K近邻算法(KNN)原理小结

原创 石头 机器学习算法那些事 2018-12-28

目录

1. KNN算法原理

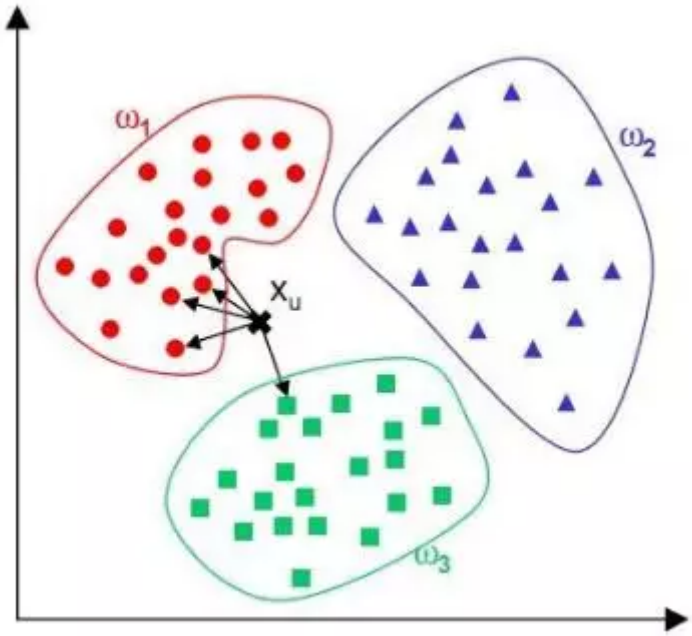
KNN算法是选择与输入样本在特征空间内最近邻的k个训练样本并根据一定的决策规则，给出输出结果 。

决策规则：

分类任务：输出结果为k个训练样本中占大多数的类 。

回归任务：输出结果为k个训练样本值的平均值 。

如下图的分类任务，输出结果为w1类 。



2. KNN算法三要素

K值的选择、距离度量和分类决策规则是K近邻算法的三个基本要素。当三个要素确定后，对于任何一个新的输入实例，它所属的Y值也确定了，本节介绍了三要素的含义。

1. 分类决策规则

KNN算法一般是用多数表决方法，即由输入实例的K个邻近的多数类决定输入实例的类。这种思想也是经验风险最小化的结果。

训练样本为(xi，yi)。当输入实例为 x，标记为c，$N_k(x)$是输入实例x的k近邻训练样本集。

我们定义训练误差率是K近邻训练样本标记与输入标记不一致的比例，误差率表示为：

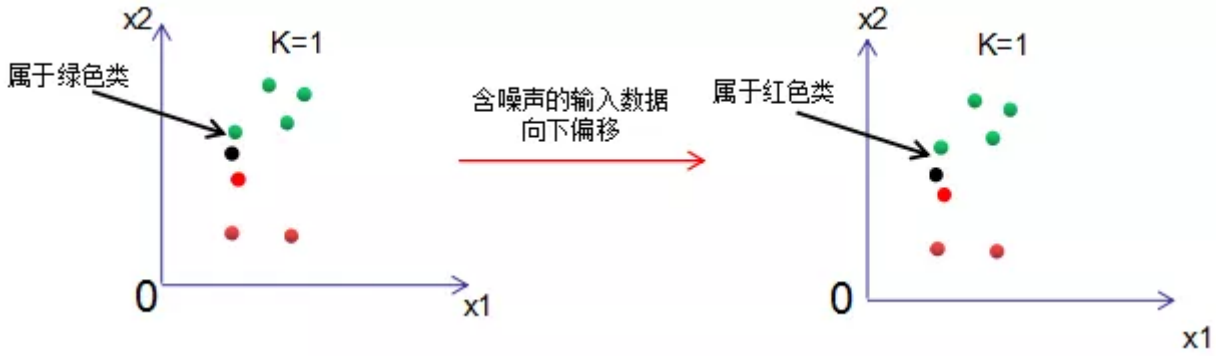
$$\frac{1}{k}\sum_{x_i \in N_k(x)} I(y_i \neq c_j) = 1 - \frac{1}{k}\sum_{x_i \in N_k(x)} I(y_i = c_j) \qquad (2.1)$$

因此，要使误差率最小化即经验风险最小，就要使(2.1)式右端的$\frac{1}{k}\sum_{x_i \in N_k(x)} I(y_i = c_j)$最大，即K近邻的标记值尽可能的与输入标记一致，所以多数表决规则等价于经验风险最小化。

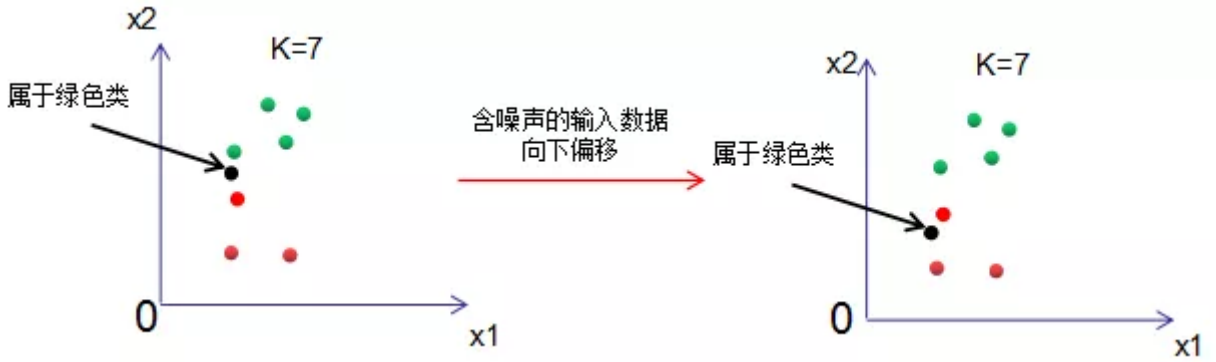
2. K值的选择：

K取值较小时，模型复杂度高，训练误差会减小，泛化能力减弱；K取值较大时，模型复杂度低，训练误差会增大，泛化能力有一定的提高。

KNN模型的复杂度可以通过对噪声的容忍度来理解，若模型对噪声很敏感，则模型的复杂度高；反之，模型的复杂度低。为了更好理解模型复杂度的含义，我们取一个极端，分析K=1和K="样本数"的模型复杂度。



由上图可知，K=1时，模型输出的结果受噪声的影响很大。



由上图可知，样本数等于7，当K=7时，不管输入数据的噪声有多大，输出结果都是绿色类，模型对噪声极不敏感，但是模型太过简单，包含的信息太少，也是不可取的。

通过上面两种极端的K选取结果可知，K值选择应适中，K值一般小于20，建议采用交叉验证的方法选取合适的K值。

3. 距离度量

KNN算法用距离来度量两个样本间的相似度，常用的距离表示方法：

(1)、欧式距离

$$D(x,y)=\sqrt{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+...+(x_n-y_n)^2}$$
$$=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-y_i)^2}$$

(2)、曼哈顿距离

$$D(x,y)=|x_1-y_1|+|x_2-y_2|+...+|x_n-y_n|$$
$$=\sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|$$

(3)、闵可夫斯基距离

$$D(x,y)=\sqrt[p]{|x_1-y_1|^p+|x_2-y_2|^p+...+|x_n-y_n|^p}$$
$$=\sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|^p}$$

可以看出，欧式距离是闵可夫斯基距离在p=2时的特例，而曼哈顿距离是p=1时的特例 。

3. KNN算法之暴力实现方法

暴力搜索（brute-force search）是线性扫描输入实例与每一个训练实例的距离并选择前k个最近邻的样本来多数表决，算法简单，但是当训练集或特征维度很大时，计算非常耗时，故这种暴力实现原理是不可行的 。

4. KNN算法之kd树实现方法

kd树是一种对k维空间中的实例点进行存储以便对其进行快速检索的树形数据结构，构造kd树相当于不断用垂直于坐标轴的超平面将k维空间进行划分，构成一系列的K维超矩形区域，kd树省去了对大部分数据的搜索，大大的较少了计算量。

kd树的KNN算法实现包括三部分：kd树的构建，kd树的搜索和kd树的分类。

1. 构建kd树

kd树实质是二叉树，其划分思想与cart树一致，即切分使样本复杂度降低最多的特征。kd树认为特征方差越大，则该特征的复杂度亦越大，优先对该特征进行切分 ，切分点是所有实例在该特征的中位数。重复该切分步骤，直到切分后无样本则终止切分，终止时的样本为叶节点。

【例】给定一个二维空间的数据集：

$$T=\{(2,3)^T,(5,4)^T,(9,6)^T,(4,7)^T,(8,1)^T,(7,2)^T\}$$

构造kd树的步骤：

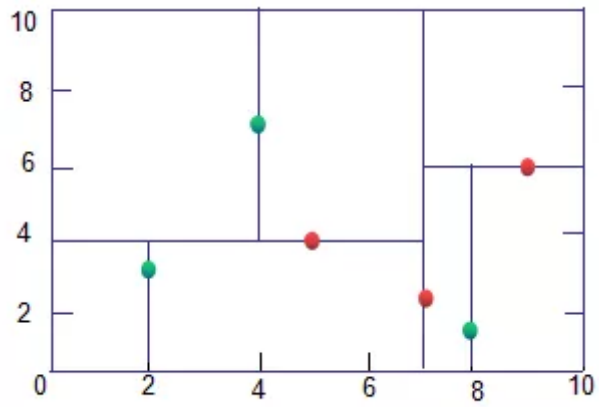
(1)、数据集在维度$x^{(1)}$和$x^{(2)}$的方差分别为6.9和5.3，因此首先从$x^{(1)}$维度进行切分。

(2)、 数据集在$x^{(1)}$维度的中位数是7，以平面$x^{(1)}$=7将空间分为左右两个矩形。

(3)、分别对左右两个矩形的样本在$x^{(2)}$维度的中位数进行切分。

(4)、重复步骤（2）（3），直到无样本，该节点为叶子节点。

如下图，绿色为叶子节点 ，红色为节点和根节点。



特征空间划分

2. KD树搜索

(1)、搜索路径从根节点到叶节点，在KD树里面找到包含目标点的叶子节点。

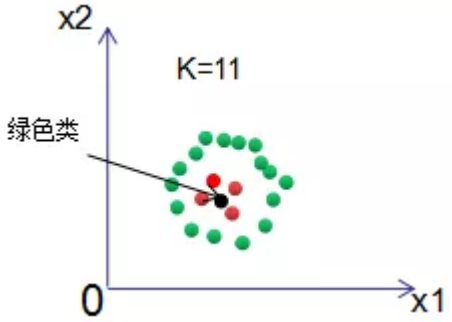
(2)、搜索路径从叶节点到根节点，找到距离目标点最近的样本实例点。过程不再复述，具体方法请参考李航博士《统计学习方法》。

3. KD树预测

每一次搜寻与输入样本最近的样本节点，然后忽略该节点，重复同样步骤K次，找到与输入样本最近邻的K个样本 ，投票法确定输出结果。

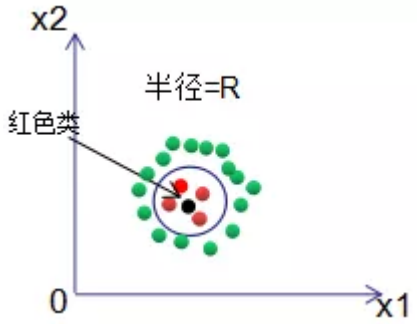
5. KNN算法之训练样本不平衡情况

若正负样本处于不平衡状态，运用投票决策的KNN算法判断输入样本的所属类别：



结果显示输入样本为绿色类 。原因是红色类的个数远远小于绿色样本，导致出现的分类错误 。

（1）若分类决策选择限定半径最近邻法，即以输入样本为圆心，最大半径R的圆内选择出现次数最多的类做为输入样本的类 。如下图，黑色样本的分类结果正确。



（2）投票法是默认每个样本的权重相等，我们假定权重与距离成反比，即距离越大，对结果的影响越小，那么该样本的权重也越小，反之，权重则越大，根据权重对输入样本进行分类 。这种思想与adaBoost算法相似，分类性能好的弱分类器给予一个大的权重 。

分类过程：

(1)、选择与输入样本距离X0最近的K个训练样本Xi（i = 1,2,...,K），d(X0,Xi)表示输入样本和训练样本的距离。

(2)、根据距离与样本成反比的性质将距离转化成权重Wi，Wi表示输入样本X0与训练样本Xi的权重。

(3)、我们累加每一类的样本权重，并认为该权重占所有权重和的比例是该类的生成概率，概率最大的类就是输入样本的分类结果。

假设目标是二分类{C1，C2}，表达式：

$$P_{C_h} = \frac{\sum_{j \in C_h} W_j}{\sum_{i=1}^{K} W_i} \quad ,(h = 1,2)$$

若 $P_{C1} \geq P_{C2}$，则分类结果为C1类，反之C2类。

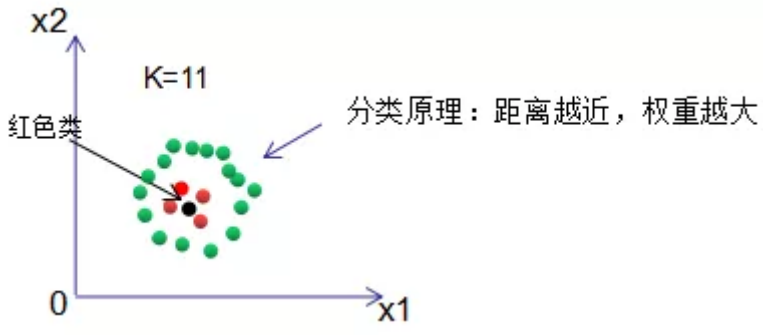
回归过程：

（1）（2）步骤与分类过程一直，第（3）步使用如下表达式得到回归值：

$$y = \frac{\sum_{i=1}^{K} W_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^{K} W_i}$$

其中，y为输出结果，f(xi)为最近邻样本的值。若权重相同的话，则输出结果为K个训练样本的平均值。

用权重思想重新对上例进行分类，可得输入样本为红色类。



6. KNN算法优缺点

优点：

1）算法简单，理论成熟，可用于分类和回归。

2）对异常值不敏感。

3）可用于非线性分类。

4）比较适用于容量较大的训练数据，容量较小的训练数据则很容易出现误分类情况。

5）KNN算法原理是根据邻域的K个样本来确定输出类别，因此对于不同类的样本集有交叉或重叠较多的待分样本集来说，KNN方法较其他方法更为合适。

缺点：

1）时间复杂度和空间复杂度高。

2）训练样本不平衡，对稀有类别的预测准确率低。

3）相比决策树模型，KNN模型可解释性不强。

参考：

https://www.cnblogs.com/pinard/p/6061661.html

推荐阅读

XGBoost算法原理小结

浅谈logistic函数和softmax函数

随机森林算法总结

-END-

长按二维码关注

机器学习算法那些事

微信：beautifulife244

砥砺前行 不忘初心