机器学习算法：KNN 分类算法及应用

课程大纲

KNN 分类算法原理	KNN 概述
	KNN 算法图示
	KNN 算法要点
	KNN 算法不足之处
KNN 分类算法 Python 实战	KNN 简单数据分类实践
	KNN 实现手写数字识别
KNN 算法补充	KNN 算法中 k 值的选取
	类别判定
	如何选择合适的衡量距离
	训练样本/性能问题

课程目标：

1、理解 KNN 算法的核心思想

2、理解 KNN 算法的实现

3、掌握 KNN 算法的应用步骤：数据处理、建模、运算和结果判定

1. kNN 分类算法原理

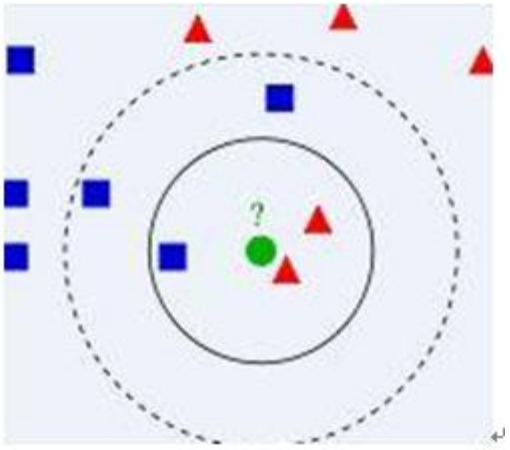
1.1 概述

K 最近邻（k-Nearest Neighbor，KNN）**分类算法**是最简单的机器学习算法。
KNN 算法的指导思想是“近朱者赤，近墨者黑”，由你的邻居来推断出你的类别。

本质上，KNN 算法就是用距离来衡量样本之间的相似度

1.2 算法图示

- 从训练集中找到和新数据最接近的 k 条记录，然后根据多数类来决定新数据类别。
- 算法涉及 3 个主要因素：
  1) 训练数据集
  2) 距离或相似度的计算衡量
  3) k 的大小



- 算法描述
  1) 已知两类“先验”数据，分别是蓝方块和红三角，他们分布在一个二维空间中
  2) 有一个未知类别的数据（绿点），需要判断它是属于“蓝方块”还是“红三角”类
  3) 考察离绿点***最近***的 3 个（或 k 个）数据点的类别，占多数的类别即为绿点判定类别

1.3 算法要点

1.3.1、计算步骤

计算步骤如下：

1）算距离：给定测试对象，计算它与训练集中的每个对象的距离

2）找邻居：圈定距离最近的 k 个训练对象，作为测试对象的近邻

3）做分类：根据这 k 个近邻归属的主要类别，来对测试对象分类

1.3.2、相似度的衡量

- 距离越近应该意味着这两个点属于一个分类的可能性越大。

但，距离不能代表一切，有些数据的相似度衡量并不适合用距离

- 相似度衡量方法：包括欧式距离、夹角余弦等。

（简单应用中，一般使用欧氏距离，但对于文本分类来说，使用余弦(cosine)来计算相似度就比欧式(Euclidean)距离更合适）

1.3.3、类别的判定

- 简单投票法：少数服从多数，近邻中哪个类别的点最多就分为该类。
- 加权投票法：根据距离的远近，对近邻的投票进行加权，距离越近则权重越大（权重为距离平方的倒数）

1.4 算法不足之处

1. 样本不平衡容易导致结果错误

- 如一个类的样本容量很大，而其他类样本容量很小时，有可能导致当输入一个新样本时，该样本的 K 个邻居中大容量类的样本占多数。
- 改善方法：对此可以采用权值的方法（和该样本距离小的邻居权值大）来改进。

2. 计算量较大

- 因为对每一个待分类的文本都要计算它到全体已知样本的距离，才能求得它的 K 个最近邻点。
- 改善方法：事先对已知样本点进行剪辑，事先去除对分类作用不大的样本。

该方法比较适用于样本容量比较大的类域的分类，而那些样本容量较小的类域采用这种算法比较容易产生误分。

2. KNN 分类算法 Python 实战

2.1 kNN 简单数据分类实践

2.1.1 需求

<比如：计算地理位置的相似度>
……

有以下先验数据，使用 knn 算法对未知类别数据分类

属性 1	属性 2	类别
1.0	0.9	A
1.0	1.0	A
0.1	0.2	B
0.0	0.1	B

未知类别数据

属性 1	属性 2	类别
1.2	1.0	?
0.1	0.3	?

2.1.2 Python 实现

首先，我们新建一个 kNN.py 脚本文件，文件里面包含两个函数，一个用来生成小数据集，一个实现 kNN 分类算法。代码如下：

```
##########################################
# kNN: k Nearest Neighbors

# 输入:          newInput:    (1xN)的待分类向量
#                dataSet:     (NxM)的训练数据集
#                labels:      训练数据集的类别标签向量
#                k:           近邻数

# 输出:        可能性最大的分类标签
##########################################

from numpy import *
import operator
```

```
#创建一个数据集，包含 2 个类别共 4 个样本
def createDataSet():
    # 生成一个矩阵，每行表示一个样本
    group = array([[1.0, 0.9], [1.0, 1.0], [0.1, 0.2], [0.0, 0.1]])
    # 4 个样本分别所属的类别
    labels = ['A', 'A', 'B', 'B']
    return group, labels

# KNN 分类算法函数定义
def kNNClassify(newInput, dataSet, labels, k):
    numSamples = dataSet.shape[0]    # shape[0]表示行数

    ## step 1: 计算距离
    # tile(A, reps): 构造一个矩阵，通过 A 重复 reps 次得到
    # the following copy numSamples rows for dataSet
    diff = tile(newInput, (numSamples, 1)) - dataSet    # 按元素求差值
    squaredDiff = diff ** 2    #将差值平方
    squaredDist = sum(squaredDiff, axis = 1)    # 按行累加
    distance = squaredDist ** 0.5    #将差值平方和求开方，即得距离

    ## step 2: 对距离排序
    # argsort() 返回排序后的索引值
    sortedDistIndices = argsort(distance)
    classCount = {} # define a dictionary (can be append element)
    for i in xrange(k):
        ## step 3: 选择 k 个最近邻
        voteLabel = labels[sortedDistIndices[i]]

        ## step 4: 计算 k 个最近邻中各类别出现的次数
        # when the key voteLabel is not in dictionary classCount, get()
        # will return 0
        classCount[voteLabel] = classCount.get(voteLabel, 0) + 1

    ## step 5: 返回出现次数最多的类别标签
    maxCount = 0
    for key, value in classCount.items():
        if value > maxCount:
            maxCount = value
            maxIndex = key

    return maxIndex
```

然后调用算法进行测试：

```
import kNN
from numpy import *
#生成数据集和类别标签
dataSet, labels = kNN.createDataSet()
#定义一个未知类别的数据
testX = array([1.2, 1.0])
k = 3
#调用分类函数对未知数据分类
outputLabel = kNN.kNNClassify(testX, dataSet, labels, 3)
print "Your input is:", testX, "and classified to class: ", outputLabel

testX = array([0.1, 0.3])
outputLabel = kNN.kNNClassify(testX, dataSet, labels, 3)
print "Your input is:", testX, "and classified to class: ", outputLabel
```

这时候会输出

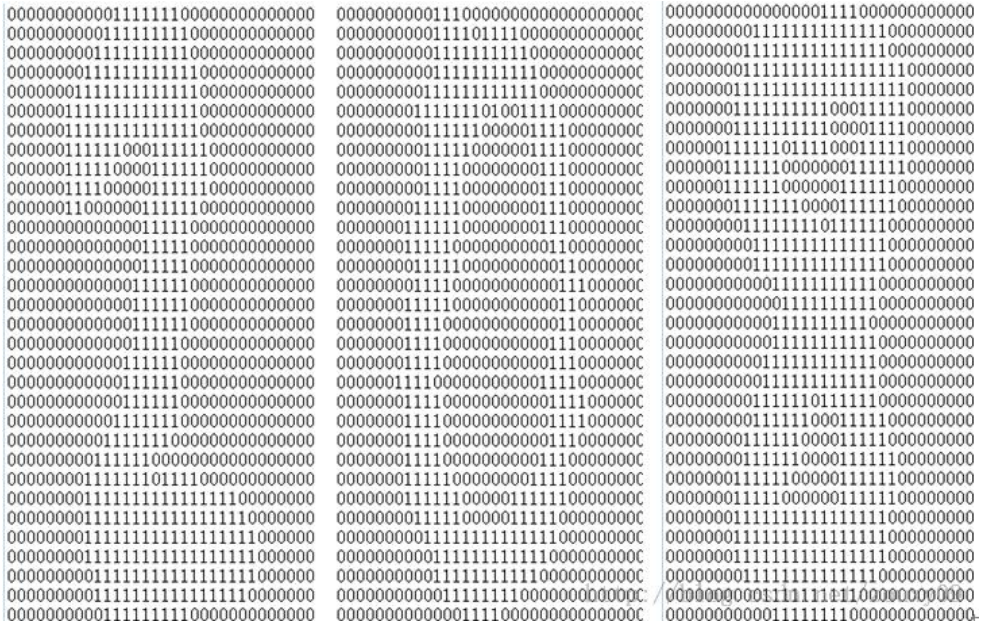
```
Your input is: [ 1.2    1.0] and classified to class:    A
Your input is: [ 0.1    0.3] and classified to class:    B
```

2.2 kNN 实现手写数字识别

2.2.1 需求

利用一个手写数字“先验数据”集，使用 knn 算法来实现对手写数字的自动识别；
先验数据（训练数据）集：

- 数据维度比较大，样本数比较多。
- 数据集包括数字 0-9 的手写体。
- 每个数字大约有 200 个样本。
- 每个样本保持在一个 txt 文件中。
- 手写体图像本身的大小是 32x32 的二值图，转换到 txt 文件保存后，内容也是 32x32 个数字，0 或者 1，如下：



数据集压缩包解压后有两个目录：

- 目录 trainingDigits 存放的是大约 2000 个训练数据
- 目录 testDigits 存放大约 900 个测试数据。

2.2.2 模型分析

本案例看起来跟前一个案例几乎风马牛不相及，但是一样可以用 KNN 算法来实现。没错，这就是机器学习的魅力，不过，也是机器学习的难点：**模型抽象能力！**

思考：
1、手写体因为每个人，甚至每次写的字都不会完全精确一致，所以，识别手写体的关键是“相似度”
2、既然是要求样本之间的相似度，那么，首先需要将样本进行抽象，将每个样本变成一系列特征数据（即特征向量）

3、手写体在直观上就是一个个的图片，而图片是由上述图示中的像素点来描述的，样本的相似度其实就是像素的位置和颜色之间的组合的相似度
4、因此，将图片的像素按照固定顺序读取到一个个的向量中，即可很好地表示手写体样本
5、抽象出了样本向量，及相似度计算模型，即可应用 KNN 来实现

2.2.3 python 实现

新建一个 kNN.py 脚本文件，文件里面包含四个函数：

1) 一个用来生成将每个样本的 txt 文件转换为对应的一个向量，
2) 一个用来加载整个数据集，
3) 一个实现 kNN 分类算法。
4) 最后就是实现加载、测试的函数。

```
##############################################
# kNN: k Nearest Neighbors

#  参数:              inX: vector to compare to existing dataset (1xN)
#                     dataSet: size m data set of known vectors (NxM)
#                     labels: data set labels (1xM vector)
#                     k: number of neighbors to use for comparison

#  输出:        多数类
##############################################

from numpy import *
import operator
import os


# KNN 分类核心方法
def kNNClassify(newInput, dataSet, labels, k):
    numSamples = dataSet.shape[0]    # shape[0]代表行数

    ## step 1: 计算欧式距离
    # tile(A, reps): 将 A 重复 reps 次来构造一个矩阵
    # the following copy numSamples rows for dataSet
    diff = tile(newInput, (numSamples, 1)) - dataSet    # Subtract element-wise
    squaredDiff = diff ** 2 # squared for the subtract
    squaredDist = sum(squaredDiff, axis = 1)    # sum is performed by row
    distance = squaredDist ** 0.5

    ## step 2: 对距离排序
    # argsort()返回排序后的索引
    sortedDistIndices = argsort(distance)
```

```
    classCount = {}    # 定义一个空的字典
    for i in xrange(k):
        ## step 3: 选择 k 个最小距离
        voteLabel = labels[sortedDistIndices[i]]

        ## step 4: 计算类别的出现次数
        # when the key voteLabel is not in dictionary classCount, get()
        # will return 0
        classCount[voteLabel] = classCount.get(voteLabel, 0) + 1

    ## step 5: 返回出现次数最多的类别作为分类结果
    maxCount = 0
    for key, value in classCount.items():
        if value > maxCount:
            maxCount = value
            maxIndex = key

    return maxIndex

# 将图片转换为向量
def   img2vector(filename):
    rows = 32
    cols = 32
    imgVector = zeros((1, rows * cols))
    fileIn = open(filename)
    for row in xrange(rows):
        lineStr = fileIn.readline()
        for col in xrange(cols):
            imgVector[0, row * 32 + col] = int(lineStr[col])

    return imgVector

# 加载数据集
def loadDataSet():
    ## step 1: 读取训练数据集
    print "---Getting training set..."
    dataSetDir = 'E:/Python/ml/knn/'
    trainingFileList = os.listdir(dataSetDir + 'trainingDigits')    # 加载测试数据
    numSamples = len(trainingFileList)

    train_x = zeros((numSamples, 1024))
    train_y = []
    for i in xrange(numSamples):
```

```
        filename = trainingFileList[i]

        # get train_x
        train_x[i, :] = img2vector(dataSetDir + 'trainingDigits/%s' % filename)

        # get label from file name such as "1_18.txt"
        label = int(filename.split('_')[0]) # return 1
        train_y.append(label)

    ## step 2:读取测试数据集
    print "---Getting testing set..."
    testingFileList = os.listdir(dataSetDir + 'testDigits') # load the testing set
    numSamples = len(testingFileList)
    test_x = zeros((numSamples, 1024))
    test_y = []
    for i in xrange(numSamples):
        filename = testingFileList[i]

        # get train_x
        test_x[i, :] = img2vector(dataSetDir + 'testDigits/%s' % filename)

        # get label from file name such as "1_18.txt"
        label = int(filename.split('_')[0]) # return 1
        test_y.append(label)

    return train_x, train_y, test_x, test_y

# 手写识别主流程
def testHandWritingClass():
    ## step 1: 加载数据
    print "step 1: load data..."
    train_x, train_y, test_x, test_y = loadDataSet()

    ## step 2: 模型训练.
    print "step 2: training..."
    pass

    ## step 3: 测试
    print "step 3: testing..."
    numTestSamples = test_x.shape[0]
    matchCount = 0
    for i in xrange(numTestSamples):
        predict = kNNClassify(test_x[i], train_x, train_y, 3)
        if predict == test_y[i]:
```

```
                matchCount += 1
        accuracy = float(matchCount) / numTestSamples

        ## step 4: 输出结果
        print "step 4: show the result..."
        print 'The classify accuracy is: %.2f%%' % (accuracy * 100)
```

测试非常简单，只需要在命令行中输入：

```
import kNN
kNN.testHandWritingClass()
```

输出结果如下：

```
step 1: load data...
---Getting training set...
---Getting testing set...
step 2: training...
step 3: testing...
step 4: show the result...
The classify accuracy is: 98.84%
```

3、KNN 算法补充

3.1、k 值设定为多大？

k 太小，分类结果易受噪声点影响；k 太大，近邻中又可能包含太多的其它类别的点。
（对距离加权，可以降低 k 值设定的影响）
k 值通常是采用交叉检验来确定（以 k=1 为基准）
经验规则：k 一般低于训练样本数的平方根

3.2、类别如何判定最合适？

投票法没有考虑近邻的距离的远近，距离更近的近邻也许更应该决定最终的分类，所以加权投票法更恰当一些。而具体如何加权，需要根据具体的业务和数据特性来探索

3.3、如何选择合适的距离衡量？

高维度对距离衡量的影响：众所周知当变量数越多，欧式距离的区分能力就越差。
变量值域对距离的影响：值域越大的变量常常会在距离计算中占据主导作用，因此应先对变量进行标准化。

3.4、训练样本是否要一视同仁？

在训练集中，有些样本可能是更值得依赖的。
也可以说是样本数据质量的问题
可以给不同的样本施加不同的权重，加强依赖样本的权重，降低不可信赖样本的影响。

3.5、性能问题？

kNN 是一种懒惰算法，平时不好好学习，考试（对测试样本分类）时才临阵磨枪（临时去找 k 个近邻）。
懒惰的后果：构造模型很简单，但在对测试样本分类地的系统开销大，因为要扫描全部训练样本并计算距离。
已经有一些方法提高计算的效率，例如压缩训练样本量等。