k 近邻法

一、k 近邻算法

1. k 近邻法（`k-Nearest Neighbor:kNN`）是一种基本的分类与回归方法。
   - 分类问题：对新的样本，根据其 k 个最近邻的训练样本的类别，通过多数表决等方式进行预测。
   - 回归问题：对新的样本，根据其 k 个最近邻的训练样本标签值的均值作为预测值。
2. k 近邻法不具有显式的学习过程，它是直接预测。它是“惰性学习”(`lazy learning`)的著名代表。
   - 它实际上利用训练数据集对特征向量空间进行划分，并且作为其分类的"模型"。
   - 这类学习技术在训练阶段仅仅将样本保存起来，训练时间开销为零，等到收到测试样本后再进行处理。

     那些在训练阶段就对样本进行学习处理的方法称作“急切学习”(`eager learning`)。
3. k 近邻法是个非参数学习算法，它没有任何参数（k 是超参数，而不是需要学习的参数）。
   - k 近邻模型具有非常高的容量，这使得它在训练样本数量较大时能获得较高的精度。
   - 它的缺点有：
     - 计算成本很高。因为需要构建一个 $N \times N$ 的距离矩阵，其计算量为 $O(N^2)$，其中 N 为训练样本的数量。

       当数据集是几十亿个样本时，计算量是不可接受的。
     - 在训练集较小时，泛化能力很差，非常容易陷入过拟合。
     - 无法判断特征的重要性。
4. k 近邻法的三要素：
   - k 值选择。
   - 距离度量。
   - 决策规则。

1.1 k 值选择

1. 当 $k=1$ 时的 k 近邻算法称为最近邻算法，此时将训练集中与 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的点的类别作为 $\vec{\mathbf{x}}$ 的分类。
2. k 值的选择会对 k 近邻法的结果产生重大影响。
   - 若 k 值较小，则相当于用较小的邻域中的训练样本进行预测，"学习"的偏差减小。

     只有与输入样本较近的训练样本才会对预测起作用，预测结果会对近邻的样本点非常敏感。

     若近邻的训练样本点刚好是噪声，则预测会出错。即： k 值的减小意味着模型整体变复杂，易发生过拟合。
     - 优点：减少"学习"的偏差。
     - 缺点：增大"学习"的方差（即波动较大）。
   - 若 k 值较大，则相当于用较大的邻域中的训练样本进行预测。

     这时输入样本较远的训练样本也会对预测起作用，使预测偏离预期的结果。

     即： k 值增大意味着模型整体变简单。
     - 优点：减少"学习"的方差（即波动较小）。

    - 缺点：增大"学习"的偏差。
3. 应用中， k 值一般取一个较小的数值。通常采用交叉验证法来选取最优的 k 值。

1.2 距离度量

1. 特征空间中两个样本点的距离是两个样本点的相似程度的反映。

   k 近邻模型的特征空间一般是 n 维实数向量空间 $\mathbb{R}^n$ ，k 其距离一般为欧氏距离，也可以是一般的 L_p 距离：

$$L_p(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=(\sum_{l=1}^{n}|x_{i,l}-x_{j,l}|^p)^{1/p},\quad p\geq 1$$

$$\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathcal{X}=\mathbb{R}^n;\quad \vec{\mathbf{x}}_i=(x_{i,1},x_{i,2},\cdots,x_{i,n})^T$$

   - 当 $p=2$ 时，为欧氏距离： $L_2(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=(\sum_{l=1}^{n}|x_{i,l}-x_{j,l}|^2)^{1/2}$
   - 当 $p=1$ 时，为曼哈顿距离： $L_1(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\sum_{l=1}^{n}|x_{i,l}-x_{j,l}|$
   - 当 $p=\infty$ 时，为各维度距离中的最大值： $L_\infty(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\max_l|x_{i,l}-x_{j,l}|$
2. 不同的距离度量所确定的最近邻点是不同的。

1.3 决策规则

1.3.1 分类决策规则

1. 分类决策通常采用多数表决，也可以基于距离的远近进行加权投票：距离越近的样本权重越大。
2. 多数表决等价于经验风险最小化。

   设分类的损失函数为 $0-1$ 损失函数，分类函数为 $f:\mathbb{R}^n\to\{c_1,c_2,\cdots,c_K\}$。

   给定样本 $\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X}$ ，其最邻近的 k 个训练点构成集合 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$。设涵盖 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 区域的类别为 c_m（这是待求的未知量，但是它肯定是 $c_1,c_2,\cdots,c_K$ 之一），则损失函数为：

$$L=\frac{1}{k}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}I(\tilde{y}_i\neq c_m)=1-\frac{1}{k}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}I(\tilde{y}_i=c_m)$$

   L 就是训练数据的经验风险。要使经验风险最小，则使得 $\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}I(\tilde{y}_i=c_m)$ 最大。即多数表决：$c_m=\arg\max_{c_m}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}I(\tilde{y}_i=c_m)$ 。

1.3.2 回归决策规则

1. 回归决策通常采用均值回归，也可以基于距离的远近进行加权投票：距离越近的样本权重越大。
2. 均值回归等价于经验风险最小化。

   设回归的损失函数为均方误差。给定样本 $\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X}$ ，其最邻近的 k 个训练点构成集合 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$。设涵盖 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 区域的输出为 $\hat{y}$ ，则损失函数为：

$$L=\frac{1}{k}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}(\tilde{y}_i-\hat{y})^2$$

   L 就是训练数据的经验风险。要使经验风险最小，则有：$\hat{y}=\frac{1}{k}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}\tilde{y}_i$ 。即：均值回归。

1.4 k 近邻算法

1. k 近邻法的分类算法：
   - 输入：

        - 训练数据集 $\mathbb{D}=\{(\vec{\mathbf{x}}_1,\tilde{y}_1),(\vec{\mathbf{x}}_2,\tilde{y}_2),\cdots,(\vec{\mathbf{x}}_N,\tilde{y}_N)\},\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^n,\tilde{y}_i\in\mathcal{Y}=\{c_1,c_2,\cdots,c_K\}$
        - 给定样本 $\vec{\mathbf{x}}$
    - 输出： 样本 $\vec{\mathbf{x}}$ 所属的类别 y
    - 步骤：
        - 根据给定的距离度量，在 $\mathbb{D}$ 中寻找与 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近邻的 k 个点。定义涵盖这 k 个点的 $\vec{\mathbf{x}}$ 的邻域记作 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 。
        - 从 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 中，根据分类决策规则（如多数表决）决定 $\vec{\mathbf{x}}$ 的类别 y ： $y=\arg\max_{c_m}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}I(\tilde{y}_i=c_m)$ 。
2. k 近邻法的回归算法：
    - 输入：
        - 训练数据集 $\mathbb{D}=\{(\vec{\mathbf{x}}_1,\tilde{y}_1),(\vec{\mathbf{x}}_2,\tilde{y}_2),\cdots,(\vec{\mathbf{x}}_N,\tilde{y}_N)\},\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^n,\tilde{y}_i\in\mathcal{Y}\subseteq\mathbb{R}$
        - 给定样本 $\vec{\mathbf{x}}$
    - 输出：样本 $\vec{\mathbf{x}}$ 的输出 y
    - 步骤：
        - 根据给定的距离度量，在 $\mathbb{D}$ 中寻找与 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近邻的 k 个点。定义涵盖这 k 个点的 $\vec{\mathbf{x}}$ 的邻域记作 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 。
        - 从 $\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})$ 中，根据回归决策规则（如均值回归）决定 $\vec{\mathbf{x}}$ 的输出 y ：$y=\frac{1}{k}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{N}_k(\vec{\mathbf{x}})}\tilde{y}_i$ 。

二、 kd树

1. 实现 k 近邻法时，主要考虑的问题是：如何对训练数据进行快速 k 近邻搜索。
2. 最简单的实现方法：线性扫描。此时要计算输入样本与每个训练样本的距离。

   当训练集很大时，计算非常耗时。解决办法是：使用 kd 树来提高 k 近邻搜索的效率。
3. kd 树是一种对 k 维空间中的样本点进行存储以便对其进行快速检索的树型数据结构。

   它是二叉树，表示对 k 维空间的一个划分。
4. 构造 kd 树的过程相当于不断的用垂直于坐标轴的超平面将 k 维空间切分的过程。

   kd 树的每个结点对应于一个 k 维超矩形区域。

2.1 kd树构建算法

1. 平衡 kd 树构建算法：
    - 输入：k 维空间样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\},\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^k$
    - 输出：kd 树
    - 算法步骤：
        - 构造根结点。根结点对应于包含 $\mathbb{D}$ 的 k 维超矩形。

          选择 x_1 为轴，以 $\mathbb{D}$ 中所有样本的 x_1 坐标的中位数 x_1^* 为切分点，将根结点的超矩形切分为两个子区域，切分产生深度为 1 的左、右子结点。切分超平面为： $x_1=x_1^*$ 。
            - 左子结点对应于坐标 $x_1<x_1^*$ 的子区域。
            - 右子结点对应于坐标 $x_1>x_1^*$ 的子区域。
            - 落在切分超平面上的点($x_1=x_1^*$) 保存在根结点。

- 对深度为 j 的结点，选择 x_l 为切分的坐标轴继续切分， $l=j\ (\mathrm{mod}\ \ k)+1$。本次切分之后，树的深度为 $j+1$ 。

  这里取模而不是 $l=j+1$ ，因为树的深度可以超过维度 k 。此时切分轴又重复回到 x_l ，轮转坐标轴进行切分。

- 直到所有结点的两个子域中没有样本存在时，切分停止。此时形成 kd 树的区域划分。

2.2 kd 树搜索算法

1. kd 树最近邻搜索算法（ k 近邻搜索以此类推）：
   - 输入：
     - 已构造的 kd 树
     - 测试点 $\vec{\mathbf{x}}$
   - 输出： $\vec{\mathbf{x}}$ 的最近邻测试点
   - 步骤：
     - 初始化：当前最近点为 $\vec{\mathbf{x}}_{nst}=null$，当前最近距离为 $\mathrm{distance}_{nst}=\infty$ 。
     - 在 kd 树中找到包含测试点 $\vec{\mathbf{x}}$ 的叶结点： 从根结点出发，递归向下访问 kd 树（即：执行二叉搜索）：
       - 若测试点 $\vec{\mathbf{x}}$ 当前维度的坐标小于切分点的坐标，则查找当前结点的左子结点。
       - 若测试点 $\vec{\mathbf{x}}$ 当前维度的坐标大于切分点的坐标，则查找当前结点的右子结点。

       在访问过程中记录下访问的各结点的顺序，存放在先进后出队列 `Queue` 中，以便于后面的回退。
     - 循环，结束条件为 `Queue` 为空。循环步骤为：
       - 从 `Queue` 中弹出一个结点，设该结点为 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 。计算 $\vec{\mathbf{x}}$ 到 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 的距离，假设为 $\mathrm{distance}_q$ 。

         若 $\mathrm{distance}_q<\mathrm{distance}_{nst}$ ，则更新最近点与最近距离：

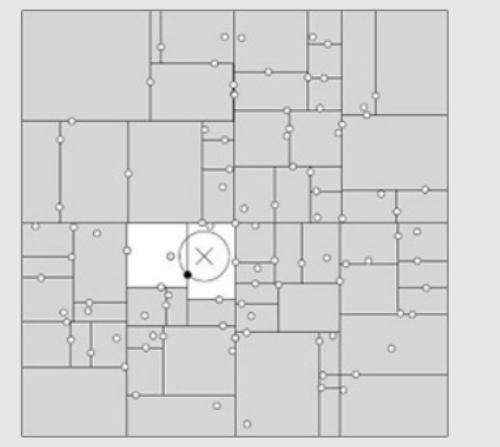
         $$\mathrm{distance}_{nst}=\mathrm{distance}_q,\quad \vec{\mathbf{x}}_{nst}=\vec{\mathbf{x}}_q$$

       - 如果 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 为中间节点：考察以 $\vec{\mathbf{x}}$ 为球心、以 $\mathrm{distance}_{nst}$ 为半径的超球体是否与 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 所在的超平面相交。

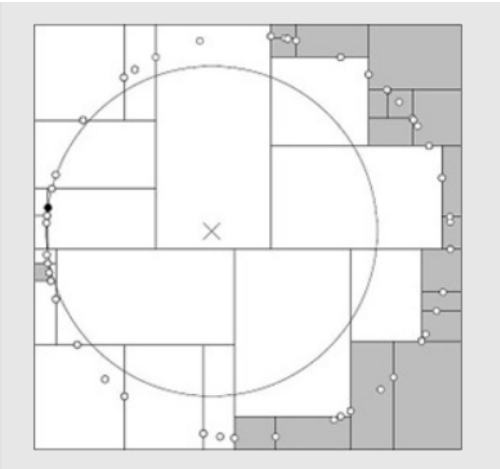
         如果相交：
         - 若 `Queue` 中已经访问过了 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 的左子树，则继续二叉搜索 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 的右子树。
         - 若 `Queue` 中已经访问过了 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 的右子树，则继续二叉搜索 $\vec{\mathbf{x}}_q$ 的左子树。

         二叉搜索的过程中，仍然在 `Queue` 中记录搜索的各结点。
     - 循环结束时，$\vec{\mathbf{x}}_{nst}$ 就是 $\vec{\mathbf{x}}$ 的最近邻点。
2. kd 树搜索的平均计算复杂度为 $O(\log N)$ ， N 为训练集大小。

   kd 树适合 $N>>k$的情形，当 N 与 维度 k 接近时效率会迅速下降。
3. 通常最近邻搜索只需要检测几个叶结点即可：



但是如果样本点的分布比较糟糕时，需要几乎遍历所有的结点：



2.3 示例

1. 假设有 6 个二维数据点：$\mathbb{D}=\{(2,3),(5,4),(9,6),(4,7),(8,1),(7,2)\}$。

   构建`kd`树的过程：

   - 首先从`x`轴开始划分，根据`x`轴的取值`2,5,9,4,8,7`得到中位数为`7`，因此切分线为：$x=7$。

     > 可以根据`x`轴和`y`轴上数据的方差，选择方差最大的那个轴作为第一轮划分轴。

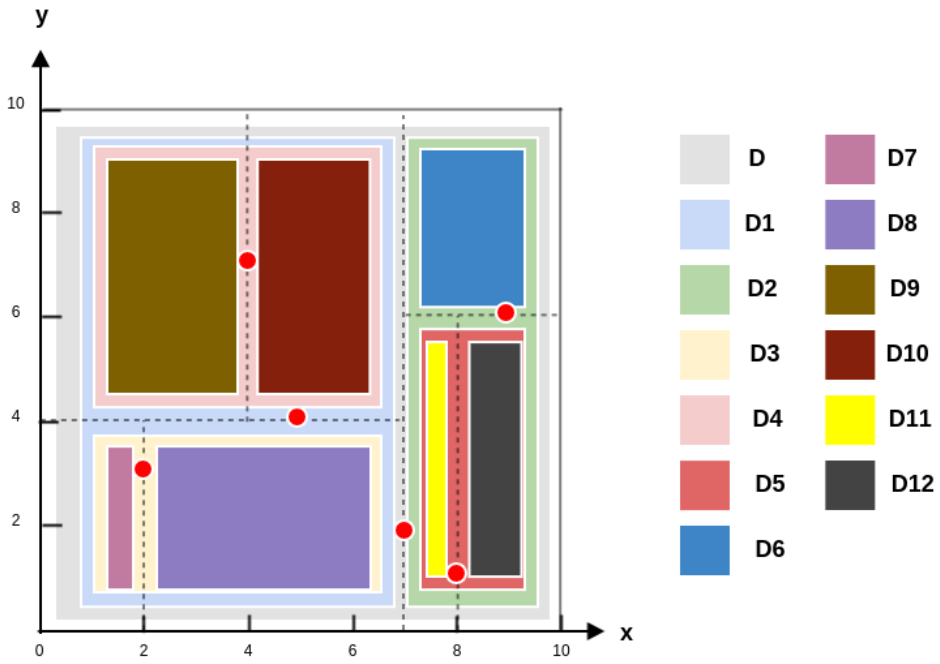
   - 左子空间（记做 $\mathbb{D}_1$）包含点`(2,3),(5,4),(4,7)`，切分轴轮转，从`y`轴开始划分，切分线为：$y=4$。
   - 右子空间（记做 $\mathbb{D}_2$）包含点`(9,6),(8,1)`，切分轴轮转，从`y`轴开始划分，切分线为：$y=6$。
   - $\mathbb{D}_1$ 的左子空间（记做 $\mathbb{D}_3$）包含点`(2,3)`，切分轴轮转，从`x`轴开始划分，切分线为：$x=2$。

     其左子空间记做 $\mathbb{D}_7$，右子空间记做 $\mathbb{D}_8$。由于 $\mathbb{D}_7,\mathbb{D}_8$ 都不包含任何点，因此对它们不再继续拆分。
   - $\mathbb{D}_1$ 的右子空间（记做 $\mathbb{D}_4$）包含点`(4,7)`，切分轴轮转，从`x`轴开始划分，切分线为：$x=4$。

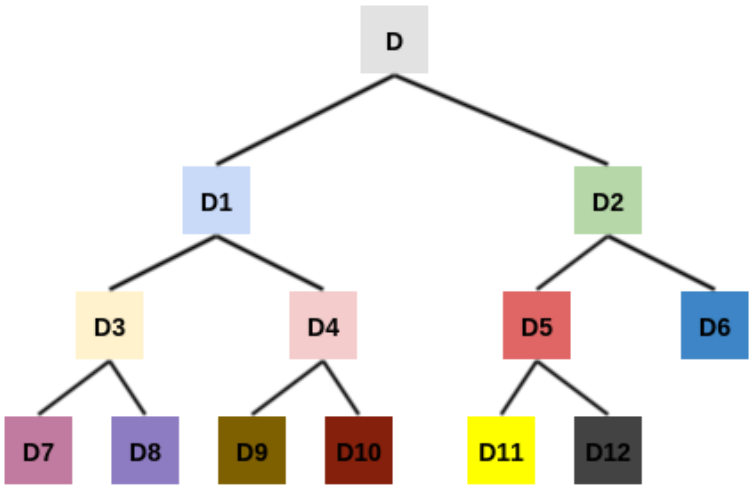
     其左子空间记做 $\mathbb{D}_9$，右子空间记做 $\mathbb{D}_{10}$。由于 $\mathbb{D}_9,\mathbb{D}_{10}$ 都不包含任何点，因此对它们不再继续拆分。
   - $\mathbb{D}_2$ 的左子空间（记做 $\mathbb{D}_5$）包含点`(8,1)`，切分轴轮转，从`x`轴开始划分，切分线为：$x=8$。

     其左子空间记做 $\mathbb{D}_{11}$，右子空间记做 $\mathbb{D}_{12}$。由于 $\mathbb{D}_{11},\mathbb{D}_{12}$ 都不包含任何点，因此对它们不再继续拆分。
   - $\mathbb{D}_2$ 的右子空间（记做 $\mathbb{D}_6$）不包含任何点，停止继续拆分。

最终得到样本空间拆分图如下：

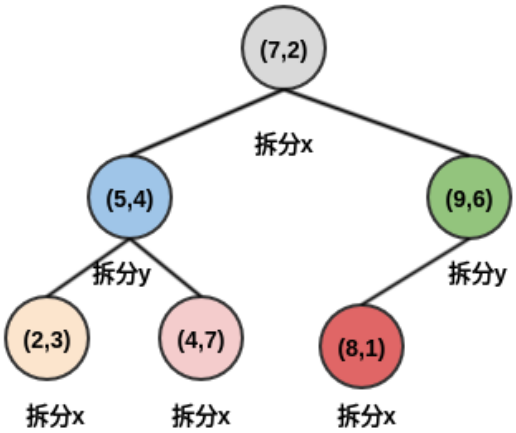


样本空间结构图如下：



`kd` 树如下。

- `kd` 树以树的形式，根据样本空间的拆分，重新组织了数据集的样本点。每个结点都存放着位于划分平面上数据点。
- 由于`样本空间结构图` 中的叶区域不包含任何数据点，因此叶区域不会被划分。因此`kd` 树的高度要比`样本空间结构图` 的高度少一层。
- 从`kd` 树中可以清晰的看到坐标轮转拆分。

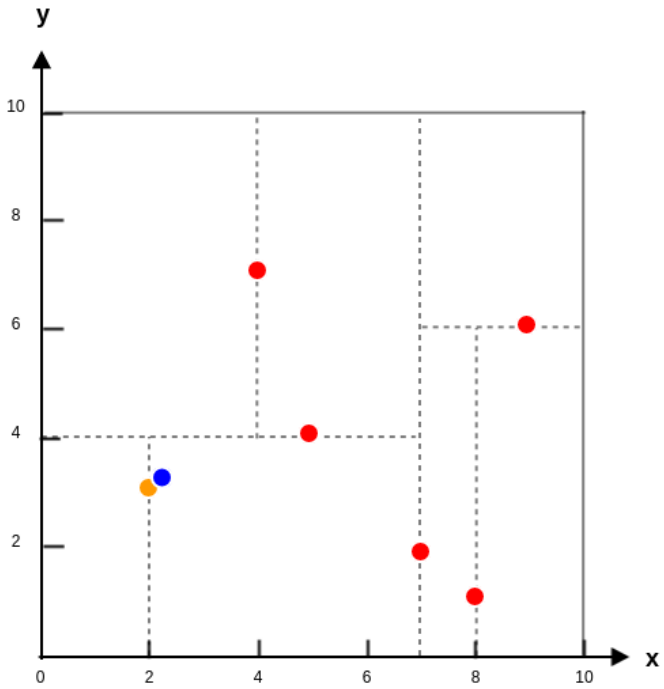


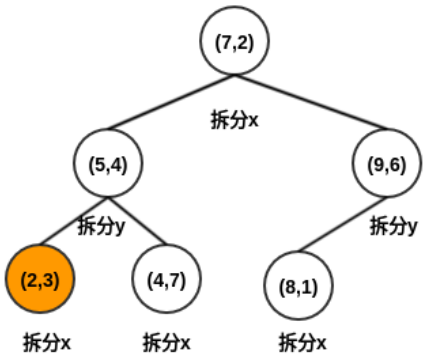
2. 假设需要查询的点是`P=(2.1,3.1)`。

   - 首先从`kd`树进行二叉查找，最终找到叶子节点`(2,3)`，查找路径为：`Queue=<(7,2),(5,4),(2,3)>`。
   - `Queue`弹出结点`(2,3)`：`P`到`(2,3)`的距离为`0.1414`，该距离作为当前最近距离，`(2,3)`作为候选最近邻点。
   - `Queue`弹出结点`(5,4)`：`P`到`(5,4)`的距离为`3.03`。候选最近邻点仍然为`(2,3)`，当前最近距离仍然为`0.1414`。

     因为结点`(5,4)`为中间结点，考察以`P`为圆心，以`0.1414`为半径的圆是否与`y=4`相交。结果不相交，因此不用搜索`(5,4)`的另一半子树。
   - `Queue`弹出结点`(7,2)`：`P`到`(7,2)`的距离为`5.02`。候选最近邻点仍然为`(2,3)`，当前最近距离仍然为`0.1414`。

     因为结点`(7,2)`为中间结点，考察以`P`为圆心，以`0.1414`为半径的圆是否与`x=7`相交。结果不相交，因此不用搜索`(7,2)`的另一半子树。
   - 现在`Queue`为空，迭代结束。因此最近邻点为`(2,3)`，最近距离为`0.1414`。





3. 假设需要查询的点是`P=(2,4.5)`。
   - 首先从`kd`树进行二叉查找，最终找到叶子节点`(4,7)`，查找路径为：`Queue=<(7,2),(5,4),(4,7)>`。
   - `Queue`弹出结点`(4,7)`：`P`到`(4,7)`的距离为`3.202`，该距离作为当前最近距离，`(4,7)`作为候选最近邻点。
   - `Queue`弹出结点`(5,4)`：`P`到`(5,4)`的距离为`3.041`，该距离作为当前最近距离，`(5,4)`作为候选最近邻点。

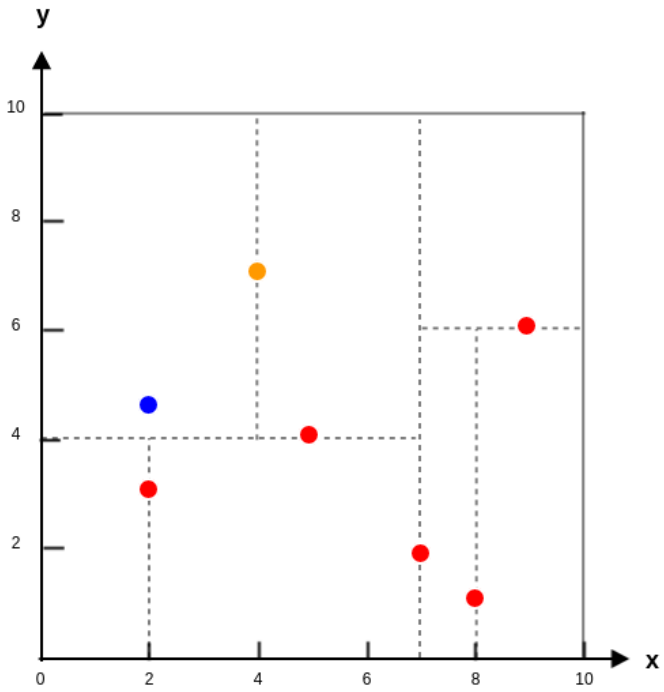
     因为`(5,4)`为中间结点，考察以`P`为圆心，以`3.041`为半径的圆是否与`y=4`相交。

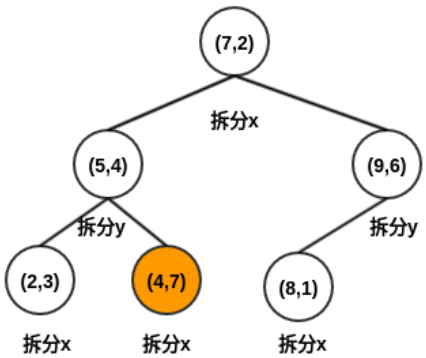
     结果相交，因此二叉搜索`(5,4)`的另一半子树，得到新的查找路径为：`Queue=<(7,2),(2,3)>`。

     > 二叉查找时，理论上`P`应该位于结点`(5,4)`的右子树。但是这里强制进入`(5,4)`的左子树，人为打破二叉查找规则。接下来继续维持二叉查找规则。

   - `Queue`弹出结点`(2,3)`：`P`到`(2,3)`的距离为`1.5`，该距离作为当前最近距离，`(2,3)`作为候选最近邻点。
   - `Queue`弹出结点`(7,2)`：`P`到`(7,2)`的距离为`5.59`。候选最近邻点仍然为`(2,3)`，当前最近距离仍然为`1.5`。

     因为结点`(7,2)`为中间结点，考察以`P`为圆心，以`1.5`为半径的圆是否与`x=7`相交。结果不相交，因此不用搜索`(7,2)`的另一半子树。
   - 现在`Queue`为空，迭代结束。因此最近邻点为`(2,3)`，最近距离为`1.5`。


y
10
8
6
4
2
0
2
4
6
8
10
x


(7,2)
拆分x
(5,4)
(9,6)
拆分y
拆分y
(2,3)
(4,7)
(8,1)
拆分x
拆分x
拆分x