机器学习算法 kNN 实现简介

k 近邻(k-Nearest Neighbor, 简称 kNN)学习是一种常用的监督学习方法。所谓"近朱者赤,近墨者黑"。在分类任务中(本项目是这样),为了判定未知样本的类别,以全部训练样本作为代表点,基于某种距离度量,计算未知样本与所有训练样本的距离,并以近邻 k 个样本的大多数类别作为决策未知样本类别的依据,即选择这 k 个样本中出现最多的类别标记作为预测结果,这种方法也被形象地称为"投票法"。

在回归任务中时使用"平均法",即将这 k 个样本的实值输出标记的平均值作为预测结果(有待在新的版本中实现)。

顾名思义, k 无疑是一个十分重要的参数, 通常来说, k 取奇数。当 k 取不同值时, 分类结果会有显著不同。如右图, 考虑待测样本(用圆形表示)的类别, 当 k=3 时, 测试样本被判定为三角形; 当 k=5 时, 测试样本被判定为矩形。而且, k 对噪声数据敏感。

图1-k的选取

由此,项目中评价算法采用了多次使用不同的参数 k 评价数据集的预测正确性,每一次计算从整个数据集中随机抽样,多次得到的结果取 precision 最大的 k 值作为结果。本项目的相应算法可由以下伪代码表示(具体实现详见代码 eval_runner.cpp):

```
SetTrainingAndTestSet(dataset, range)
      trainset \leftarrow \langle \cdot \rangle
2
      testset \leftarrow \langle \cdot \rangle
3
      start \leftarrow R_{ANDOM}(1, 5)
4
      index \leftarrow 0
      while index \le L_{ENGTH}(dataset)
5
6
      do if start\%(L_{ENGTH}(dataset)/range) = 0
7
                  then I<sub>NSERT</sub>(testset, dataset[index])
8
                  else I<sub>NSERT</sub>(trainset, dataset[index])
9
             start \leftarrow start+1
10
             index \leftarrow index+1
      return trainset, testset
```

图 2 - 抽象的随机抽样算法

```
E<sub>VALUATE</sub>(dataset, range)
      result\ list \leftarrow \longleftrightarrow
      k \leftarrow 1
2
      while k < 20
3
4
      do trainset, testset \leftarrow S_{ET}T_{RAINING}A_{ND}T_{EST}S_{ET}(dataset, range)
5
             precision \leftarrow G_{ET}P_{RECISION}(k, trainset, testset)
             if precision = 1
 6
                 then return <k, precision>
7
             I<sub>NSERT</sub>(result list, <k, precision>)
 8
9
             k \leftarrow k+2
 10 InvertedSortByPrecision(result list)
 11 return result list[0]
```

图 3 - 抽象的评价算法

另一方面,若采用不同的距离计算方式,则找出的"近邻"可能有显著差别,从而也会导致分类结果有显著不同。

为解决这一问题,项目实现了两种距离计算方法(有待在更新的版本中增加新的距离算法): 欧氏距离和余弦相似度。在文件 kNNHelper.h 中定义宏 _DISTANCE_TYPE 进行区分,0表示欧氏 距离(默认),1表示余弦相似度,可以根据需要在编译前修改。

> 张 昊 Holger Zhang 2020/05/03

参考资料

[1] 周志华. 机器学习[M]. 清华大学出版社: 北京, 2016: 225-226.