

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 \mathbf{x} 最近的点的类别作为 \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：

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

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

- 当 $p = 2$ 时，为欧氏距离： $L_2(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = (\sum_{l=1}^n |x_{i,l} - x_{j,l}|^2)^{1/2}$
- 当 $p = 1$ 时，为曼哈顿距离： $L_1(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \sum_{l=1}^n |x_{i,l} - x_{j,l}|$
- 当 $p = \infty$ 时，为各维度距离中的最大值： $L_\infty(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \max_l |x_{i,l} - x_{j,l}|$

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 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \{c_1, c_2, \dots, c_K\}$ 。

给定样本 $\vec{x} \in \mathcal{X}$ ，其最邻近的 k 个训练点构成集合 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 。设涵盖 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 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, \dots, c_K 之一），则损失函数为：

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

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

$$c_m = \arg \max_{c_m} \sum_{\vec{x}_i \in \mathcal{N}_k(\vec{x})} I(\tilde{y}_i = c_m)。$$

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 $\vec{x} \in \mathcal{X}$ ，其最邻近的 k 个训练点构成集合 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 。设涵盖 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 区域的输出为 \hat{y} ，则损失函数为：

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

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

$$\mathbb{D} = \{(\vec{x}_1, \tilde{y}_1), (\vec{x}_2, \tilde{y}_2), \dots, (\vec{x}_N, \tilde{y}_N)\}, \vec{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n, \tilde{y}_i \in \mathcal{Y} = \{c_1, c_2, \dots, c_K\}$$

- 给定样本 \vec{x}

- 输出：样本 \vec{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{x} 最近邻的 k 个点。定义涵盖这 k 个点的 \vec{x} 的邻域记作 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 。

- 从 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 中，根据分类决策规则（如多数表决）决定 \vec{x} 的类别 y ：

$$y = \arg \max_{c_m} \sum_{\vec{x}_i \in \mathcal{N}_k(\vec{x})} I(\tilde{y}_i = c_m)。$$

2. k 近邻法的回归算法：

- 输入：

- 训练数据集 $\mathbb{D} = \{(\vec{x}_1, \tilde{y}_1), (\vec{x}_2, \tilde{y}_2), \dots, (\vec{x}_N, \tilde{y}_N)\}, \vec{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n, \tilde{y}_i \in \mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}$

- 给定样本 \vec{x}

- 输出：样本 \vec{x} 的输出 y

- 步骤：

- 根据给定的距离度量，在 \mathbb{D} 中寻找与 \vec{x} 最近邻的 k 个点。定义涵盖这 k 个点的 \vec{x} 的邻域记作 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 。

- 从 $\mathcal{N}_k(\vec{x})$ 中，根据回归决策规则（如均值回归）决定 \vec{x} 的输出 y ： $y = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in \mathcal{N}_k(\vec{x})} \tilde{y}_i$ 。

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 $\mathbb{D} = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N\}, \vec{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^k$

- 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, $l = j \pmod k + 1$ 。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{x}
- 输出: \vec{x} 的最近邻测试点
- 步骤:
 - 初始化: 当前最近点为 $\vec{x}_{nst} = null$, 当前最近距离为 $distance_{nst} = \infty$ 。
 - 在 kd 树中找到包含测试点 \vec{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{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{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{x}_q 。计算 \vec{x} 到 \vec{x}_q 的距离, 假设为 $distance_q$ 。
若 $distance_q < distance_{nst}$, 则更新最近点与最近距离:

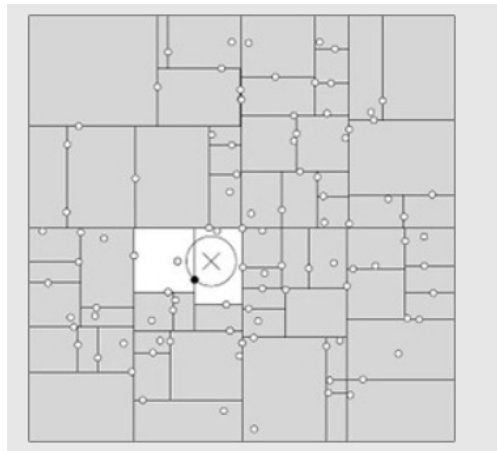
$$distance_{nst} = distance_q, \quad \vec{x}_{nst} = \vec{x}_q$$
 - 如果 \vec{x}_q 为中间节点: 考察以 \vec{x} 为球心、以 $distance_{nst}$ 为半径的超球体是否与 \vec{x}_q 所在的超平面相交。
如果相交:
 - 若 `Queue` 中已经访问过了 \vec{x}_q 的左子树, 则继续二叉搜索 \vec{x}_q 的右子树。
 - 若 `Queue` 中已经访问过了 \vec{x}_q 的右子树, 则继续二叉搜索 \vec{x}_q 的左子树。

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{x}_{nst} 就是 \vec{x} 的最近邻点。

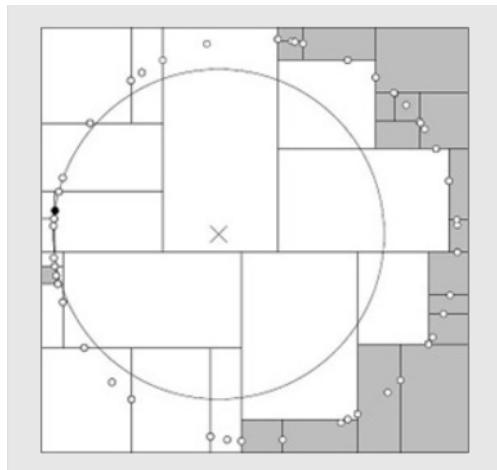
2. kd 树搜索的平均计算复杂度为 $O(\log N)$, N 为训练集大小。

kd 树适合 $N \gg k$ 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：



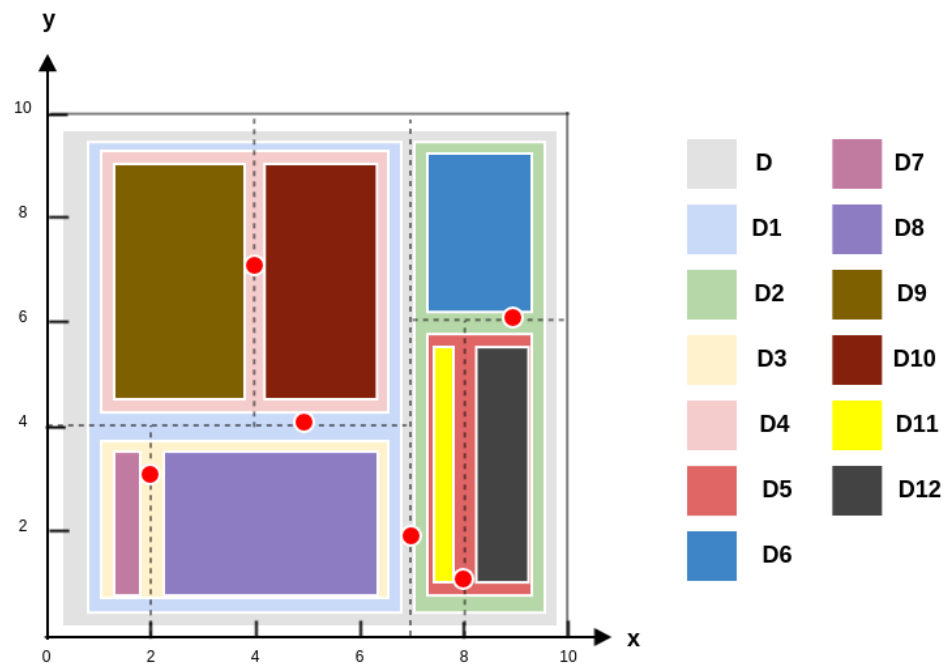
2.3 示例

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

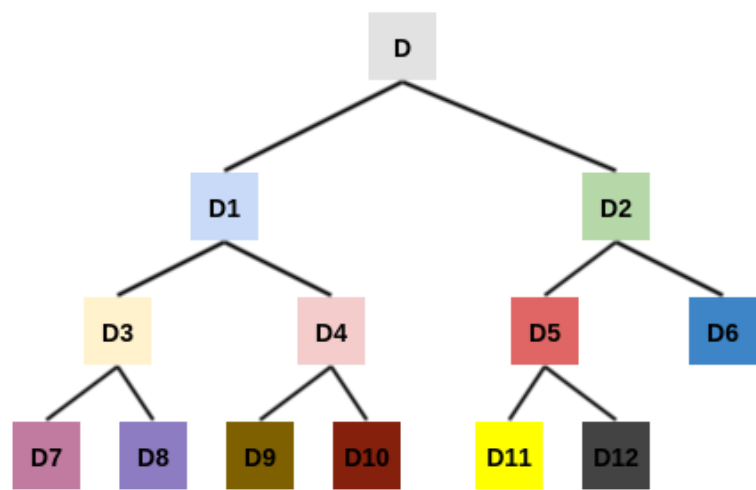
构建 kd 树的过程：

- 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：

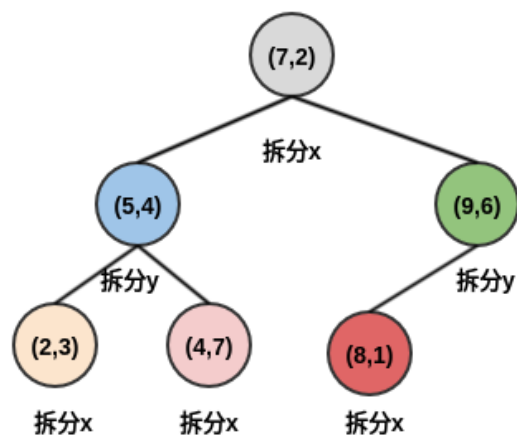


样本空间结构图如下：



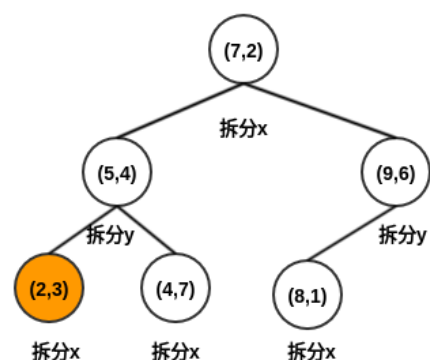
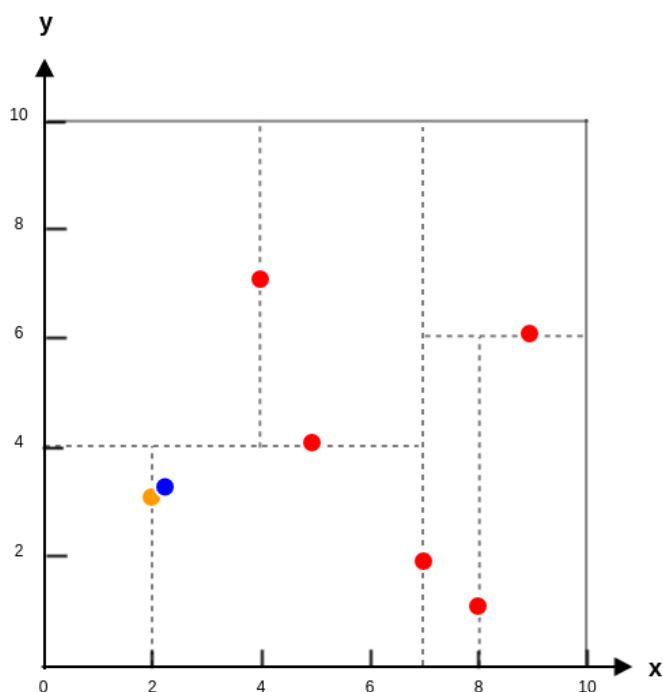
kd 树如下。

- 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= $\langle (7,2), (5,4), (4,7) \rangle$ 。

- 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= $\langle (7,2), (2,3) \rangle$ 。

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。

