第三章

k 近邻法

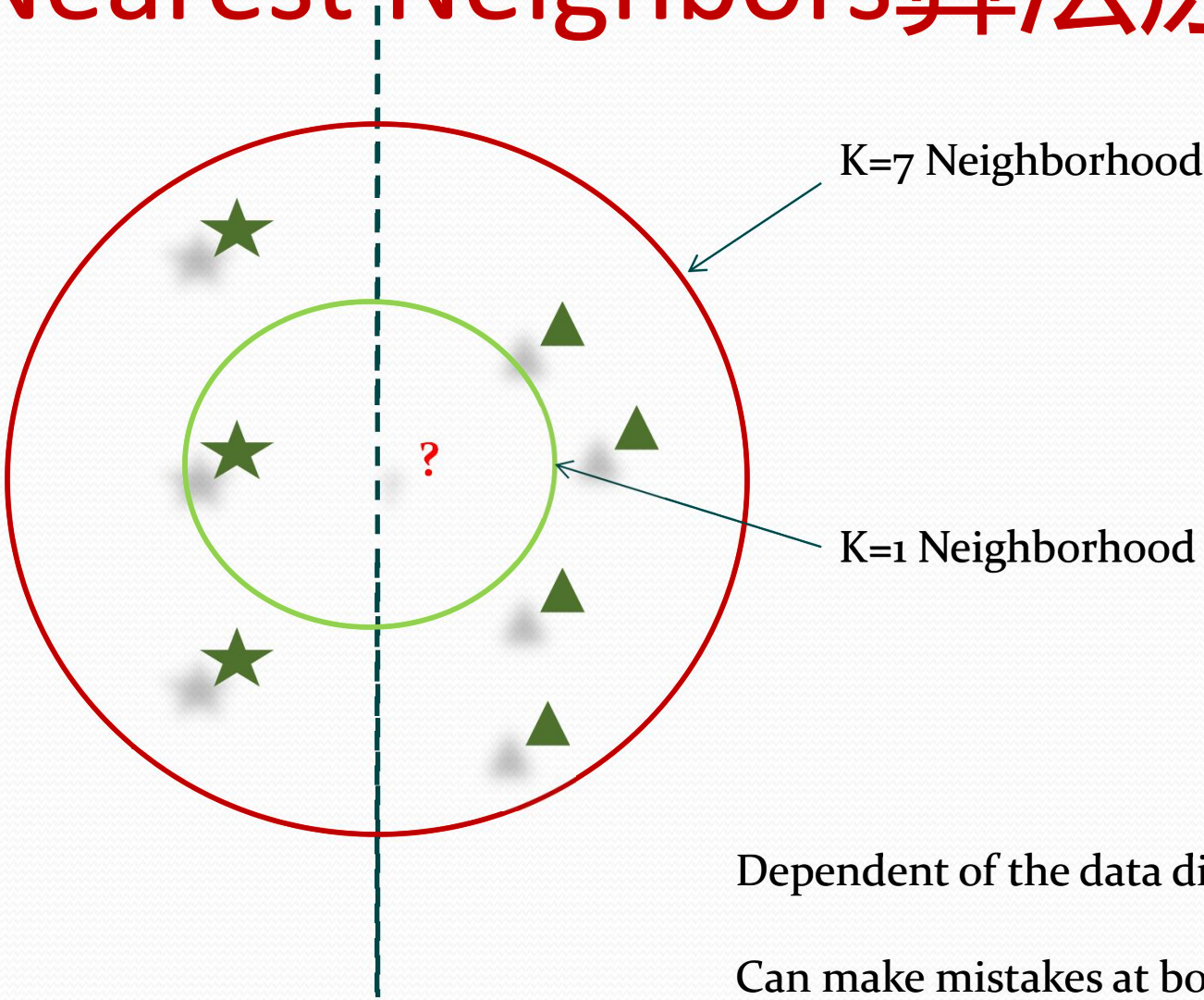
袁春 清华大学深圳研究生院
李航 华为诺亚方舟实验室

目录

一、k 近邻算法

- 原理
- 特点
- 一般流程

K-Nearest Neighbors算法原理



Dependent of the data distributions.

Can make mistakes at boundaries.

K-Nearest Neighbors算法特点

- 优点
  - 精度高
  - 对异常值不敏感
  - 无数据输入假定
- 缺点
  - 计算复杂度高
  - 空间复杂度高
- 适用数据范围
  - 数值型和标称型

K-Nearest Neighbors Algorithm

- 工作原理
  - 存在一个样本数据集合，也称作训练样本集，并且样本集中每个数据都存在标签，即我们知道样本集中每个数据与所属分类的对应关系。
  - 输入没有标签的新数据后，将新数据的每个特征与样本集中数据对应的特征进行比较，然后算法提取样本集中特征最相似数据（最近邻）的分类标签。
  - 一般来说，只选择样本数据集中前N个最相似的数据。K一般不大于20，最后，选择k个中出现次数最多的分类，作为新数据的分类

K近邻算法的一般流程

- 收集数据：可以使用任何方法
- 准备数据：距离计算所需要的数值，最后是结构化的数据格式。
- 分析数据：可以使用任何方法
- 训练算法：　（此步骤kNN）中不适用
- 测试算法：计算错误率
- 使用算法：首先需要输入样本数据和结构化的输出结果，然后运行k-近邻算法判定输入数据分别属于哪个分类，最后应用对计算出的分类执行后续的处理。

二、k 近邻模型

- 模型
- 距离度量
- k 值的选择
- 分类决策规则

模型

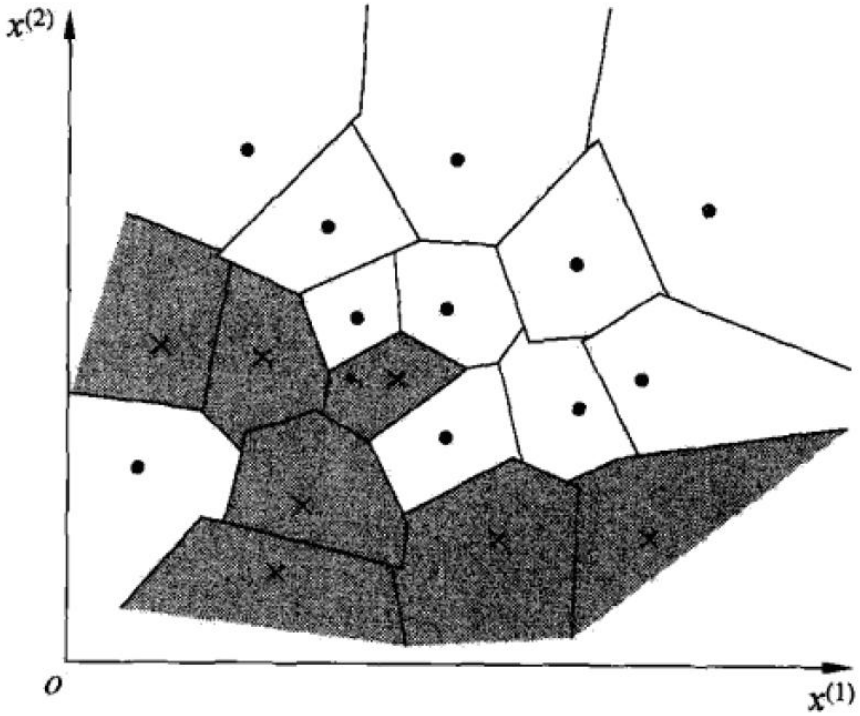


图 3.1　k 近邻法的模型对应特征空间的一个划分

距离度量

$$x_i = (x_i^{(1)}, x_i^{(2)}, \cdots, x_i^{(n)})^{\mathrm{T}}$$

- Lp距离：

$$L_p(x_i, x_j) = \left(\sum_{l=1}^{n} | x_i^{(l)} - x_j^{(l)} |^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

- 欧式距离：

$$L_2(x_i, x_j) = \left(\sum_{l=1}^{n} | x_i^{(l)} - x_j^{(l)} |^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

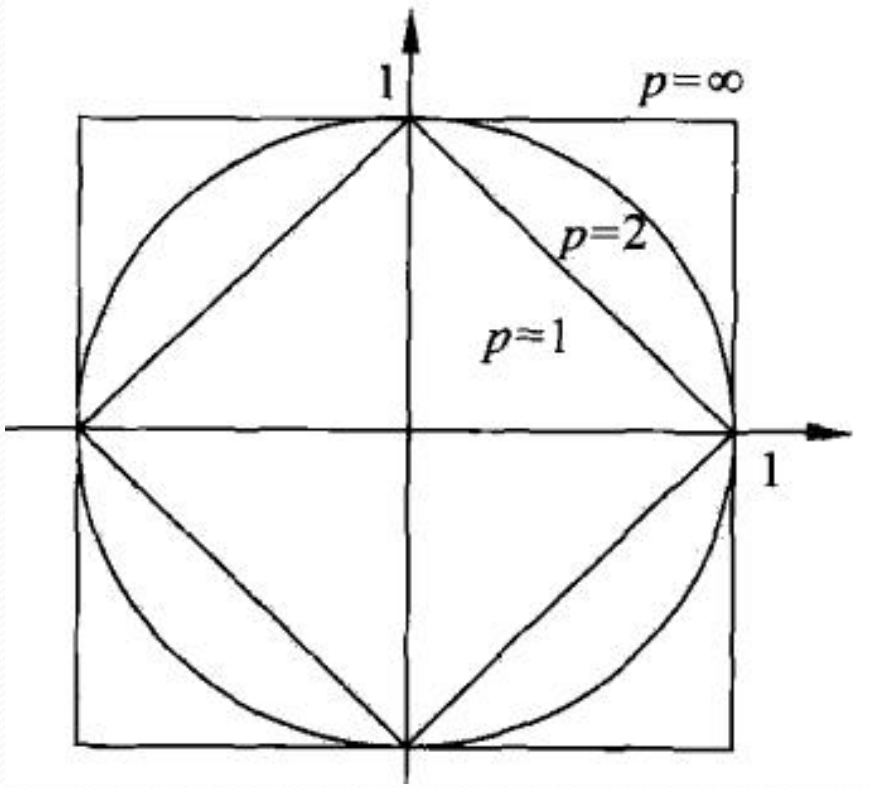
- 曼哈顿距离

$$L_1(x_i, x_j) = \sum_{l=1}^{n} | x_i^{(l)} - x_j^{(l)} |$$

- L∞距离

$$L_\infty(x_i, x_j) = \max_l | x_i^{(l)} - x_j^{(l)} |$$

距离度量



K值的选择

- 如果选择较小的K值
  - “学 习”的近似误差（approximation error)会减小，但“学习”的估计误差（estimation error) 会增大，
  - 噪声敏感
  - K值的减小就意味着整体模型变得复杂，容易发生过 拟合.
- 如果选择较大的K值，
  - 减少学习的估计误差，但缺点是学习的近似误差会增大.
  - K值的增大 就意味着整体的模型变得简单.

分类决策规则

- 多数表决规则（经验风险最小化）

分类函数 $f:\mathbf{R}^n \to \{c_1, c_2, \cdots, c_K\}$

误分类率 $P(Y \neq f(X)) = 1 - P(Y = f(X))$

$$\frac{1}{k}\sum_{x_i \in N_k(x)} I(y_i \neq c_j) = 1 - \frac{1}{k}\sum_{x_i \in N_k(x)} I(y_i = c_j)$$

三、*k* 近邻法的实现：*kd* 树

- 构造 *kd* 树
- 搜索 *kd* 树

KD树

- kd树是一种对K维空间中的实例点进行存储以便对其进行快速检索的树形数据结构.
- Kd树是二叉树，表示对K维空间的一个划分（partition).构造Kd树相 当于不断地用垂直于坐标轴的超平面将k维空间切分，构成一系列的k维超矩形区域.Kd树的每个结点对应于一个k维超矩形区域.

KD树

- 构造kd树：
- 对深度为j的节点，选择x^l为切分的坐标轴 $l = j(\mathrm{mod}\, k) + 1$
- 例： $T = \{(2,3)^T, (5,4)^T, (9,6)^T, (4,7)^T, (8,1)^T, (7,2)^T\}$

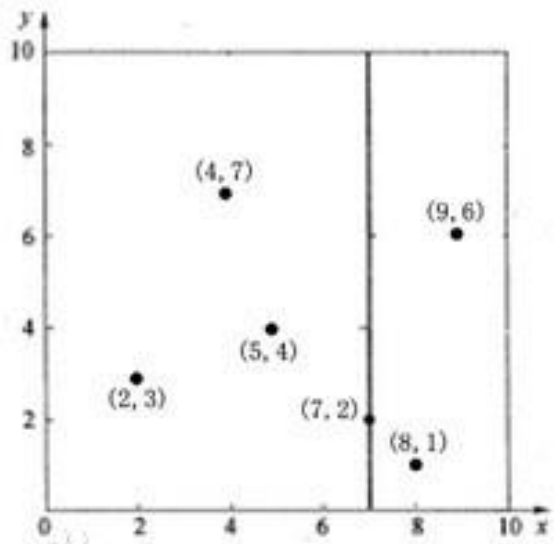


图2 x=7将整个空间分为两部分

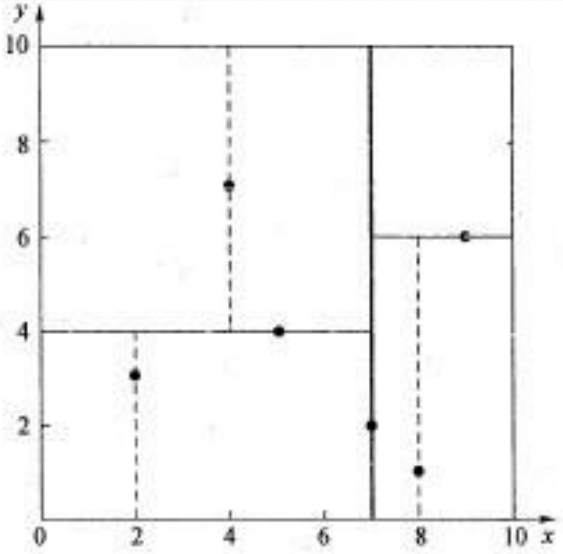
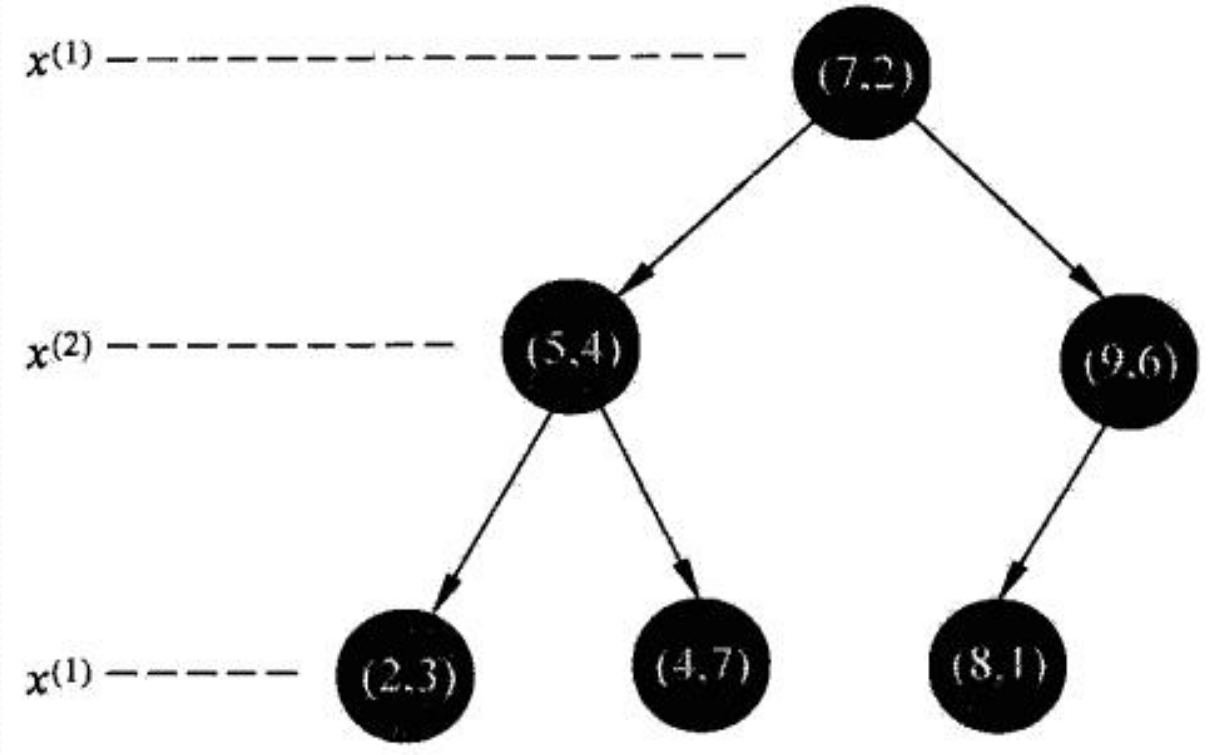


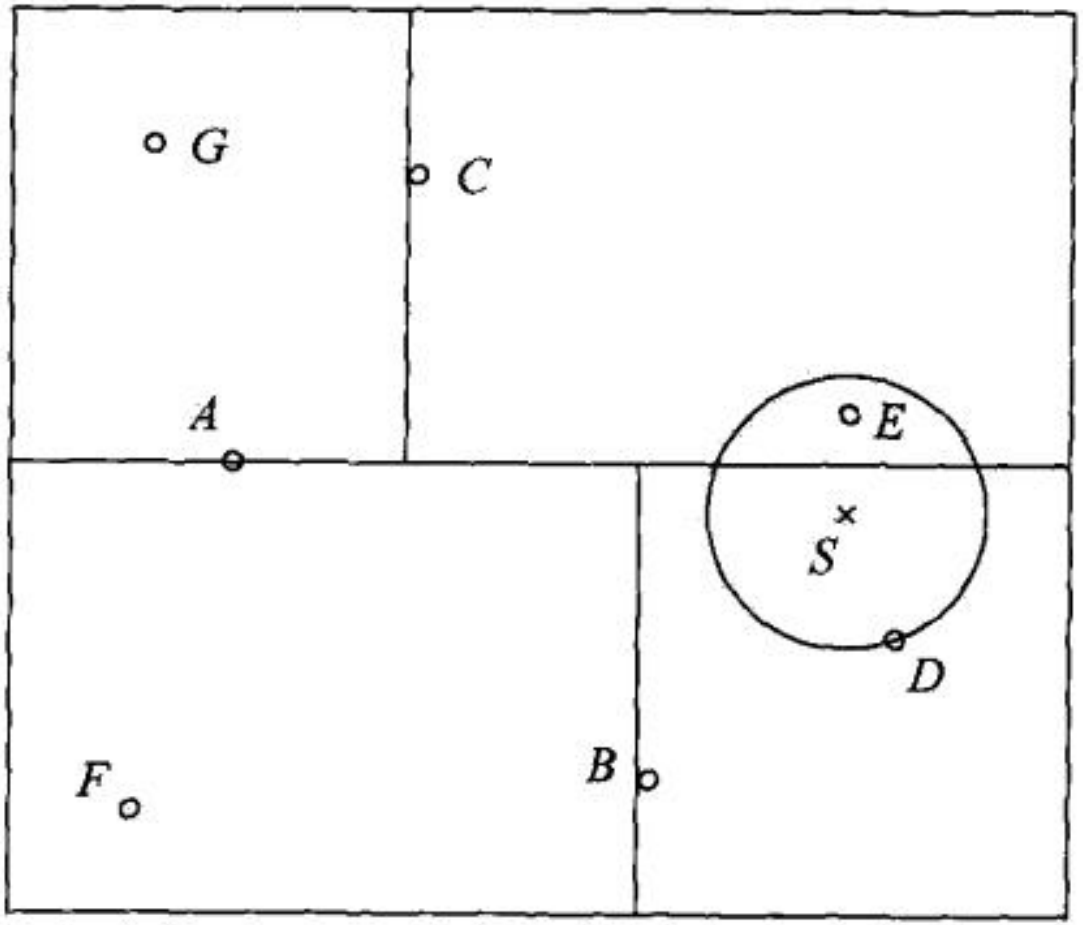
图1 二维数据k-d树空间划分示意图

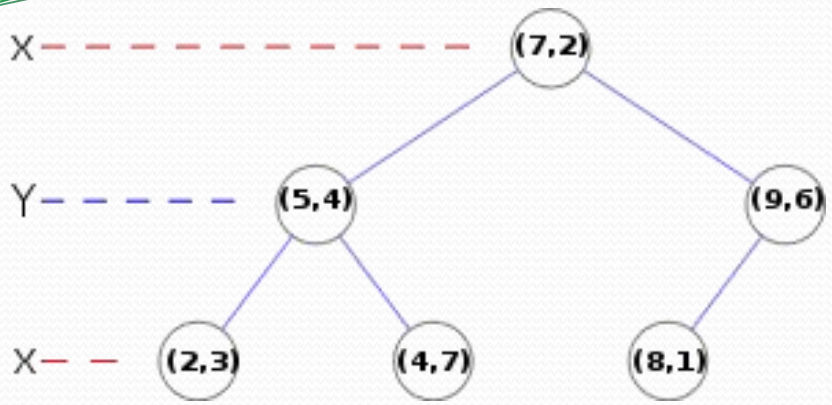
KD树

- {(2,3),(5,4),(9,6),(4,7),(8,1),(7,2)},
- 建立索引



KD树搜索





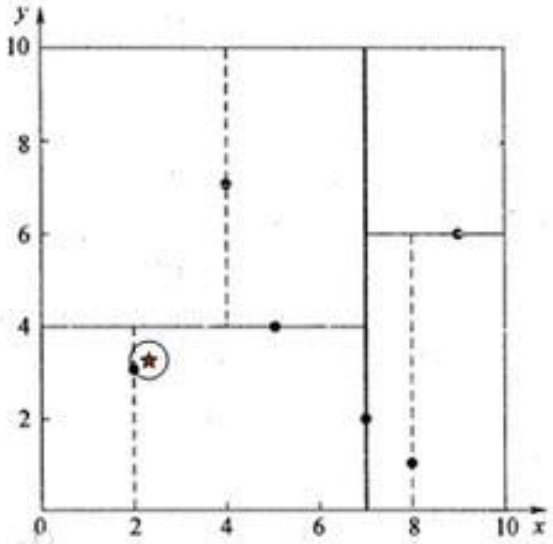


图4 查找（2.1，3.1）点的两次回溯判断

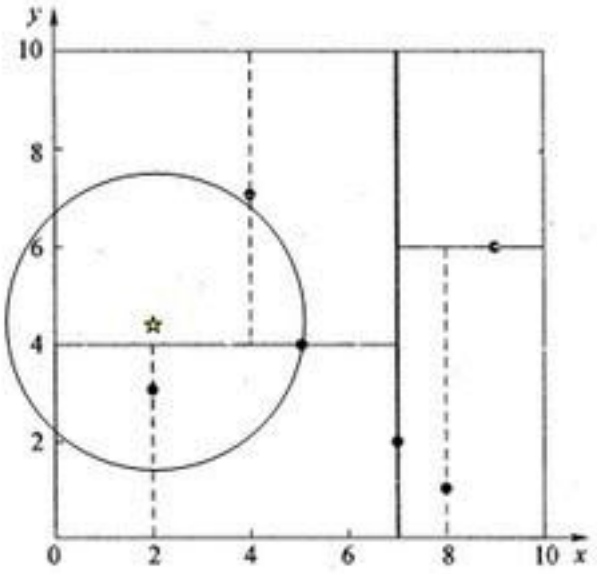


图5 查找（2，4.5）点的第一次回溯判断

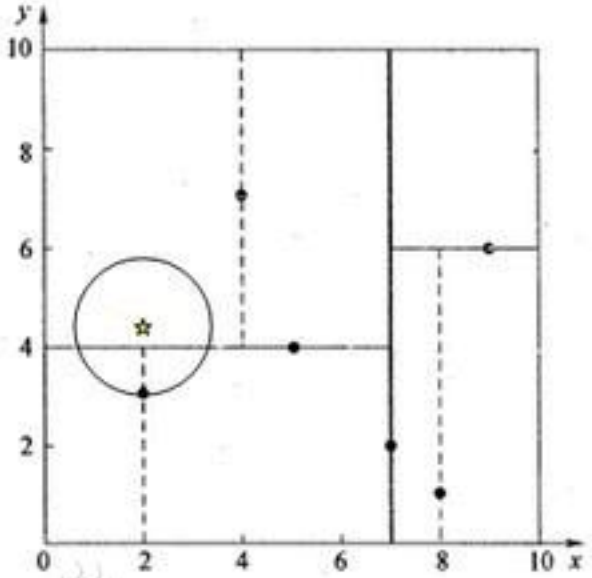


图6 查找（2，4.5）点的第二次回溯判断

Q & A