CH03 k近邻法

前言

章节目录

1. k近邻算法
2. k近邻模型
   a. 模型
   b. 距离度量
   c. k值选择
   d. 分类决策规则
3. k近邻法的实现: KDTree
   a. 构造KDTree
   b. 搜索KDTree

导读

kNN是一种基本分类与回归方法。

- kNN是机器学习中被分析的最透彻的算法之一。
- 多数表决规则等价于0-1损失函数下的经验风险最小化，支持多分类，有别于前面的感知机算法
- kNN的k和KDTree的k含义不同，书上这部分有注释说明

- KDTree是一种存储k维空间数据的树结构，KDTree是平衡二叉树
- KNN应用的一个实践问题是如何建立高效的索引。建立空间索引的方法在点云数据处理中也有广泛的应用，KDTree和八叉树在3D点云数据组织中应用比较广
- 书中的KDTree搜索实现的时候针对了一种$k=1$的特殊的情况，实际是**最**近邻搜索
- KDTree的搜索问题分为**k近邻查找**和**范围查找**，一个是已知k，求点集范围，一个是已知范围，求里面有k个点。范围查找问题在维度高的时候复杂度非常高，不太推荐用KDTree做范围查找。
- K近邻问题在杭电ACM里面有收录，HUD4347
- 图像的特征点匹配，数据库查询，图像检索本质上都是同一个问题--相似性检索问题。Facebook开源了一个高效的相似性检索工具Faiss，用于有效的相似性搜索和稠密矢量聚类。
- 这一章有个经典的图，在很多文章和教材上都能看到，就是第一个图3.1。这个图画出了1NN算法在实例空间上的决策面形状。这种类型的图经常被称为在训练集上的的Voronoi图，也叫Thiessen Polygons。可以通过检索Delaunay三角剖分和Voronoi划分进一步了解。
- 在scipy.spatial.KDTree中有KDTree的实现，KDTree在创建马赛克照片的时候可以用到。

最近邻算法

$k=1$的情形，称为最近邻算法。书中后面的分析都是按照最近邻做例子，这样不用判断类别，可以略去一些细节。

k近邻模型

算法

输入: $T=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\dots,(x_N,y_N)\}$，$x_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbf{R^n},y_i\in\mathcal{Y}=\{c_1,c_2,\dots,c_k\}$; 实例特征向量$x$

输出: 实例所属的y

步骤:

1. 根据指定的**距离度量**，在T中查找x的**最近邻的k个点**，覆盖这k个点的x的邻域定义为$N_k(x)$
2. 在$N_k(x)$中应用**分类决策规则**决定x的类别y
$$y=\arg\max_{c_j}\sum_{x_i\in N_k(x)}I(y_i=c_j),i=1,2,\dots,N,j=1,2,\dots,K$$

这里提到了k近邻模型的三要素，如算法描述中黑体标注的部分， 注意这里的三要素和前面说的统计学习方法的三要素不是一个东西。后面讲到隐马尔可夫模型的时候也有三要素。

距离度量

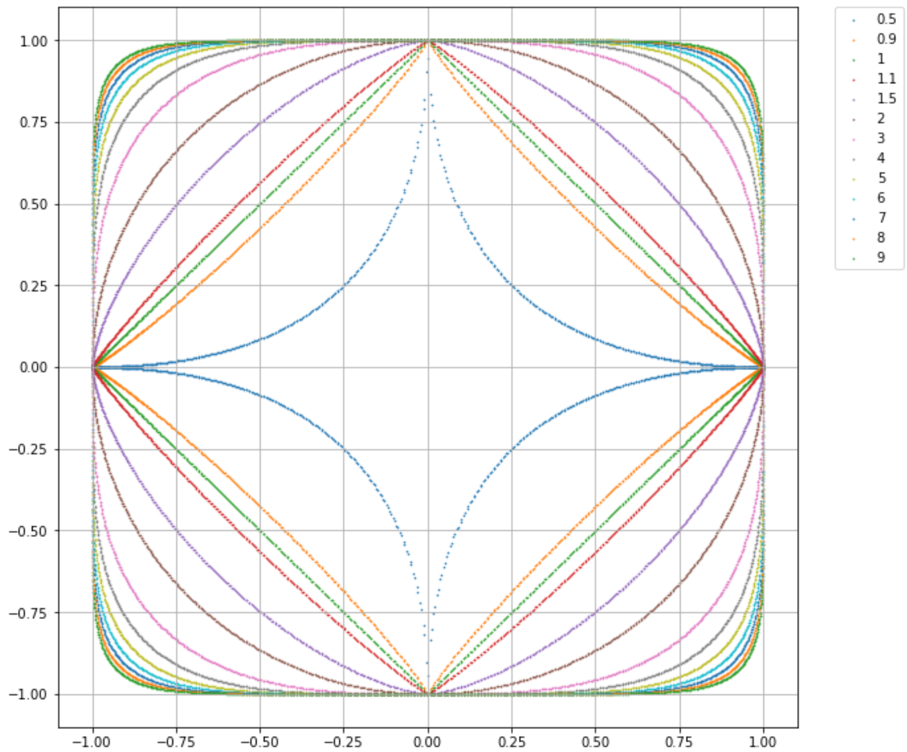
> *特征空间中的两个实例点的距离是两个实例点相似程度的反映。*

书中是如上描述的，这里要注意**距离越近(数值越小)， 相似度越大**。

这里用到了L_p距离, 可以参考Wikipedia上L_p Space词条[1]

1. $p=1$ 对应 曼哈顿距离
2. $p=2$ 对应 欧氏距离
3. 任意p 对应 闵可夫斯基距离

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



考虑二维的情况，上图给出了不同的p值情况下与原点距离为1的点的图形。

这个图有几点理解下:

1. 与原点的距离
2. 与原点距离为1的点
3. 前一点换个表达方式，图中的点向量(x_1, x_2)的p范数都为1
4. 图中包含多条曲线，关于p=1并没有对称关系
5. 定义中$p \geqslant 1$，这一组曲线中刚好是凸的

这里要补充一点：

范数是对向量或者矩阵的度量，是一个标量，这个里面两个点之间的L_p距离可以认为是两个点坐标差值的p范数。

参考下例题3.1的测试案例，这个实际上没有用到模型的相关内容。

k值选择

1. 关于k大小对预测结果的影响，书中给的参考文献是ESL，这本书还有个先导书叫ISL。
2. 通过**交叉验证**选取最优k，算是超参数
3. 二分类问题，k选择奇数有助于避免平票

分类决策规则

Majority Voting Rule

误分类率

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

如果分类损失函数是0-1损失，误分类率最低即经验风险最小。

关于经验风险，参考书上CH01第一章 (1.11)和(1.16)

实现

kNN在实现的时候，要考虑多维数据的存储，这里会用到树结构。

在Scipy Cookbook里面有个kd树具体的实现 [2] 可参考

构造KDTree

KDTree的构建是一个递归的过程

注意: KDTree左边的点比父节点小，右边的点比父节点大。

这里面有提到，KDTree搜索时效率未必是最优的，这个和样本分布有关系。随机分布样本**KDTree搜索**(这里应该是**最**近邻搜索)的平均计算复杂度是$O(\log N)$，空间维数K接近训练样本数N时，搜索效率急速下降，几乎$O(N)$

看维度，如果维度比较高，搜索效率很低。当然，在考虑维度的同时也要考虑样本的规模。

考虑个例子

```
[[1, 1],
 [2, 1],
 [3, 1],
 [4, 1],
 [5, 1],
 [6, 1],
 [100, 1],
 [1000, 1]]
```

这个数据，如果找[100, 1]

搜索KDTree

这部分书中的例子是最近邻的搜索例子。

k近邻查找

KNN查找已知查询点p，树当前节点o，近邻数目k

可以用一个优先队列存储最优的k个点，每次比对回溯节点是否比当前最优点更优的时候，就只需用当前最优中距离p最远的节点来对比，而这个工作对于优先队列来说是$O(1)$的[^3]

范围查询

给定一个范围，问其中有多少点。比较常见的应用是GIS类应用，使用者附近多大半径内包含多少单车，多少酒店等。

实际上为了实现快速搜索， 在空间数据的存储结构上要有考虑。

例子

例3.1

分析p值对最近邻点的影响，这个有一点要注意关于闵可夫斯基距离的理解：

- 两点坐标差的p范数

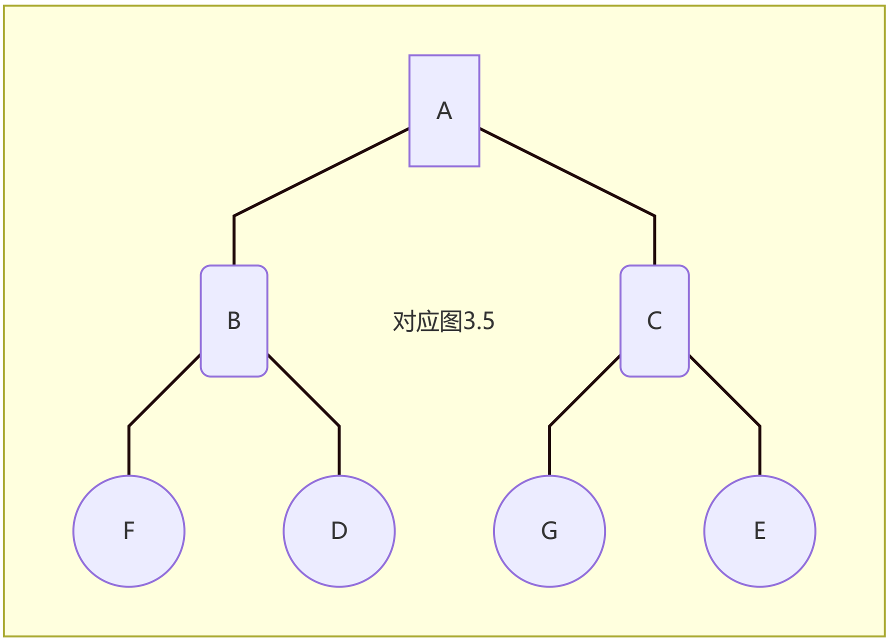
具体看相关测试案例的实现

例3.2

KDTree创建

例3.3

KDTree搜索



这个例子说明了搜索的方法，理解一下书中的图3.5，对应的KDTree如上。

参考

1.
2. ESL
3.
4.
5.

⬆ top

1. Lp Space↩

2. KDTree↩