KNN算法

• 解决分类问题, 多分类问题

• 解决回归问题

• 缺点1: 时间效率低下,每一个新的数据,需要O(m*n)

• 可以通过适用树结构进行优化

• 缺点2: 高度数据相关

• 缺点3: 预测的结果不具有可解释性

• 缺点4: 容易引发维数灾难, 随着维度的增加, "看似相近"的两个点之间的距离越来越大

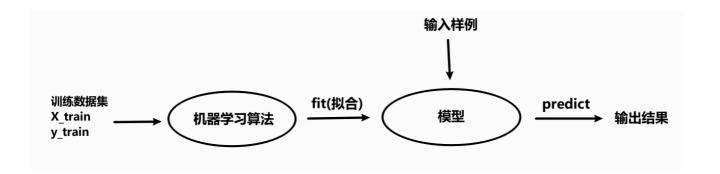
根据实际数据与现有数据的欧拉距离,找到与实际数据最相近的那些点,来确定实际数据的类别

欧拉距离

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (X_i^{(a)} - X_i^{(b)})^2}$$

特点

- 没有模型的算法
- 可以将训练数据集就是模型本身



自己实现

通过机器学习库中 sklearn.neighbors 的 KNeighborsClassifier knn 算法

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
import numpy as np
# 训练数据
          x代表坐标点 y代表类别
raw_data_X = [[3.393533211, 2.331273381],
             [3.110073483, 1.781539638],
             [1.343808831, 3.368360954],
             [3.582294042, 4.679179110],
             [2.280362439, 2.866990263],
             [7.423436942, 4.696522875],
             [5.745051997, 3.533989803],
             [9.172168622, 2.511101045],
             [7.792783481, 3.424088941],
             [7.939820817, 0.791637231]
raw_data_y = [0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1]
# 实际数据 判断 x 数据点属于何种类别(x or y)
x = np.array([8.093607318, 3.365731514])
# 放到 numpy的数组中 x 为矩阵
                            y 为向量
X_train = np.array(raw_data_X)
y_train = np.array(raw_data_y)
# 与数据集距离最近的 n neighbors=7 比较
kNN_classifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
# 进行模型拟合
kNN_classifier.fit(X_train, y_train)
# 对样本进行处理
X \text{ predict} = x.reshape(1, -1)
# 进行样本预测
y_predict = kNN_classifier.predict(X_predict)
print(y_predict[0])
```

KNN的性能

测试现有的数据集生成的模型的准确度,效率

改进算法

train_test_split

将数据集分成两部分:训练集,测试集

进行分类判断

超参数

KNN中决定样本数据与K个训练数据进行距离比较

其中的 K 就是超参数

• 超参数: 在算法运行前需要决定的参数

• 模型参数: 算法过程中学习的参数

KNN算法没有模型参数

KNN算法中的 K 是典型的超参数

调参就是在调整参数

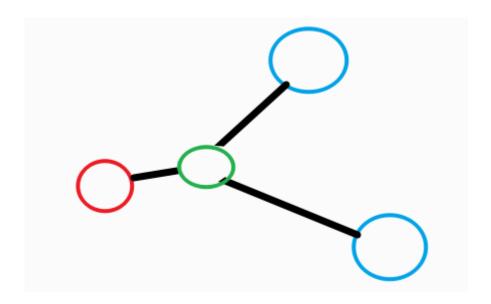
寻找最好的K

通过改变 K值 观察不同的准确性,确定K 的最佳取值

改进现有的KNN算法

将距离也作为考虑因素

考虑如下一种情况:



此时样本绿色圈与红色圈的距离较两个蓝色圈更近,但之前的KNN算法来判断,蓝色数量更多,将样本判断为蓝色类别,这明显是不合理的

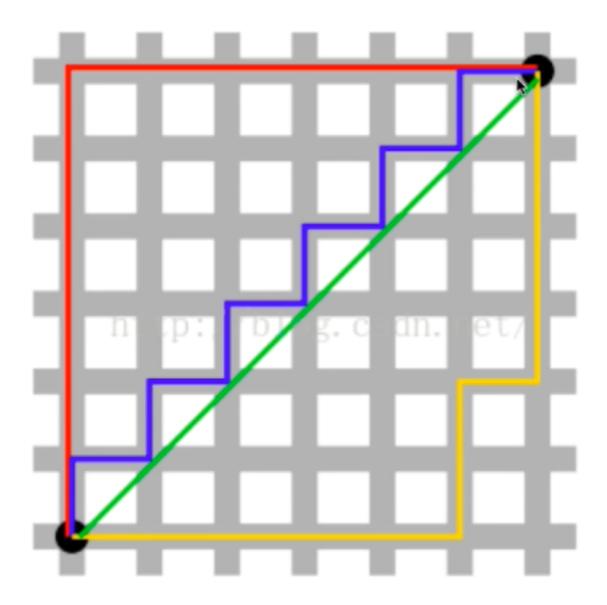
或者说: 当与样本距离最近的几个点中,各个类别所占比例是相等的,之前的KNN算法只能随机选择一个作为样本的判断类别,这明显是不合理的

优化思路:

将距离也考虑进来,将**距离的倒数**作为比较的一个因素

有关距离

- 绿色直线是欧拉距离
- 红线, 黄线是曼哈顿距离



欧拉距离

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (X_i^{(a)} - X_i^{(b)})^2}$$

曼哈顿距离

$$\sum_{i=1}^{n} |X_i^{(a)} - X_i^{(b)}|$$

将两者总结归纳为

明可夫斯基距离

p=1 为曼哈顿

p=1/2 为欧拉距离

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |X_i^{(a)} - X_i^{(b)}|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

此时,对于KNN算法距离的计算,我们有了两种方法,但哪种方法更优,关系到P的取值 所以,要对于这个**超参数 P**进行讨论比较

更多的距离定义

相似度

- 向量空间余弦相似度 Cosine Similarity
- 调整余玄相似度 Adjusted Cosine Similarity
- 皮尔森相关系数 Pearson Correlation Coefficient
- Jaccard 相似系数 Jaccard Coefficient

网格搜索

Grid Search

数据归一化

不同特征之间的量纲不同,导致量纲大的特征值被小的所主导,例如:

	肿瘤大小 (厘米)	发现时间 (天)
样本1	1	200
样本2	5	100

即使样本1的肿瘤大小特征比样本2的小了5倍之多,而发现时间只大了两倍

但因为没有选取最佳的量纲,导致样本1,2之间的特征距离主要由发现时间所决定,影响了对样本的判断

解决方案:将所有的数据映射到同一尺度

其中一种方法是

最值归一化 Normalization

适用于分布有明显边界的情况: 受极值的影响比较大

将数据归一到0-1之间

- 先求特征值中的最大值与最小值的差 max min
- 用样本特征值减去最小值 X min
- 再将两者做除法

$$x_{scale} = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

均值方差归一化 (优先考虑)

数据分布没有明显的边界,有可能存在极端数据值,不受极值的限制

把所有数据归一到均值为0 方差为 1 的分布中

$$x_{scale} = \frac{x - x_{mean}}{s}$$

numpy.mean(numpyArray) # 求数组的均值 numpy.std(numpyArray) # 求数组的方差

对测试数据集进行归一化

mean train

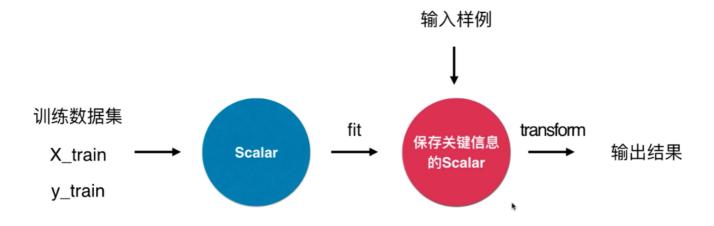
std train

在进行拟合模型时, 训练数据集进行归一化后

对于测试数据,进行归一化时,应该采用训练数据集的方差与均值

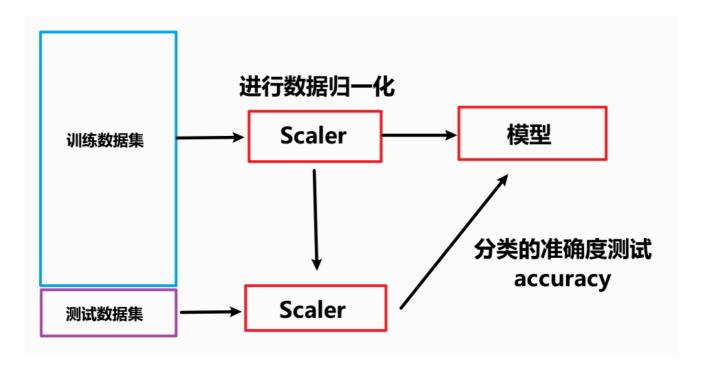
(X_test - mean_train) / std_train

python中专门的库来应对这种情况,保存关键信息



机器学习流程

先使用网格搜索寻找最好的超参数



维数灾难

随着维度的增加,"看似相近"的两个点之间的距离越来越大

1维	0到1的距离	1
2维	(0, 0) 到 (1, 1) 的距离	1.414
3维	(0, 0) 到 (1, 1) 的距离	1.732
64维	(0, 00) 到 (1, 11)	8
10000维	(0, 0,0) 到 (1, 11)	100

解决方法: 降维