k-nearest Neighbour (kNN, k近邻法)

1. k近邻算法

k近邻算法(近朱者赤,近墨者黑):给定训练数据集,对新输入的实例,在训练数据集中寻找与该实例最近邻的k个实例,这k个实例多属于某个类,则将输入实例分到这个类别中。

2. k近邻模型

k近邻法中,当(a) 训练集(b) 距离度量(c) k值(d) 决策规则确定后,分类唯一确定。 相当于将特征空间划分成一些子空间,确定子空间每个点所属的类别。

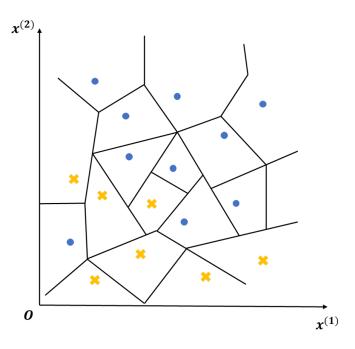


Figure 1: k近邻法的模型对应特征空间的一个划分

2.1. 距离度量

特征空间中实例点之间的距离是其相似度的体现,k近邻模型的特征空间一般是n维实数向量空间 \mathbb{R}^n ,除了欧氏距离外,一般也是用 L_p 距离或Minkowski距离。

设特征空间 \mathcal{X} 是n维实数向量空间 $\mathbb{R}^n, x_i, \quad x_j \in \mathcal{X}, x_i = \left(x_i^{(1)}, x_i^{(2)}, \cdots, x_i^{(n)}\right)^\top, x_j = \left(x_j^{(1)}, x_j^{(2)}, \cdots, x_j^{(n)}\right)^T, \ x_i, x_j$ 的 L_p 距离定义为

$$L_{p}(x_{i}, x_{j}) = \left(\sum_{l=1}^{n} \left| x_{i}^{(l)} - x_{j}^{(l)} \right|^{p} \right)^{\frac{1}{p}}$$
(2.1)

这里 $p \ge 1$ 。当p = 2时,称为欧氏距离(Euclidean distance),即

$$L_2(x_i, x_j) = \left(\sum_{l=1}^n \left| x_i^{(l)} - x_j^{(l)} \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$
 (2.2)

当p = 1时,称为曼哈顿距离(Manhattan distance),即

$$L_1(x_i, x_j) = \sum_{l=1}^{n} \left| x_i^{(l)} - x_j^{(l)} \right|$$
 (2.3)

 $\exists p = \infty$ 时,它是各个坐标距离的最大值,即

$$L_{\infty}(x_i, x_j) = \max_{l} \left| x_i^{(l)} - x_j^{(l)} \right|$$
 (2.4)

2.2. k值的选择

k值的选择会对最后分类结果产生重大影响。

若k值较小,则此时使用较小的邻域进行预测,结果就会对最近邻点比较敏感, 易发生过拟合。

若k值较大,与输入实例较远的x也会预测起到作用,可能造成较大的近似误差。特例:当k = N时,相当于求类别均值。

2.3. 分类决策规则

一般选择"投票法"(majority voting rule)。

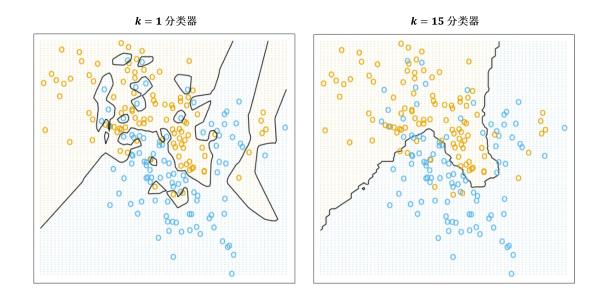


Figure 2: 不同k值对应的k近邻分类器