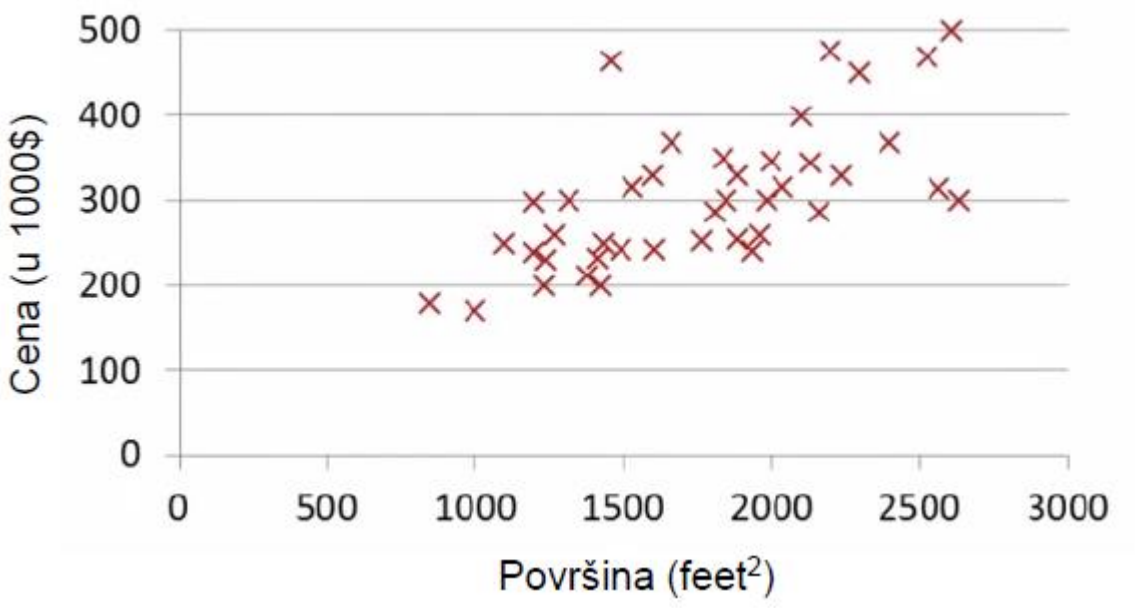
- Nadgledano učenje (supervised learning)
- Nenadgledano učenje (unsupervised learning)

Nadgledano učenje

- Program koji uči dobija:
  - skup ulaznih podataka (x1, x2, …, xn) i
  - skup željenih/tačnih vrednosti, tako da za svaki ulazni podatak *xi*, imamo željeni/tačan izlaz *yi*
- Zadatak programa je da “nauči” kako da novom, neobeleženom ulaznom podatku dodeli tačnu izlaznu vrednost
- Izlazna vrednost može biti:
  - labela (nominalna vrednost) – reč je o *klasifikaciji*
  - realan broj – reč je o *regresiji*

Nadgledano učenje: primer – linearna regresija

- Predikcija cena nekretnina na osnovu njihove površine
- Podaci za učenje: površine (x) i cene (y) nekretnina



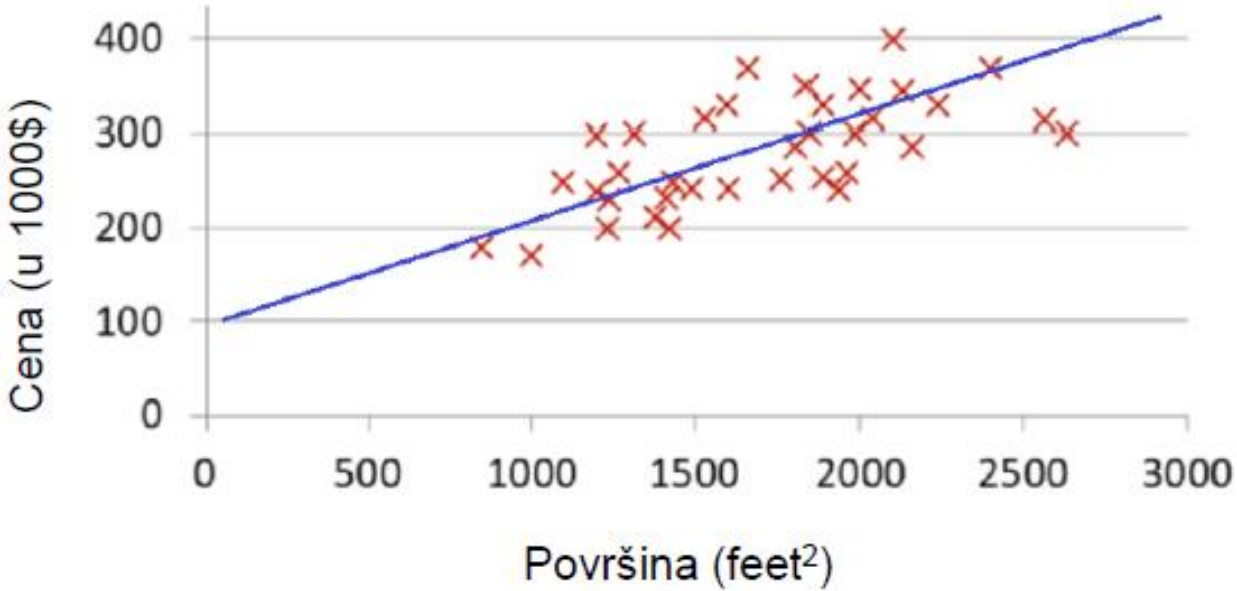
Izvor: https://www.coursera.org/course/ml

Nadgledano učenje: primer – linearna regresija

- Funkcija koju treba „naučiti“ (za jedan atribut):

$$h(x) = a + bx$$

- *a i b* su koeficijenti koje program u procesu „učenja“ treba da proceni

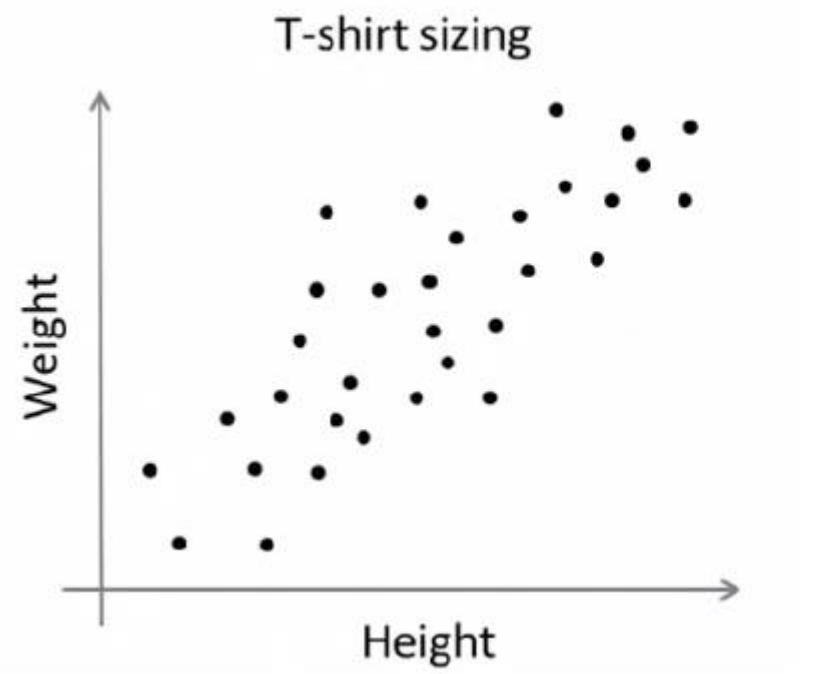


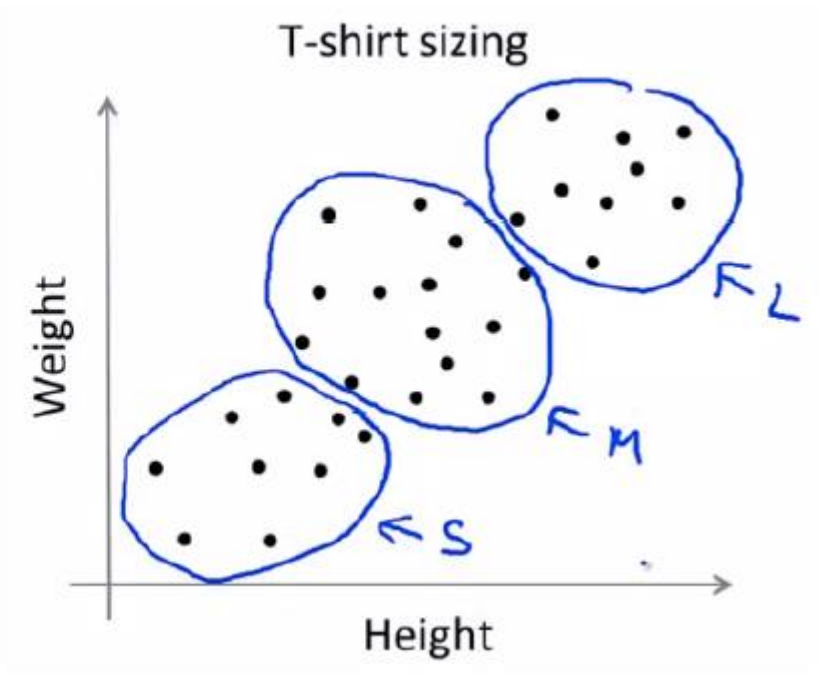
Nenadgledano učenje

- Nemamo informaciju o željenoj izlaznoj vrednosti
- program dobija samo skup ulaznih podataka (x1, x2, …, xn)
- Zadatak programa je da otkrije skrivene strukture/zakonitosti u podacima

Nenadgledano učenje primer - grupisanje

- određivanje konfekcijskih veličina na osnovu visine i težine ljudi





Izvor: https://www.coursera.org/course/ml

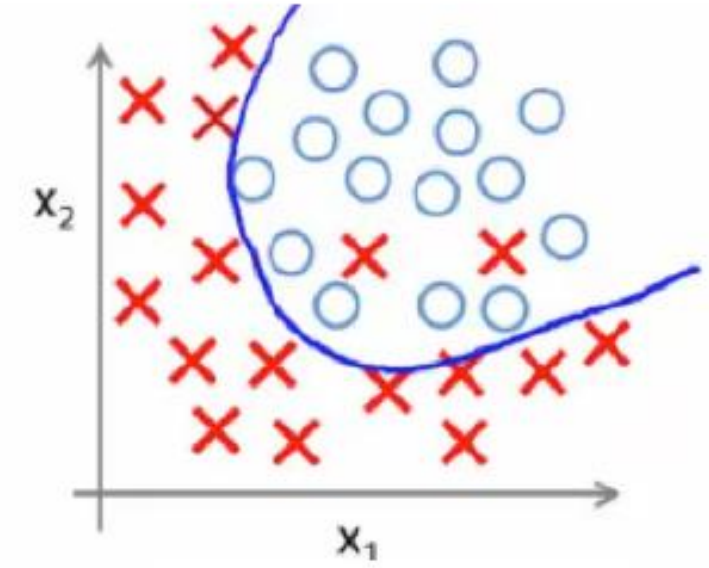
Problem prevelike podešenosti (overfitting)

- Situacija kada model savršeno nauči da prepoznaje instance iz trening skupa, ali nije u mogućnosti da prepozna instance koje se *i malo razlikuju* od naučenih
  - Training skup je nužno nepotpun i ne uključuje buduće podatke koje želimo da klasifikuje.
  - Algoritam treba da bude “imun” na pamćenje celog trening skupa (već samo generalnog znanja)

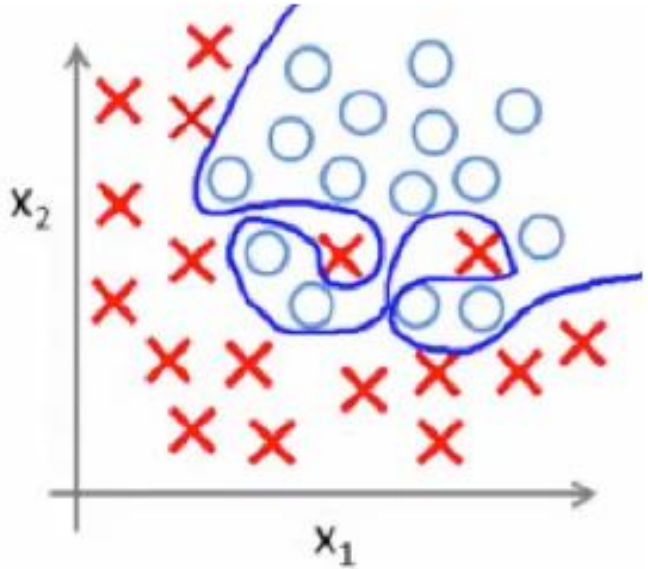
Primer problema prevelike podešenosti modela

– Ako svi klijenti sa imenom “David” u trening skupu imaju visoka primanja

=> “IF (first name == “David”) THEN the customer has a high income”



poželjno rešenje

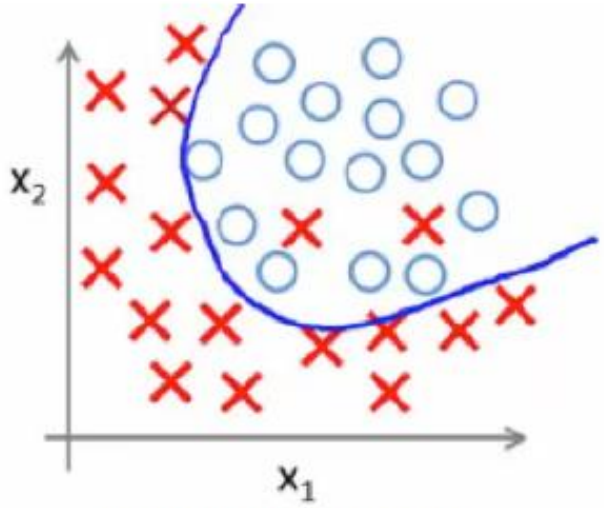


over fitting

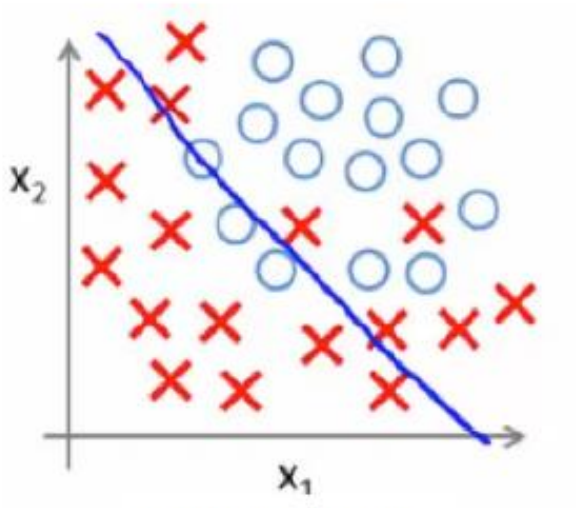
Izvor: https://www.coursera.org/course/ml

Problem nedovoljne podešenosti (underfitting)

- slučaj kad model ne uspeva da aproksimira podatke iz trening skupa, tako da ima slab učinak čak i na trening skupu



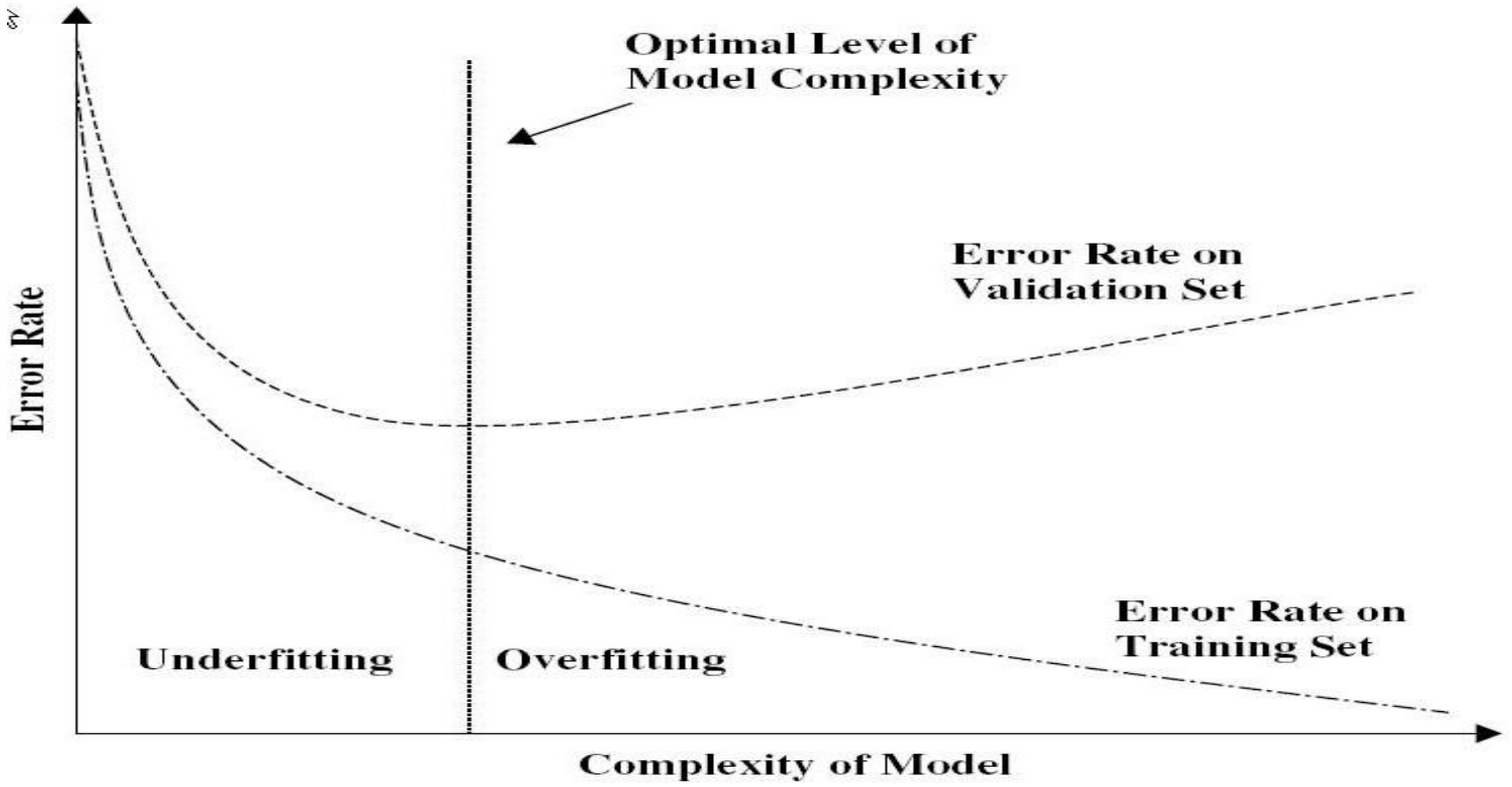
poželjno rešenje



under fitting

Izvor: https://www.coursera.org/course/ml

Underfitting vs. Overfitting

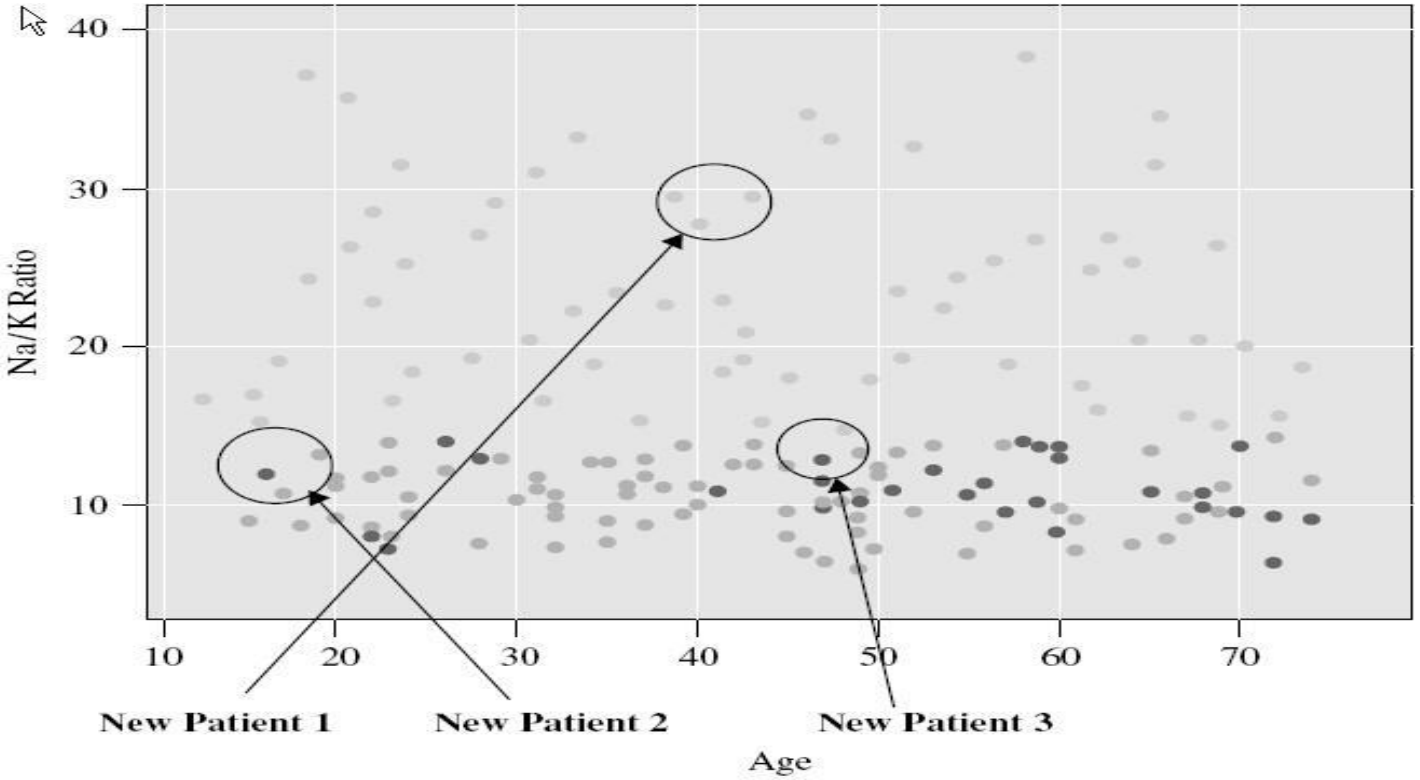


Optimalni nivo kompleksnosti modela je na minimalnoj stopi greške na validacionom skupu

- Naziva se još i odnosom pristrastnosti-varijanse (bias/variance)
- Preterano povećanje kompleksnosti modela dovodi do degradacije njegove generalnosti.

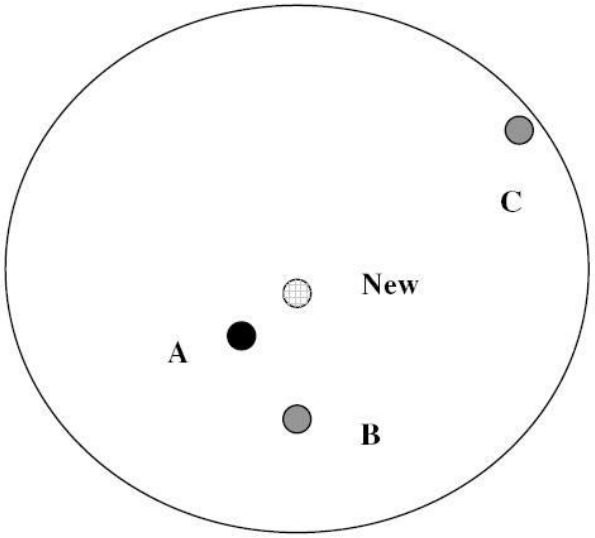
Algoritam k-najbližih suseda
k-Nearest Neighbor (k-NN)

- Nadgledano učenje - primer učenja na bazi instanci (*Instance-based learning*)
- Klasifikacija za novi primer vrši se upoređivanjem sa najsličnijim primerima u trening skupu. (S kim si, takav si ☺)



Na/K odnos nasuprot broja godina, sa vrstom prepisanog leka

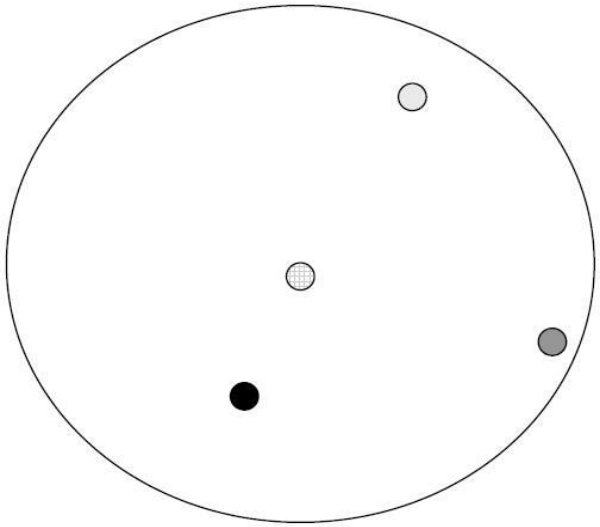
Algoritam k-najbližih suseda



Tri najbliža suseda za pacijenta 2

- Pacijent 2 je 17 godina star i ima Na/K odnos 12.5.
- Za različito k = 1,2,3 menja se klasa dodeljena ovom pacijentu

Algoritam k-najbližih suseda



Tri najbliža suseda za pacijenta 3

- Pacijent 3, star 47 godina i ima Na/K odnos 13.5.
- Za k = 2 ili 3 obično glasanje ne pomaže.

Algoritam k-najbližih suseda

- Pitanja na koja treba odgovoriti:
  - Kako se meri distanca?
  - Kako se kombinuju (agregiraju) vrednosti više instanci?
  - Da li sve tačke treba da imaju istu težinu,
    ili neke tačke treba da imaju više uticaja od drugih?
  - Koliko suseda treba razmatrati, tj. koliko je *k*?

Funkcija rastojanja

- Za novi primer, algoritam k-najbližih suseda dodeljuje klasu najsličnije instance
- Kako definišemo slično?
- Najčešće se koristi Euklidsko rastojanje:

$$d_{\text{Euclidean}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2}$$

- Pri čemu $x = x_1, x_2, \ldots, x_m$, i $y = y_1, y_2, \ldots, y_m$ su vrednosti atributa dve instance.

Funkcija rastojanja

- Atributi mogu imati vrednosti u opsezima koji se značajno mogu razlikovati.
  - Npr. godine i prihodi
- Da bi se ovo izbeglo koristi se normalizacija (vrsta transformacije podataka)
- Za kategoričke vrednosti Euklidsko rasojanje nije odgovarajuće
- Definiše se funkcija različitosti (different) kako bi se uporedila dva atributa para instanci:

$$\text{different}(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 & \text{if } x_i = y_i \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

gde su x_i i y_i kategoričke vrednosti.

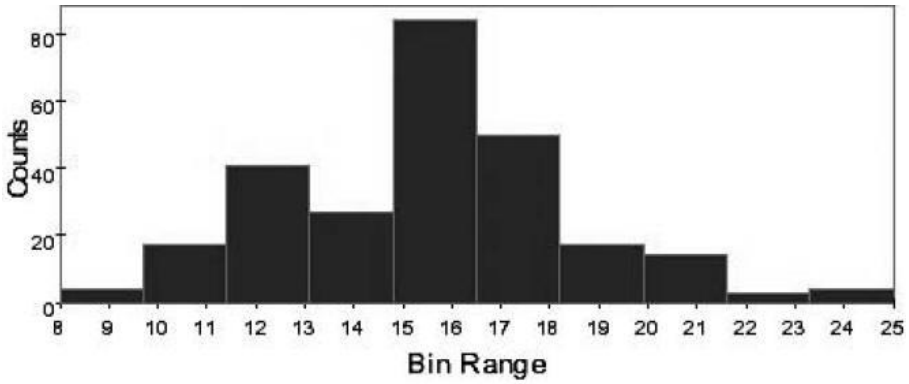
Transformacija podataka

- Za neke algoritme razlike u opsegu mogu dovesti do tendencija da atributi sa većim opsegom imaju *veći uticaj na rezultate* (k-NN).
- Rešenje -> normalizovati numeričke vrednosti, kako bi se standardizovale razmere efekta koji svaki atribut ima na krajnji rezultat.

- **Min-Max Normalizacija**

$$X^* = \frac{X - \min(X)}{\text{range}(X)} = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)}$$

Transformacija podataka - primer



Count:	261
Missing:	0
Max:	25.0
Min:	8.0
Mean:	15.548
Std dev:	2.911

$$X^* = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} = \frac{8 - 8}{25 - 8} = 0$$

$$X^* = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} = \frac{15.548 - 8}{25 - 8} = 0.444$$

$$X^* = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} = \frac{25 - 8}{25 - 8} = 1.0$$

Min-Max Normalizacija

- Normalizovane vrednosti su u opsegu [0,1]
  - Osim ako novi podaci ne predstavljaju ekstremne vrednosti koje leže van originalnog opsega (*Outliers*)
- Takođe, ekstremne vrednosti mogu učiniti da ostale vrednosti budu blizu ekstrema (0 ili 1)
  - Npr. prosek primanja od 100.000€ može učiniti ostale normalizovane vrednosti bliskim 0.
- Potencijalan problem – Min-max normalizacija zavisi od opsega.

Funkcija rastojanja - primer

Patient	Age	Age_{MMN}	Gender
A	50	$\frac{50-10}{50}=0.8$	Male
B	20	$\frac{20-10}{50}=0.2$	Male
C	50	$\frac{50-10}{50}=0.8$	Female

Vrednosti atributa za broj godina (Age) i pol (Gender)

- Koji je pacijent sličniji pacijentu A?
- Ako ne bismo izvršili normalizaciju:

$$d(A,B) = \sqrt{(50-20)^2+0^2} = 30$$

$$d(A,C) = \sqrt{(50-50)^2+1^2} = 1$$

- Sa MMN:

$$d_{\text{MMN}}(A,B) = \sqrt{(0.8-0.2)^2+0^2} = 0.6$$

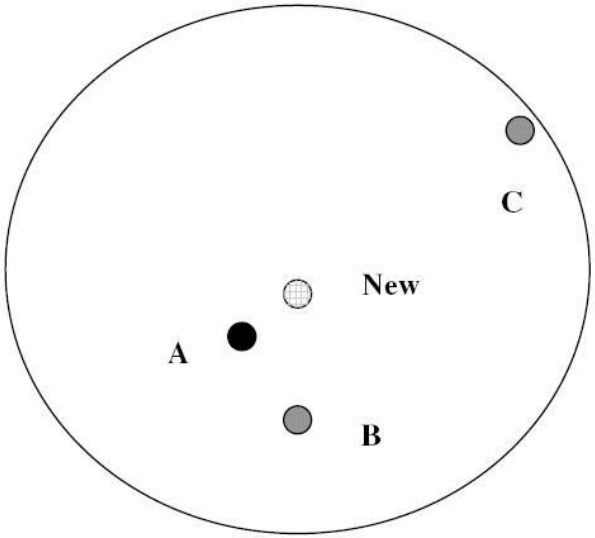
$$d_{\text{MMN}}(A,C) = \sqrt{(0.8-0.8)^2+1^2} = 1.0$$

Funkcija agregacije

- Kako kombinovati slične instance za određivanje klasifikacije?

Netežinsko glasanje:

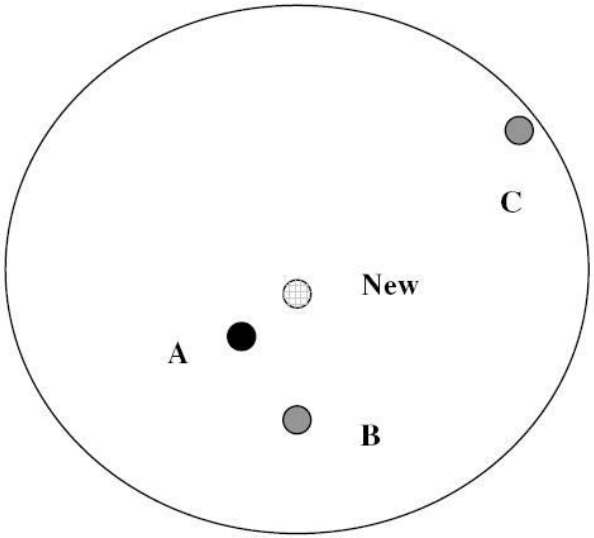
- U ovom primeru klasifikacija će imati pouzdanost 2/3 = 66.67%,
- Nivo pouzdanosti je određen brojem instanci “pobedničke” klase, podeljen sa k.



Funkcija agregacije

Težinsko glasanje

- Susedi koji su bliži imaju veću težinu



Funkcija agregacije – primer

Record	Age	Na/K	Age_{MMN}	Na/K_{MMN}
New	17	12.5	0.05	0.25
A (dark gray)	16.8	12.4	0.0467	0.2471
B (medium gray)	17.2	10.5	0.0533	0.1912
C (medium gray)	19.5	13.5	0.0917	0.2794

Godine i Na/K odnosi

- Rastojanja:

$$d(\text{new},\text{A}) = \sqrt{(0.05 - 0.0467)^2 + (0.25 - 0.2471)^2} = 0.004393$$

$$d(\text{new},\text{B}) = \sqrt{(0.05 - 0.0533)^2 + (0.25 - 0.1912)^2} = 0.58893$$

$$d(\text{new},\text{C}) = \sqrt{(0.05 - 0.0917)^2 + (0.25 - 0.2794)^2} = 0.051022$$

Funkcija agregacije – primer

- Broj glasova je obrnuto proporcionalan kvadratu rastojanja.
- Za instancu A:

$$\text{votes (dark gray)} = \frac{1}{\text{d(new, A)}^2} = \frac{1}{0.004393^2} \simeq 51817.63$$

- Za B i C:

$$\text{votes (medium gray)} = \frac{1}{\text{d(new,B)}^2} + \frac{1}{\text{d(new,C)}^2} = \frac{1}{0.058893^2} + \frac{1}{0.051022^2}$$
$$\simeq 672$$

- Tamno sivi (dark gray) – pobednik !!!

Kvanitfikovanje relevantnosti atributa

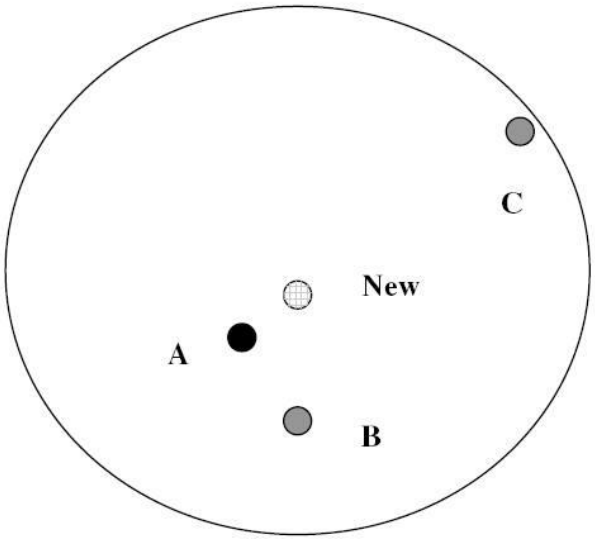
- Nisu svi atributi podjednako relevantni za klasifikaciju.
- Određivanje atributa koji su više ili manje relevantni svodi se na pronalaženje koeficijenta z_j kojim se množi osa j
  - Veća vrednost z_j => vrednosti tog atributa imaju veći uticaj.

- Primer: zNa/K = 3 and zAge = 1.

$$d(\text{new},\text{A}) = \sqrt{(0.05 - 0.0467)^2 + [3(0.25 - 0.2471)]^2} = 0.009305$$

$$d(\text{new},\text{B}) = \sqrt{(0.05 - 0.0533)^2 + [3(0.25 - 0.1912)]^2} = 0.17643$$

$$d(\text{new},\text{C}) = \sqrt{(0.05 - 0.0917)^2 + [3(0.25 - 0.2794)]^2} = 0.09756$$



k-NN za regresiju

Metod lokalnog težinskog usrednjavanja
(*Locally weighted averaging*)**:**

$$\hat{y}_{new} = \frac{\sum_i w_i y_i}{\sum_i w_i}$$

- Težinska srednja vrednost k-najbljižih suseda
- W_i – recipročna vrednost kvadrata rastojanja od i-tog suseda
- Y_i – vrednost ciljnog atributa i-tog suseda

k-NN regresija – primer

Record	Age	Na/K	BP	Age_{MMN}	Na/K_{MMN}
New	17	12.5	?	0.05	0.25
A	16.8	12.4	120	0.0467	0.2471
B	17.2	10.5	122	0.0533	0.1912
C	19.5	13.5	130	0.0917	0.2794

k = 3 NN algoritam za regresiju

- Procena nivoa krvnog pritiska pacijenta – u opsegu [80,160]
- $z_{Na/K} = 3$

$$\hat{y}_{\text{new}} = \frac{\sum_i w_i y_i}{\sum_i w_i} = \frac{\frac{120}{0.009305^2} + \frac{122}{0.17643^2} + \frac{130}{0.09756^2}}{\frac{1}{0.009305^2} + \frac{1}{0.17643^2} + \frac{1}{0.09756^2}} = 120.0954.$$

Odabir k

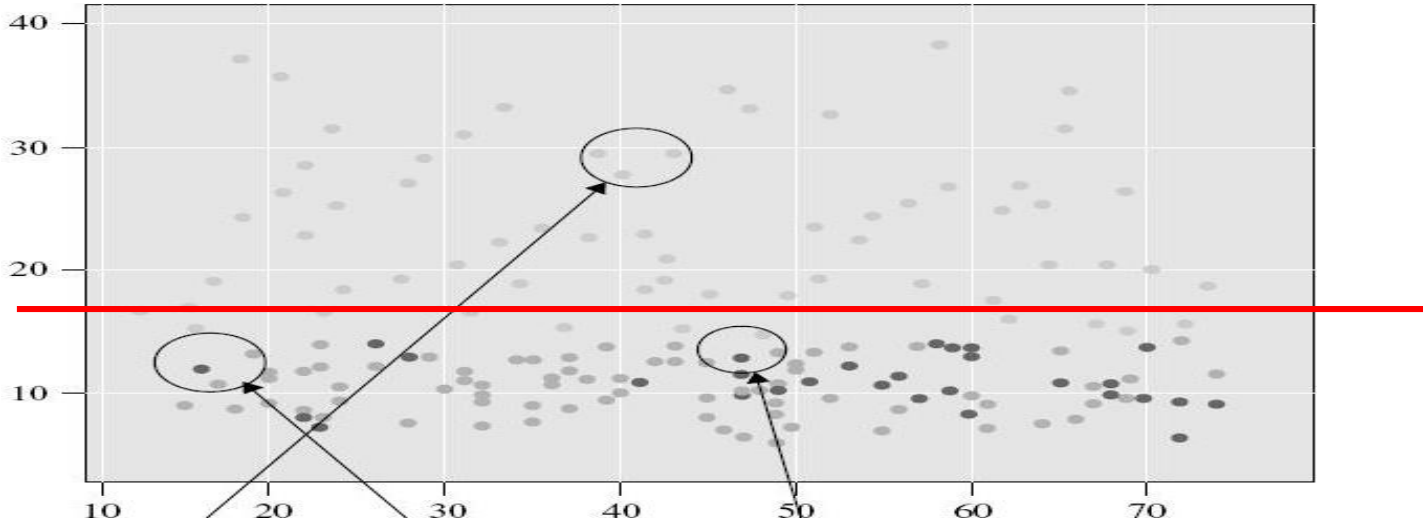
- Za malo k (npr. k = 1) algoritam će vraćati ciljanu vrednost najbližeg suseda
  - Problem overfitting-a (nedostatak generalnosti)
- Ako je k preveliko, previdećemo lokalno ponašanje
- k birati tako da bude “odlučivo” (3,5...)
- Odabrati vrednost k tako da se *minimizuje greška* nad *validacionim skupom*.

Upotreba k-NN algoritma

- Može se koristiti i za regresiju i za klasifikaciju (sličan K-means algoritam se koristi za grupisanje)
- Kolaborativno filtriranje (Collaborative filtering) je primer upotrebe k-NN
  - Pronađi k najsličnijih ljudi korisniku x koji su ocenili film y
  - Predvidi dopadanja filma y za korisnika x kao srednju vrednost svih y_k

Implementacija

- Retke klasifikacije moraju biti dovoljno zastupljene
  - kako algoritam ne bi predviđao samo uobičajene klasifikacije.
- S druge strane, velika količina podataka može da iziskuje značajno vreme za obradu (zbog računanja rastojanja)
- Ubrzanja:
  - Grupisanje: npr. pomoću LSH (Locality Sensitive Hashing) algoritma
  - Odsecanje trening skupa: u ovom primeru sve instance sa Na/K > 19 mogu se izostaviti, jer su klasifikovane na isti način



Reference

- *Discovering Knowledge in Data: An Introduction to Data Mining* (Wiley, 2005) Larose D. poglavlja 2 i 5.
- Coursera: https://www.coursera.org/course/ml
- Mašinsko učenje, Jelena Jovanović, Fakultet Organizacionih Nauka, http://jelenajovanovic.net/