

人工智能之机器学习

K近邻算法(KNN)

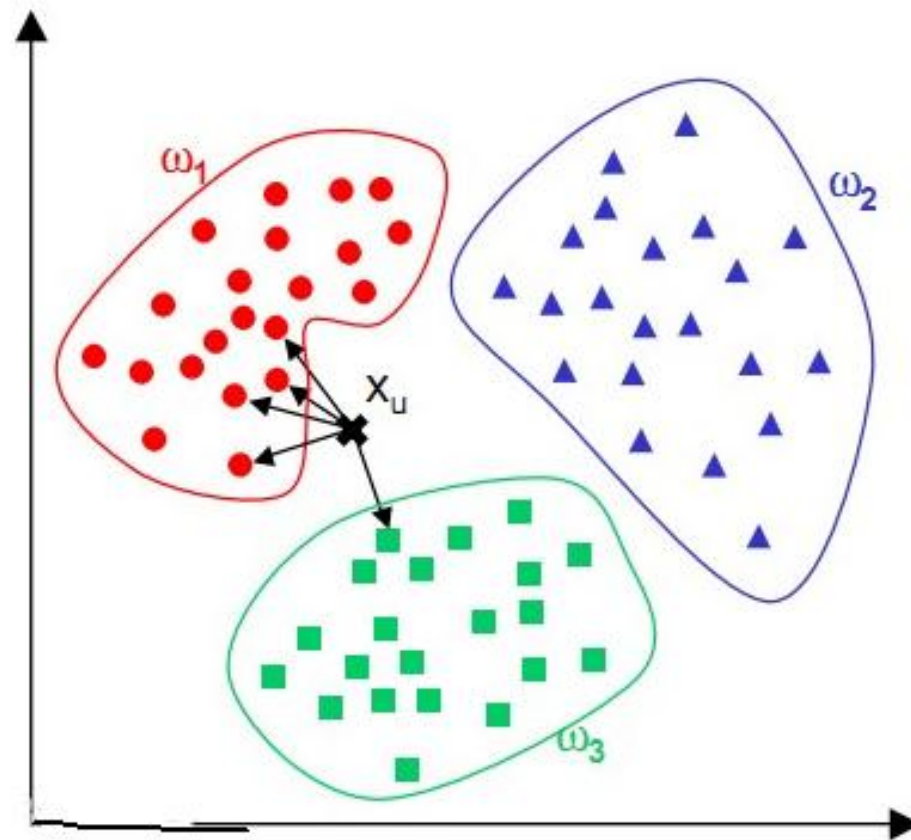
主讲人：刘老师(GerryLiu)

课程要求

- 课上课下 “九字” 真言
 - 认真听，善摘录，勤思考
 - **多温故，乐实践**，再发散
- 四不原则
 - **不懒散惰性，不迟到早退**
 - **不请假旷课，不拖延作业**
- 一点注意事项
 - 违反 “四不原则” ， 不推荐就业

课程内容

- KNN算法
- KD-Tree

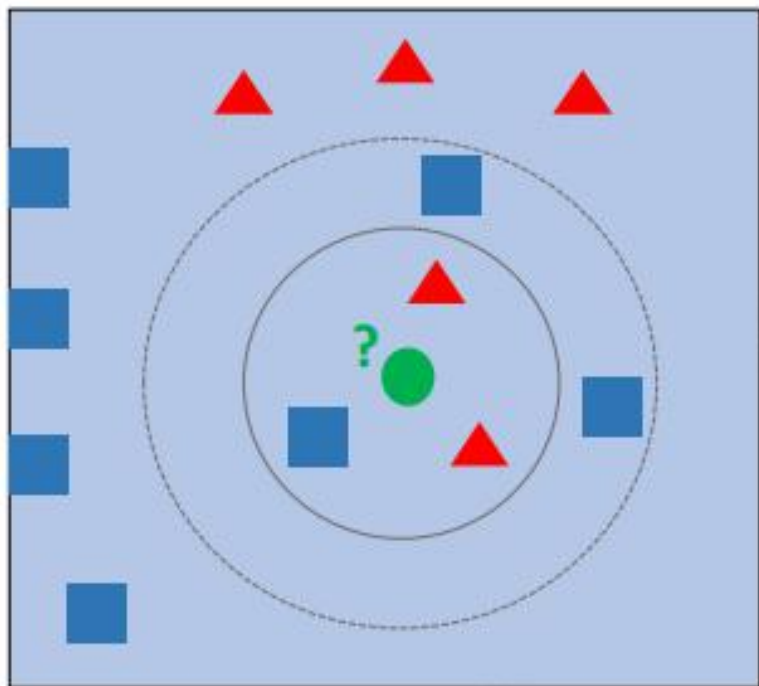


KNN算法原理

- K近邻(K-nearest neighbors, KNN)是一种基本的机器学习算法，所谓k近邻，就是k个最近的邻居的意思，说的是每个样本都可以用它最接近的k个邻居来代表。比如：判断一个人的人品，只需要观察与他来往最密切的几个人的人品好坏就可以得出，即“近朱者赤，近墨者黑”；KNN算法既可以应用于分类应用中，也可以应用在回归应用中。
- KNN在做回归和分类的主要区别在于最后做预测时候的决策方式不同。KNN在分类预测时，一般采用**多数表决法**；而在做回归预测时，一般采用**平均值法**。

KNN算法原理

- 1. 从训练集合中获取K个离待预测样本距离最近的样本数据;
- 2. 根据获取得到的K个样本数据来预测当前待预测样本的目标属性值。



- 如左图中，绿色圆要被决定赋予哪个类，是红色三角形还是蓝色四方形？
- 如果 $K=3$ ，由于红色三角形所占比例为 $2/3$ ，绿色圆将被赋予红色三角形那个类；
- 如果 $K=5$ ，由于蓝色四方形比例为 $3/5$ ，因此绿色圆被赋予蓝色四方形类。

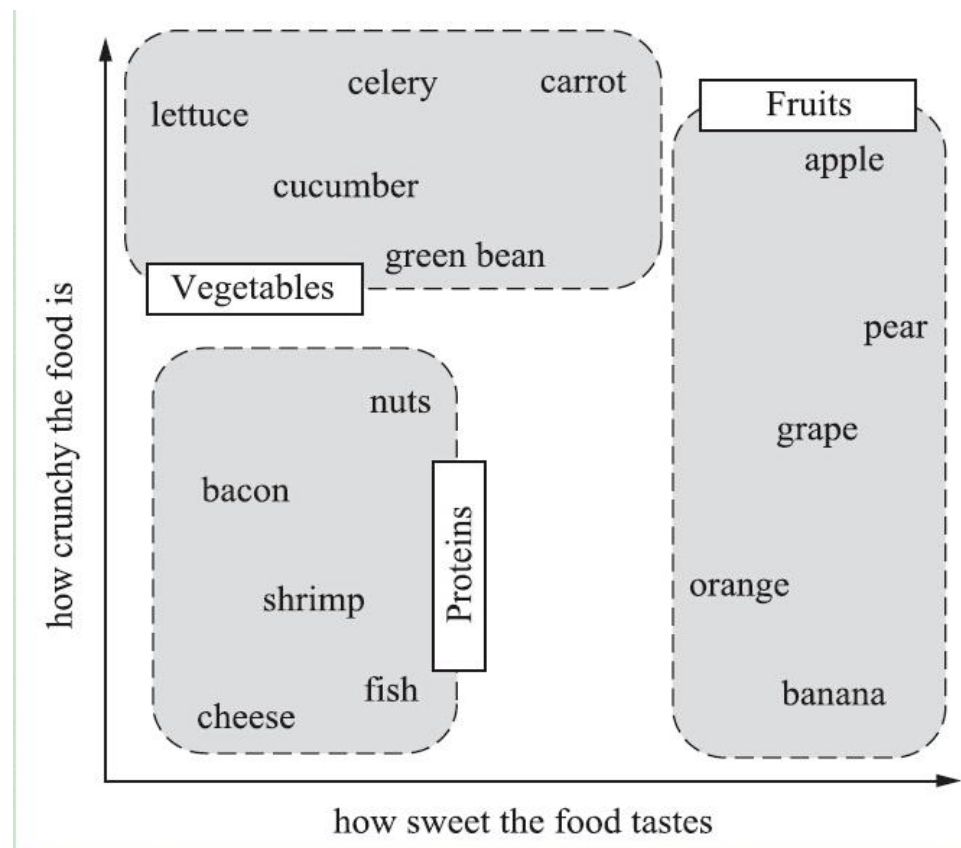
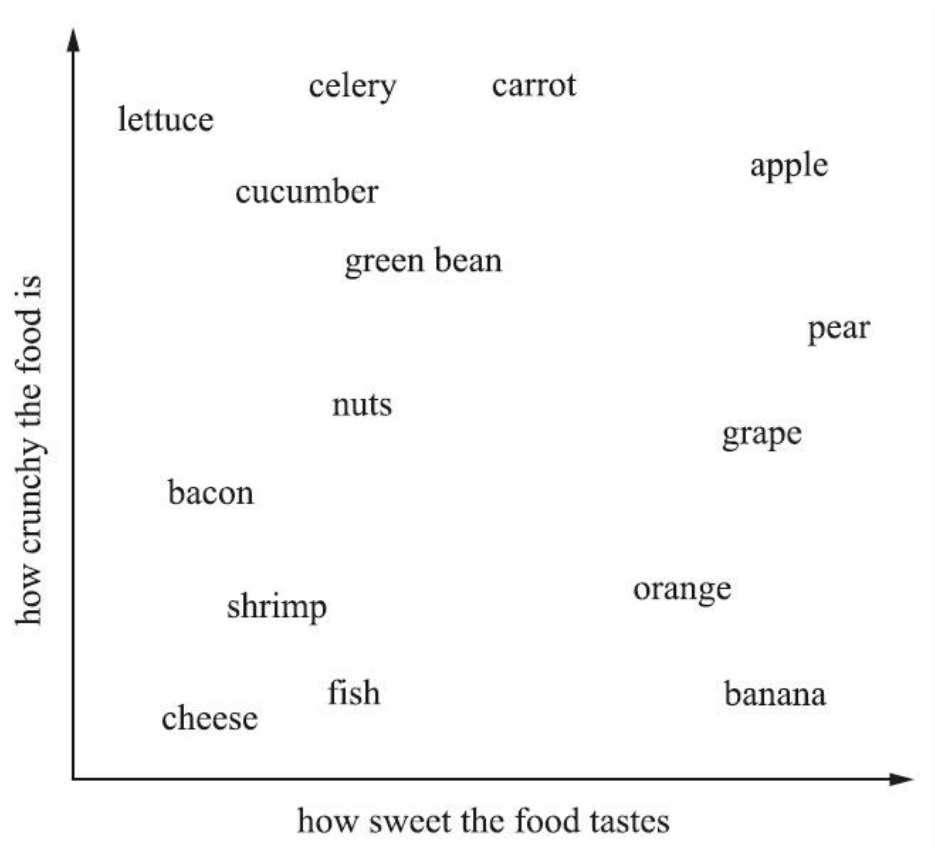
一个案例了解KNN

ingredient	sweetness	crunchiness	food
apple	10	9	fruit
bacon	1	4	protein
banana	10	1	fruit
carrot	7	10	vegetable
celery	3	10	vegetable
cheese	1	1	protein

- 上图中对多种食物提供两个特征，一个特征是对配料有多脆的度量 (crunchiness),取值范围1~10；第二个特征是对配料有多甜的度量 (sweetness) ,取值范围1~10；
- 我们标记配料为3中类型之一：fruit（水果）、vegetable（蔬菜）或者 protein（蛋白质）

一个案例了解KNN

- 我们绘制二维数据的散点图，维度X表示配料的甜度（sweetness），维度y表示配料的脆度（crunchiness），散点图如下：



一个案例了解KNN

- 西红柿是属于哪类呢??

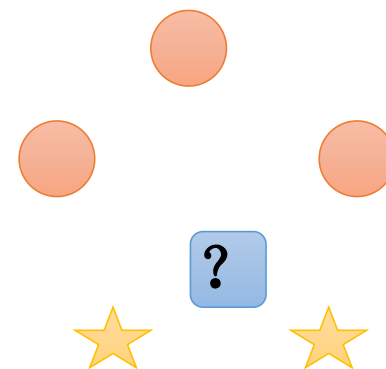


KNN三要素

- 在KNN算法中，非常重要的主要是三个因素：
 - **K值的选择**：对于K值的选择，一般根据样本分布选择一个较小的值，然后通过交叉验证来选择一个比较合适的最终值；当选择比较小的K值的时候，表示使用较小领域中的样本进行预测，训练误差会减小，但是会导致模型变得复杂，容易过拟合；当选择较大的K值的时候，表示使用较大领域中的样本进行预测，训练误差会增大，同时会使模型变得简单，容易导致欠拟合；
 - **距离的度量**：一般使用欧氏距离(欧几里得距离)；
 - **决策规则**：在分类模型中，主要使用多数表决法或者加权多数表决法；在回归模型中，主要使用平均值法或者加权平均值法。

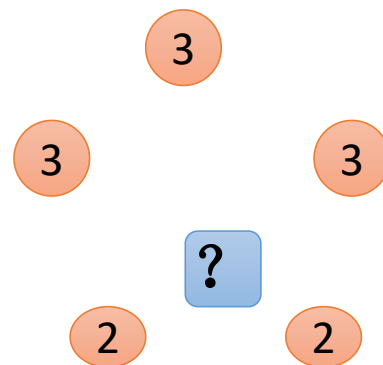
KNN分类预测规则

- 在KNN分类应用中，一般采用多数表决法或者加权多数表决法。
- **多数表决法**：每个邻近样本的权重是一样的，也就是说最终预测的结果为出现类别最多的那个类，比如右图中蓝色圆圈的最最终类别为红色；
- **加权多数表决法**：每个邻近样本的权重是不一样的，一般情况下采用权重和距离成反比的方式来计算，也就是说最终预测结果是出现权重最大的那个类别；比如右图中，假设三个红色点到待预测样本点的距离均为2，两个黄色点到待预测样本点距离为1，那么蓝色圆圈的最最终类别为黄色。



KNN回归预测规则

- 在KNN回归应用中，一般采用平均值法或者加权平均值法。
- 平均值法：**每个邻近样本的权重是一样的，也就是说最终预测的结果为所有邻近样本的目标属性值的均值；比如右图中，蓝色圆圈的最终预测值为：2.6；
- 加权平均值法：**每个邻近样本的权重是不一样的，一般情况下采用权重和距离成反比的方式来计算，也就是说在计算均值的时候进行加权操作；比如右图中，假设上面三个点到待预测样本点的距离均为2，下面两个点到待预测样本点距离为1，那么蓝色圆圈的最终预测值为：2.43。(权重分别为: $1/7$ 和 $2/7$)



KNN算法实现方式

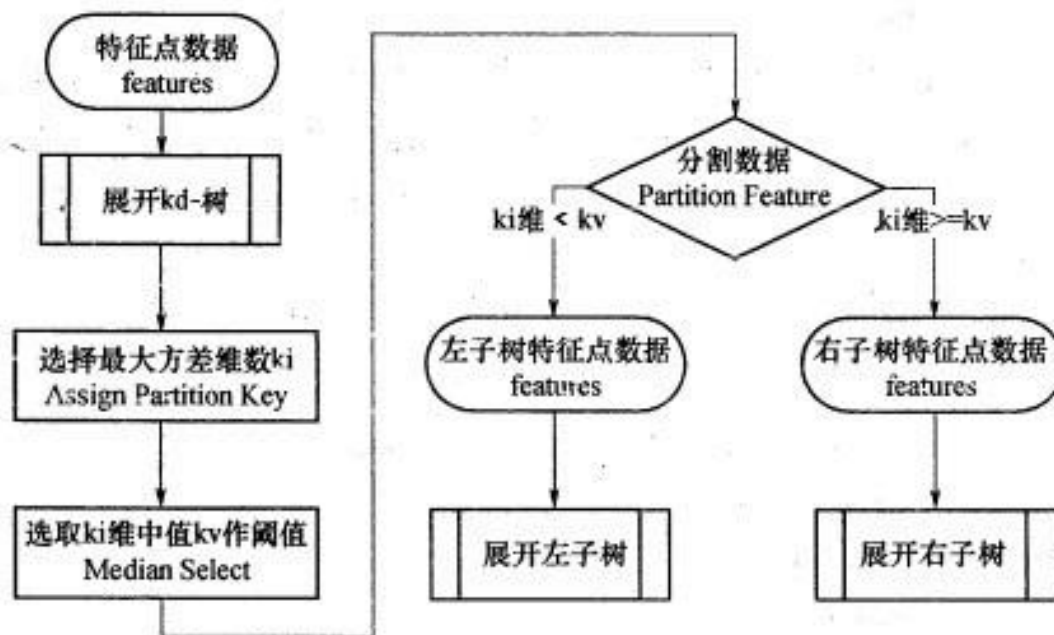
- KNN算法的重点在于找出K个最邻近的点，主要方式有以下几种：
 - **蛮力实现(brute)**：计算预测样本到所有训练集样本的距离，然后选择最小的k个距离即可得到K个最邻近点。缺点在于当特征数比较多、样本数比较多的时候，算法的执行效率比较低；
 - **KD树(kd_tree)**：KD树算法中，首先是对训练数据进行建模，构建KD树，然后再根据建好的模型来获取邻近样本数据。
- 除此之外，还有一些从KD_Tree修改后的求解最邻近点的算法，比如：Ball Tree、BBF Tree、MVP Tree等。

KD Tree

- KD Tree是KNN算法中用于计算最近邻的快速、便捷构建方式。
- 当样本数据量少的时候，我们可以使用brute这种暴力的方式进行求解最近邻，即计算到所有样本的距离。但是当样本量比较大的时候，直接计算所有样本的距离，工作量有点大，所以在这种情况下，我们可以使用kd tree来快速的计算。

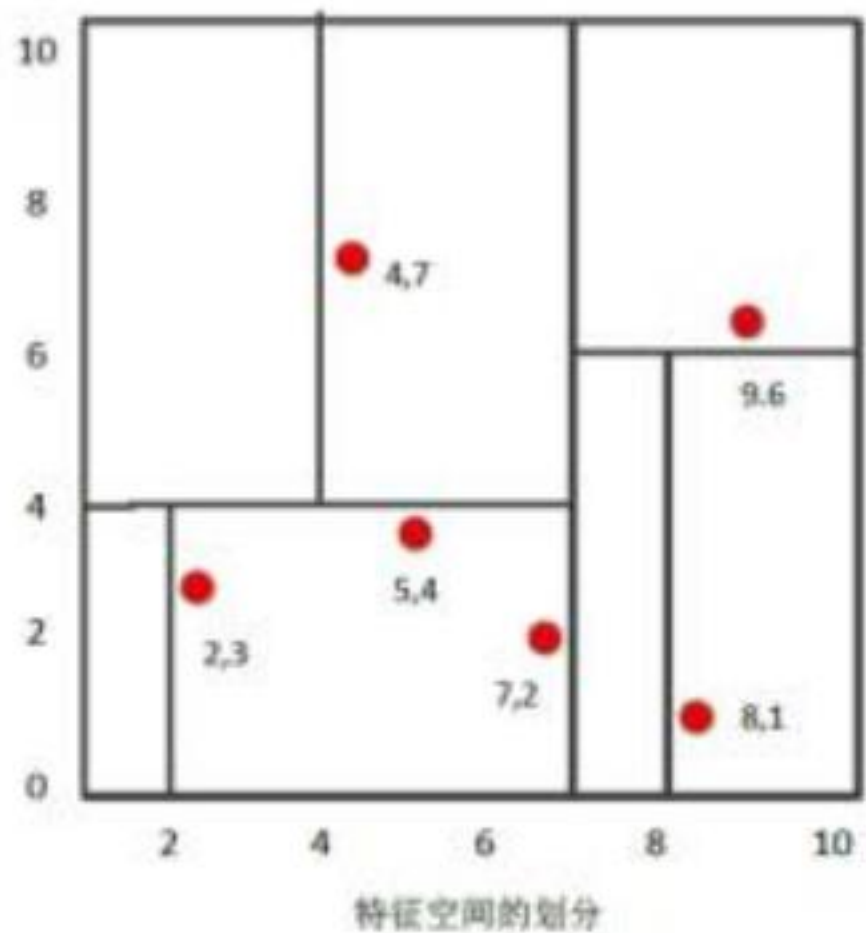
KD Tree构建方式

- KD树采用从 m 个样本的 n 维特征中，分别计算 n 个特征取值的方差，用方差最大的第 k 维特征 n_k 作为根节点。对于这个特征，选择取值的中位数 n_{kv} 作为样本的划分点，对于小于该值的样本划分到左子树，对于大于等于该值的样本划分到右子树，对左右子树采用同样的方式找方差最大的特征作为根节点，递归即可产生KD树。



KD tree

- 二维样本: $\{(2,3), (5,4), (9,6), (4,7), (8,1), (7,2)\}$



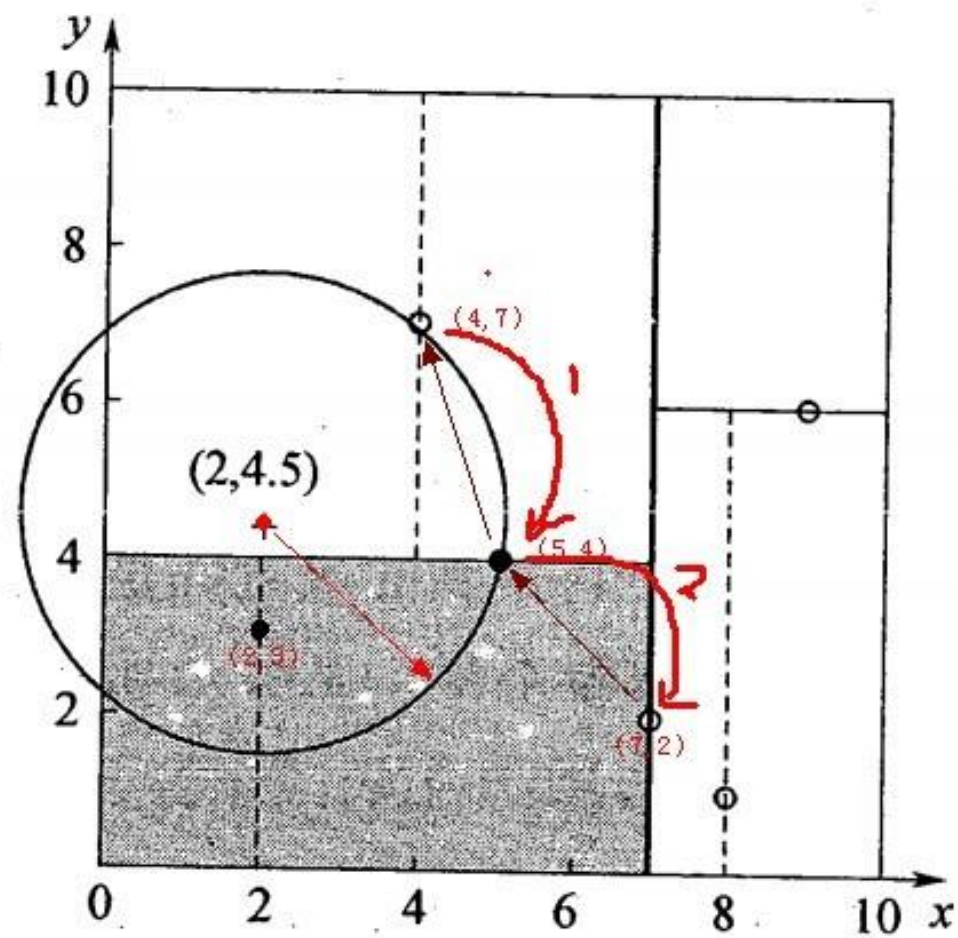
KD tree查找最近邻

- 当我们生成KD树以后，就可以去预测测试集里面的样本目标点了。对于一个目标点，我们首先在KD树里面找到包含目标点的叶子节点。以目标点为圆心，以目标点到叶子节点中样本实例的最短距离为半径，得到一个超球体，最近邻的点一定在这个超球体内部。然后返回叶子节点的父节点，检查另一个子节点包含的超矩形体是否和超球体相交，如果相交就到这个子节点寻找是否有更加近的近邻，有的话就更新最近邻。如果不相交那就简单了，我们直接返回父节点的父节点，在另一个子树继续搜索最近邻。当回溯到根节点时，算法结束，此时保存的最近邻节点就是最终的最近邻。

KD tree查找最近邻

- 找到所属的叶子节点后，以目标点为圆心，以目标点到最近样本点(一般为当前叶子节点中的其它训练数据或者刚刚经过的父节点)为半径画圆，从最近样本点往根节点进行遍历，如果这个圆和分割节点的分割线有交线，那么就考虑分割点的另外一个子树。如果在遍历过程中，找到距离比刚开始的样本距离近的样本，那就进行更新操作。
- 一直迭代遍历到根节点上，结束循环找到最终的最小距离的样本。

KD tree查找最近邻



KNN参数说明

参数	KNeighborsClassifier	KNeighborsRegressor
weights	样本权重，可选参数: uniform(等权重)、distance(权重和距离成反比，越近影响越强)；默认为uniform	
n_neighbors	邻近数目，默认为5	
algorithm	计算方式，默认为auto，可选参数: auto、ball_tree、kd_tree、brute；推荐选择kd_tree	
leaf_size	在使用KD_Tree、Ball_Tree的时候，允许存在最多的叶子数量，默认为30	
metric	样本之间距离度量公式，默认为minkowski（闵可夫斯基）；当参数p为2的时候，其实就是欧几里得距离	
p	给定minkowski距离中的p值，默认为2	

分类问题综合案例(二): 鸢尾花数据分类

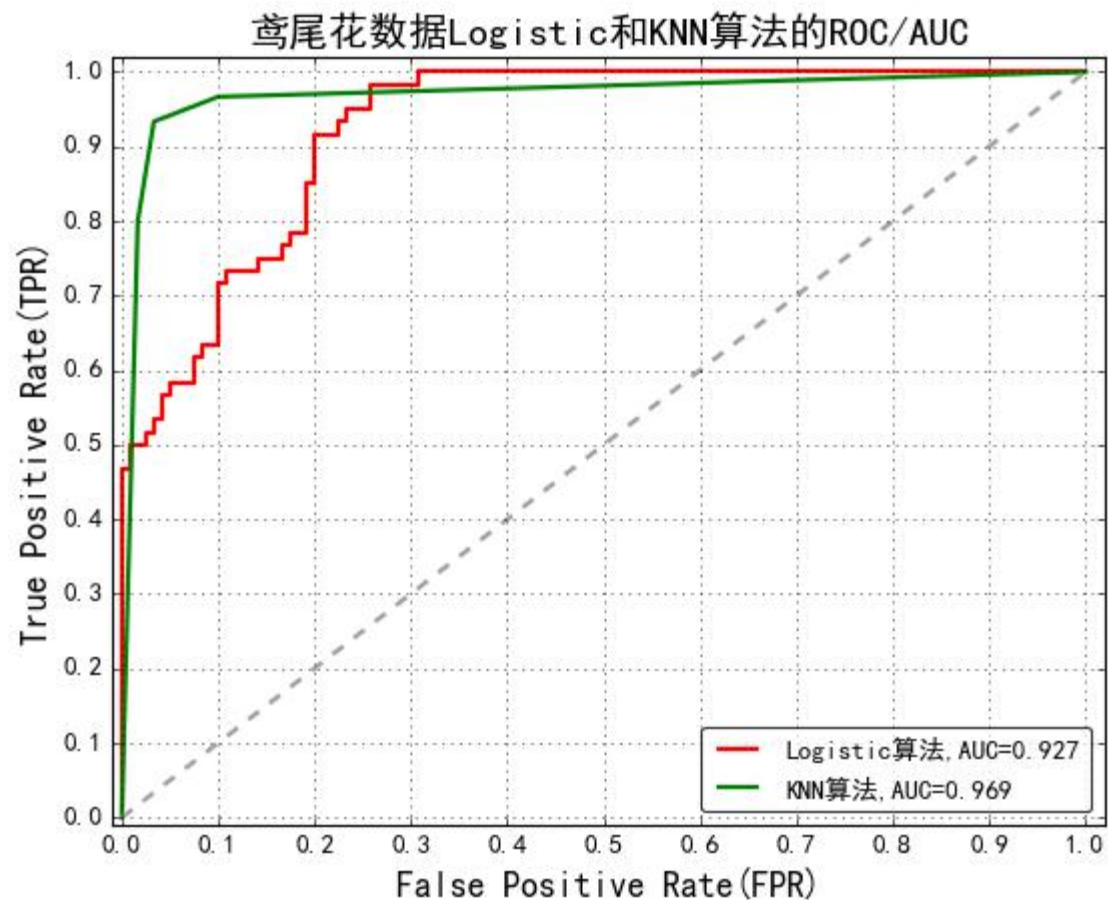
- 基于鸢尾花数据进行分类模型构建, 使用logistics算法和KNN算法进行构建, 并计算两种算法的AOC值, 以及画出对应的ROC曲线
 - 数据来源: <http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Iris>

Data Set Characteristics:	Multivariate	Number of Instances:	150	Area:	Life
Attribute Characteristics:	Real	Number of Attributes:	4	Date Donated	1988-07-01
Associated Tasks:	Classification	Missing Values?	No	Number of Web Hits:	1319181

Attribute Information:

1. sepal length in cm
2. sepal width in cm
3. petal length in cm
4. petal width in cm
5. class:
 - Iris Setosa
 - Iris Versicolour
 - Iris Virginica

分类问题综合案例(二): 鸢尾花数据分类



分类问题综合案例(二): 鸢尾花数据分类

