K-Nearest Neighbors (k-NN)

ESTAT0109 – Mineração de Dados em Estatística

Prof. Dr. Sadraque E. F. Lucena

sadraquelucena@academico.ufs.br

http://sadraquelucena.github.io/mineracao

Objetivo da Aula

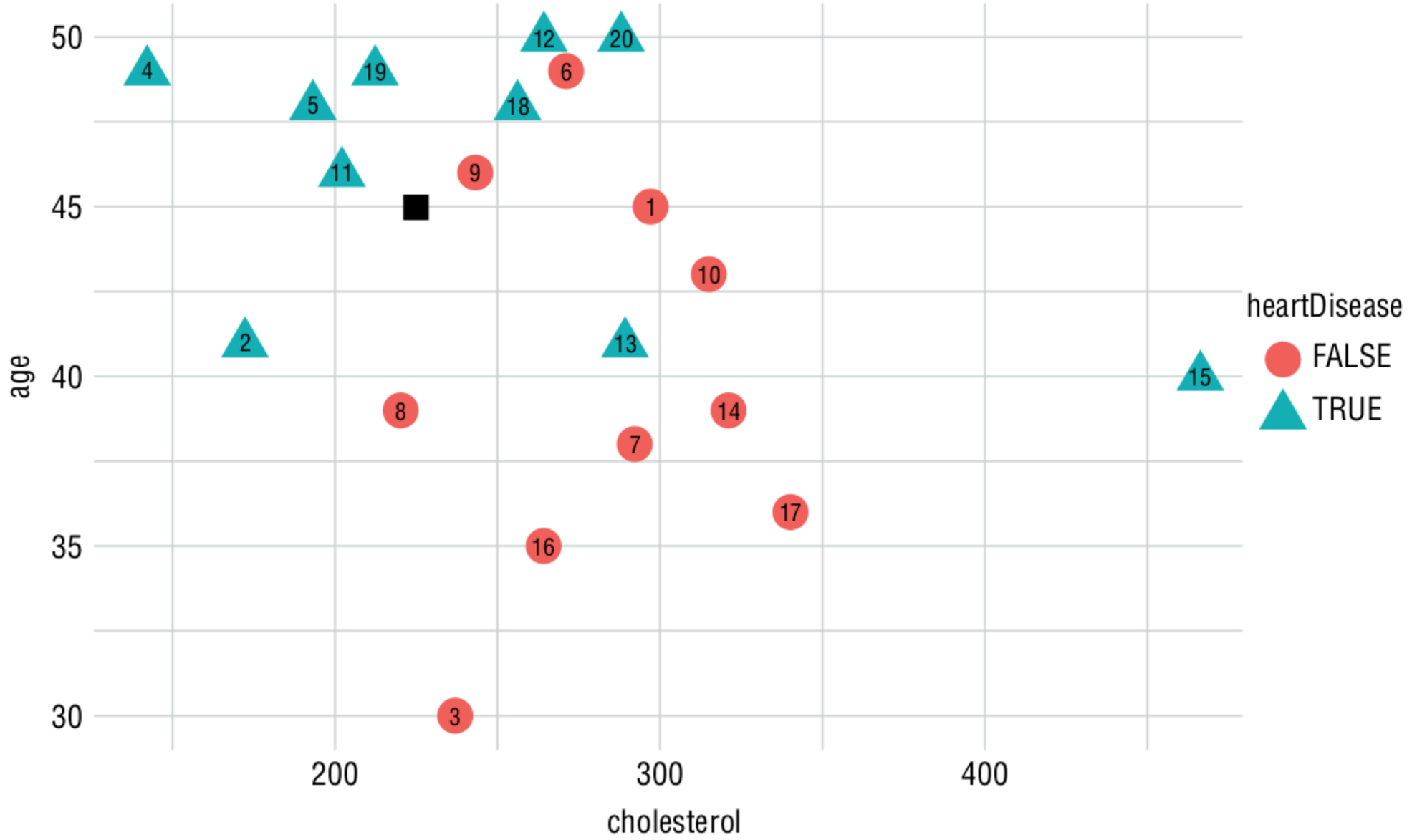
- Compreender a intuição e o funcionamento matemático do algoritmo k-NN para tarefas de Classificação e Regressão.
- Aplicar técnicas essenciais de pré-processamento, com ênfase na normalização de dados numéricos e codificação de variáveis categóricas.
- Calcular manualmente a distância euclidiana para determinar a similaridade entre instâncias.
- Analisar o impacto da escolha do hiperparâmetro k no *tradeoff* entre viés e variância (*overfitting* vs *underfitting*).
- Avaliar as vantagens e limitações do paradigma de “aprendizado preguiçoso” (*lazy learning*) em comparação a modelos ansiosos.

Classificadores de vizinhos mais próximos (*nearest neighbors*)

- São classificadores que atribuem rótulos a instâncias não rotuladas a partir da similaridade com exemplos rotulados.
- Esses classificadores buscam replicar a capacidade humana de extrair conclusões sobre situações atuais a partir de experiências passadas.
- Exemplos de aplicações bem sucedidas:
  - Visão computacional: reconhecimento de caracteres e reconhecimento facial em imagens estáticas e vídeos;
  - Sistemas de recomendação que preveem se uma pessoa irá gostar de um filme ou música;
  - Identificação de padrões em dados genéticos para detectar proteínas ou doenças específicas.

O algoritmo k-NN

- O algoritmo k-NN utiliza informações sobre os k vizinhos mais próximos de um exemplo para classificar exemplos não rotulados.
- A letra k representa o número de vizinhos mais próximos que serão usados para a classificação de uma instância sem rótulo.
  - Definido k, o algoritmo usa um conjunto de dados de treinamento classificados em várias categorias.
  - Para cada instância não rotulada, o k-NN identifica as k instâncias mais similares nos dados de treinamento.
  - À instância sem rótulo é atribuída a classe da maioria dos k vizinhos mais próximos.



FONTE: NWANGANGA, Fred; CHAPPLE, Mike. Practical machine learning in R. John Wiley & Sons, 2020.

Vantagens e desvantagens

Vantagens

- Simples e efetivo.
- Não faz suposições sobre a distribuição dos dados (não paramétrico).
- Fase de treinamento rápida (apenas armazena os dados).

Desvantagens

- Não produz um modelo explícito, limitando a interpretabilidade de como as características afetam a classe.
- Requer a seleção de um k apropriado.
- Fase de classificação lenta (custosa computacionalmente).
- Características nominais e dados ausentes exigem processamento adicional cuidadoso.

Encontrando os vizinhos mais próximos

- Para encontrar os vizinhos mais próximos de uma instância é preciso calcular a distância entre as instâncias.
- Tradicionalmente, o algoritmo k-NN usa a **distância euclidiana**:
  - Sejam p e q duas instâncias com n atributos. Então a distância euclidiana entre p e q é dada por

$$dist(p, q) = \sqrt{(p_1 - q_1)^2 + (p_2 - q_2)^2 + \cdots + (p_n - q_n)^2}$$

    em que p_i e q_i, $i = 1, \ldots, n$, representam os atributos associados às instâncias p e q, respectivamente.
- Outras distâncias que podem ser usadas: distância de Hamming, distância de Manhattan (ou L1), distância Minkowski e distância de Mahalanobis.

Preparando os dados

- **Observação:** antes do cálculo da distância euclidiana devemos normalizar os atributos, pois atributos com valores mais elevados tendem a ter um impacto desproporcional no cálculo de distância.
- Para o k-NN podemos usar a *normalização min-max*:

$$x_{novo} = \frac{x - min(X)}{max(X) - min(X)}$$

- ou a transformação *z-score*:

$$x_{novo} = \frac{x - média(X)}{DesvPad(X)}.$$

Preparando os dados (Variáveis Categóricas)

- Se o atributo é do tipo **nominal**, devemos transformá-lo.
- **Atenção:** Embora em regressão usemos $n - 1$ dummies, em algoritmos de distância (k-NN) é comum usar **One-Hot Encoding** (criar n variáveis) para manter a equidistância entre categorias.
- Exemplo: se o atributo *temperatura* possui as categorias *quente*, *médio* e *frio*:

$$quente = \begin{cases} 1 & \text{se } x = \text{ quente} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$médio = \begin{cases} 1 & \text{se } x = \text{ médio} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$frio = \begin{cases} 1 & \text{se } x = \text{ frio} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Exemplo

Considere os dados de treinamento abaixo. Calcule a distância euclidiana para um novo paciente com **45 anos** e colesterol de **225** (após normalizar).

Paciente	Idade	Colesterol	Doença
1	45	297	F
2	41	172	V
3	46	202	V
4	48	193	V
5	46	243	F

Paciente	Idade	Colesterol	Doença
6	48	256	V
7	49	212	V
8	41	289	V
9	49	271	F
10	43	315	F

- **Atividade:** Ordene os dados de treino da menor distância para a maior distância do novo paciente e classifique usando $k = 3$.

Determinando k apropriado

- A decisão de quantos vizinhos usar determina a generalização do modelo (Tradeoff Viés-Variância).
  - k **pequeno:** Baixo viés, alta variância. O modelo é sensível a ruídos (*Overfitting*).
  - k **grande:** Alto viés, baixa variância. O modelo é muito simples e ignora padrões locais (*Underfitting*).
- O valor escolhido para k em classificação binária deve ser preferencialmente ímpar para evitar empates.
- Uma forma de determinar k é testar diversos valores com os dados de validação e escolher aquele com menor erro.

Por que o algoritmo k-NN é preguiçoso?

- Algoritmos de classificação baseados em métodos de vizinho mais próximo são considerados algoritmos de aprendizado preguiçoso (*lazy learning*).
- Um aprendiz preguiçoso não está realmente “aprendendo” um modelo matemático durante o treino; ele apenas armazena os dados.
- O processamento real acontece apenas na hora da classificação (inferência).
- O aprendizado preguiçoso também é conhecido como aprendizado baseado em instâncias ou aprendizado por repetição.

E a Regressão k-NN?

- Em problemas de regressão, a estimativa é numérica. Pode-se usar a média simples ou a média ponderada (preferível).
- A média ponderada pelo inverso da distância dá mais importância aos vizinhos muito próximos:

$$\hat{y}_{nova} = \frac{\sum_{i=1}^{k} w_i \cdot y_i}{\sum_{i=1}^{k} w_i}$$

em que:

- y_i é o valor da variável resposta do vizinho i;
- $w_i = \frac{1}{distancia(x_{novo}, x_i)}$ é o peso.

Escolha de k na Regressão k-NN

- O valor de k é escolhido como aquele que produz menor erro nos dados de validação. Métricas comuns:
  - Erro médio absoluto (MAE):

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i|$$

  - Erro quadrático médio (MSE):

$$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Escolha de k na Regressão k-NN

- Raiz do erro quadrático médio (RMSE):

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}$$

Agora vamos fazer no R...