4 Naive Bayes Classifier 朴素贝叶斯分类

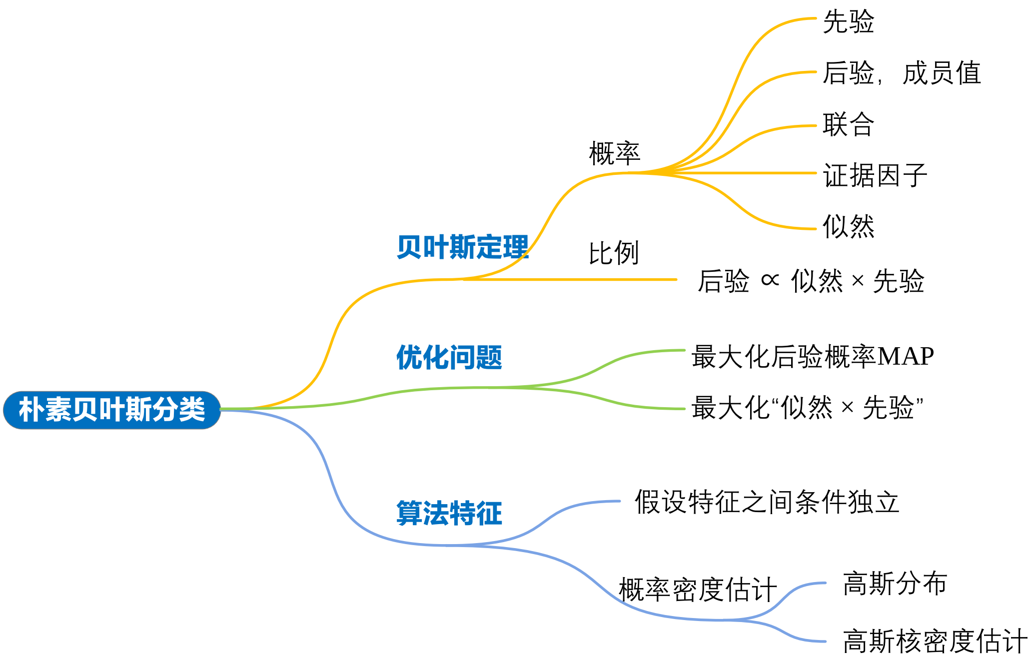
假设特征之间条件独立，最大化后验概率

大家使用朴素贝叶斯分类器时，假设特征 (条件) 独立。之所以称之“朴素”，是因为那真是个“天真”的假设。

A learner that uses Bayes' theorem and assumes the effects are independent given the cause is called a Naïve Bayes classifier. That's because, well, that's such a naïve assumption.

—— 佩德罗·多明戈斯 (Pedro Domingos) | 《终极算法》作者，华盛顿大学教授 | 1965 ~

- ◄ `matplotlib.axes.Axes.contour()` 绘制平面和空间等高线图
- ◄ `matplotlib.Axes3D.plot_wireframe()` 绘制三维单色网格图
- ◄ `matplotlib.pyplot.bar()` 绘制直方图
- ◄ `seaborn.barplot()` 绘制直方图
- ◄ `seaborn.displot()` 绘制一元和二元条件边际分布
- ◄ `seaborn.jointplot()` 同时绘制分类数据散点图、分布图和边际分布图


朴素贝叶斯分类
贝叶斯定理
概率
先验
后验，成员值
联合
证据因子
似然
比例
后验 ∝ 似然 × 先验
优化问题
最大化后验概率MAP
最大化“似然 × 先验”
算法特征
假设特征之间条件独立
概率密度估计
高斯分布
高斯核密度估计

4.1 重逢贝叶斯

贝叶斯是我们的老朋友，《统计至简》薄频率派，厚贝叶斯派，这本书用了很大篇幅介绍了**贝叶斯定理** (Bayes' theorem) 和应用。《统计至简》第 18、19 章介绍贝叶斯分类的理论基础，第 20、21、22 章介绍贝叶斯统计推断。

本章和下一章，贝叶斯定理将专门用来解决数据分类问题。这种分类方法叫做**朴素贝叶斯分类** (Naive Bayes classification)。简单来说，朴素贝叶斯分类是一种基于贝叶斯定理和特征条件独立假设的分类方法，其原理是利用已知分类标记的训练数据，计算每个类别的条件概率分布，并根据贝叶斯定理计算未知样本属于每个类别的后验概率，最终将样本分配给具有最高概率的类别。其优点包括算法简单、计算高效、在处理大规模数据时表现良好，适用于多分类问题和高维数据；缺点是对特征的条件独立性要求较高，可能导致分类准确度下降，同时对于连续型变量的处理也存在一定困难。

本章和下一章共用一个思维导图。

托马斯·贝叶斯 (Thomas Bayes) | 英国数学家 | 1702 ~ 1761
贝叶斯统计的开山鼻祖，以贝叶斯定理闻名于世。关键词：• 贝叶斯定理 • 朴素贝叶斯分类 • 贝叶斯回归 • 贝叶斯派

分类原理

朴素贝叶斯分类核心思想是比较后验概率大小。

比如，对于二分类问题 ($K = 2$)，就是比较某点 $\boldsymbol{x}$ 处，后验概率 (posterior) $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_2 | \boldsymbol{x})$ 的大小。

后验概率 $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_2 | \boldsymbol{x})$ 本质上是条件概率 (conditional probability)。白话说，$f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x})$ 代表“给定 $\boldsymbol{x}$ 被分类为 C_1 的概率”，$f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x})$ 代表“给定 $\boldsymbol{x}$ 被分类为 C_2 的概率”。

如果 $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x}) > f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_2 | \boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}$ 被预测分类为 C_1；反之，$f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x}) < f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_2 | \boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}$ 就被预测分类为 C_2。倘若 $f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_1 | \boldsymbol{x}) = f_{Y|\boldsymbol{x}}(C_2 | \boldsymbol{x})$，该点便在决策边界 (decision boundary) 上。

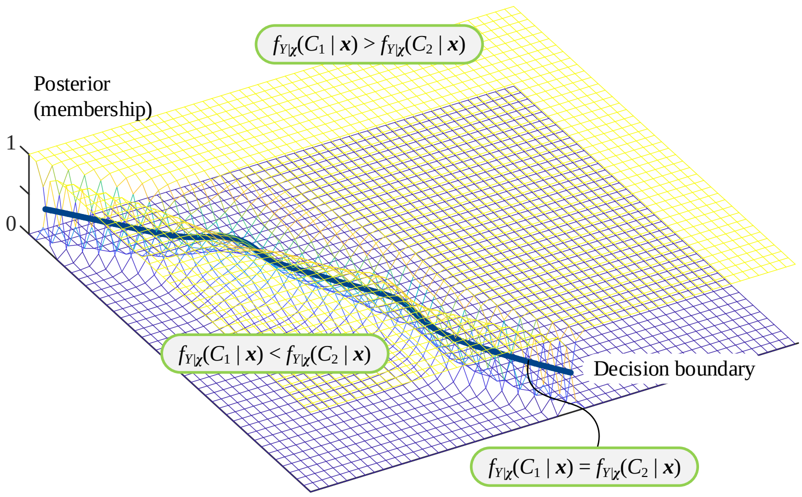


图 1. 二分类，比较后验概率大小，基于 KDE

比较图 1 所示 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 两个曲面。大家肯定已经发现，$f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 的取值在 [0, 1] 之间。实际上，$f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 并不是概率密度，它们本身就是概率。《统计至简》一册几次强调过这一点。

根据 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 两个曲面高度值，即概率值，我们可以确定决策边界 (图 1 中深蓝色实线)。

此外，对于二分类问题，$f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 之和为 1，下面简单证明一下。

全概率定理、贝叶斯定理

对于二分类问题，根据全概率定理 (law of total probability) 和贝叶斯定理 (Bayes' theorem)，$f_\chi(\boldsymbol{x})$ 可以通过下式计算得到：

$$\begin{aligned} f_\chi(\boldsymbol{x}) &= f_{\chi,Y}(\boldsymbol{x}, C_1) + f_{\chi,Y}(\boldsymbol{x}, C_2) \\ &= f_{Y|\chi}(C_1 | \boldsymbol{x}) f_\chi(\boldsymbol{x}) + f_{Y|\chi}(C_2 | \boldsymbol{x}) f_\chi(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{1}$$

$f_\chi(\boldsymbol{x})$ 不为 0 时，(1) 左右消去 $f_\chi(\boldsymbol{x})$，得到：

$$1 = f_{Y|\chi}(C_1 | \boldsymbol{x}) + f_{Y|\chi}(C_2 | \boldsymbol{x}) \tag{2}$$

白话解释，对于二分类问题，某点 $\boldsymbol{x}$ 要么属于 C_1，要么属于 C_2。

成员值：比较大小

后验概率值 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 取值在 [0, 1] 之间，且满足 (2)；因此，后验概率也常被称作成员值 (membership score)。

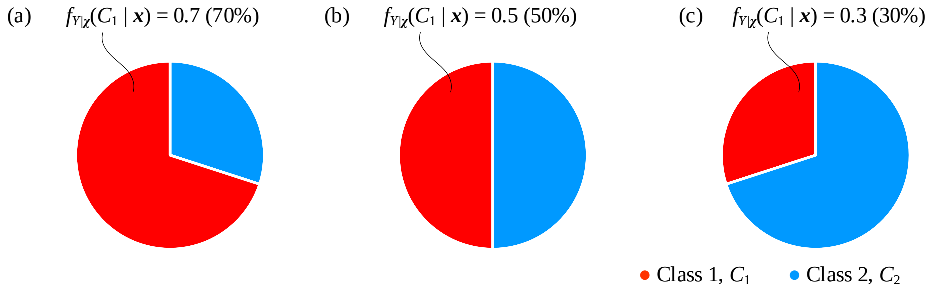


图 2. 二分类成员值

如图 2 (a) 所示，$f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x}) = 0.7$ (70%)，也就是说 $\boldsymbol{x}$ 属于 C_1 的可能性为 70%，即成员值为 0.7。这种情况，$\boldsymbol{x}$ 预测分类为 C_1。

$f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x}) = 0.5$ (50%) 时，对于二分类问题，$\boldsymbol{x}$ 应该位于决策边界上，相当于“骑墙派”，如图 2 (b) 所示。

若 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x}) = 0.3$ (30%)，$\boldsymbol{x}$ 属于 C_1 成员值为 0.3。显然，$\boldsymbol{x}$ 应该被预测分类为 C_2,，如图 2 (c) 所示。

仅对于二分类问题，如果 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x}) > 0.5$，可以预测 $\boldsymbol{x}$ 分类为 C_1。

联合概率：比较大小

根据贝叶斯定理，对于二分类问题，证据因子 $f_\chi(\boldsymbol{x})$ 不为 0 时，后验概率 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 为：

$$
\begin{cases}
\underbrace{f_{Y|\chi}\left(C_1 \mid \boldsymbol{x}\right)}_{\text{Posterior}} = \dfrac{\overbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_1\right)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{f_\chi\left(\boldsymbol{x}\right)}_{\text{Evidence}}} \\
\underbrace{f_{Y|\chi}\left(C_2 \mid \boldsymbol{x}\right)}_{\text{Posterior}} = \dfrac{\overbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_2\right)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{f_\chi\left(\boldsymbol{x}\right)}_{\text{Evidence}}}
\end{cases}
\tag{3}
$$

观察 (3)，发现分母上均为证据因子 $f_\chi(\boldsymbol{x})$。这说明，后验概率 $f_{Y|\chi}(C_1 \mid \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y|\chi}(C_2 \mid \boldsymbol{x})$ 正比于联合概率 (joint probability, joint) $f_{Y,\chi}(C_1, \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y,\chi}(C_2, \boldsymbol{x})$，即：

$$
\begin{cases}
\underbrace{f_{Y|\chi}\left(C_1 \mid \boldsymbol{x}\right)}_{\text{Posterior}} \propto \underbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_1\right)}_{\text{Joint}} \\
\underbrace{f_{Y|\chi}\left(C_2 \mid \boldsymbol{x}\right)}_{\text{Posterior}} \propto \underbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_2\right)}_{\text{Joint}}
\end{cases}
\tag{4}
$$

对于二分类问题，比较联合概率 $f_{Y,\chi}(C_1, \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y,\chi}(C_2, \boldsymbol{x})$ 大小，便可以预测分类！

图 3 给出的是某个二分类问题中，联合概率 $f_{Y,\chi}(C_1, \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y,\chi}(C_2, \boldsymbol{x})$ 两个曲面。通过比较 $f_{Y,\chi}(C_1, \boldsymbol{x})$ 和 $f_{Y,\chi}(C_2, \boldsymbol{x})$ 两个曲面高度，我们可以得出和图 1 一样的分类结论。

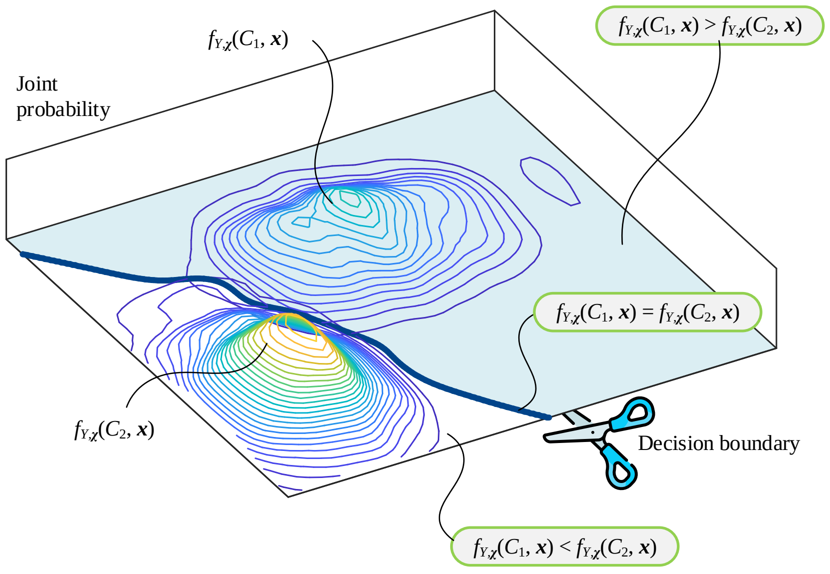


图 3. 二分类，比较联合概率大小，基于 KDE

推广：从二分类到多分类

根据前文分析，我们可以总结得到朴素贝叶斯分类优化问题——最大化后验概率：

$$\hat{y} = \underset{C_k}{\arg\max}\ f_{Y|\chi}\left(C_k \,|\, \boldsymbol{x}\right) \tag{5}$$

其中，$k = 1,2,\ldots K$。

证据因子 $f_\chi(\boldsymbol{x})$ 不为 0 时，后验概率正比于联合概率，即：

$$\underbrace{f_{Y|\chi}\left(C_k \,|\, \boldsymbol{x}\right)}_{\text{Posterior}} \propto \underbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_k\right)}_{\text{Joint}} \tag{6}$$

因此，(5) 等价于：

$$\hat{y} = \underset{C_k}{\arg\max}\ f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x}, C_k\right) \tag{7}$$

由于后验 ∝ 似然 × 先验，最大化后验概率等价于最大化“似然 × 先验”。

至此，我们解决了朴素贝叶斯分类的“贝叶斯”部分，下一节讨论何谓“朴素”。

阅读这一节感到吃力的话，请大家回顾《统计至简》第 18、19 章内容。

4.2 朴素贝叶斯的“朴素”之处

朴素贝叶斯分类，何以谓之“朴素”？

本章副标题已经给出答案——假设特征之间条件独立 (conditional independence)！

独立指两个事件 A、B 之间没有任何关联，即 A 的发生与 B 的发生互不影响，可以表示为 $\Pr(A \cap B) = \Pr(A) \times \Pr(B)$。条件独立指在已知某些条件下，两个事件 A、B 之间没有任何关联，比如给定条件 C 下，A 的发生与 B 的发生互不影响，可以表示为 $\Pr(A \cap B \mid C) = \Pr(A \mid C) \times \Pr(B \mid C)$。

特征独立

对于 x_1 和 x_2 两特征情况，“特征独立”指的是：

$$f_{\chi}(\boldsymbol{x}) = f_{X1,X2}(x_1, x_2) = f_{X1}(x_1) f_{X2}(x_2) \tag{8}$$

$f_{X1}(x_1)$ 和 $f_{X2}(x_2)$ 为两个特征上的边际概率密度函数，如图 4 所示。

推广到 D 个特征情况，“特征独立”指的是：

$$f_{\chi}(\boldsymbol{x}) = f_{X1}(x_1) f_{X2}(x_2) \dots f_{X_D}(x_D) = \prod_{j=1}^{D} f_{X_j}(x_j) \tag{9}$$

图 4 中等高线为“特征独立”条件下，证据因子 $f_{\chi}(\boldsymbol{x})$ 概率密度分布。不知道大家看到这幅图时，是否想到《矩阵力量》中讲过的向量张量积。

$f_{X1}(x_1)$ 和 $f_{X2}(x_2)$ 描述 X_1 和 X_2 两特征的分布还比较准确。但是，假设特征独立，用 (8) 估算证据因子概率密度 $f_{\chi}(\boldsymbol{x})$ 时，偏差很大。比较图 4 等高线和散点分布就可以看出来。

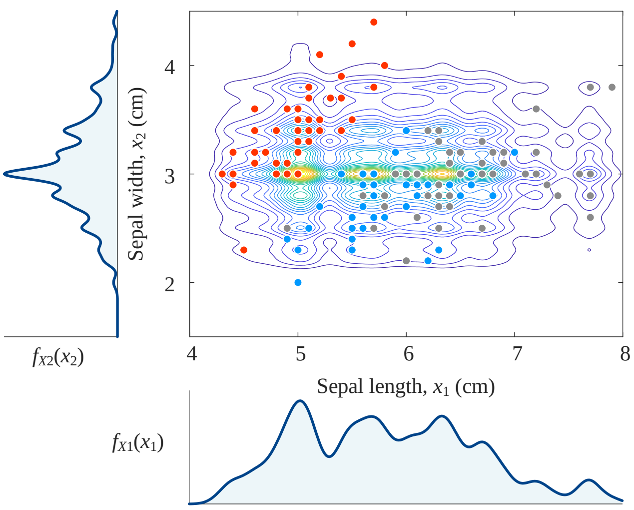


图 4. “特征独立”条件下，证据因子 $f_{\chi}(\boldsymbol{x})$ 概率密度，基于 KDE

特征条件独立

对于两特征 ($D = 2$)、两分类 ($K = 2$) 情况，“特征条件独立”指的是：

$$\begin{cases} \underbrace{f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2 \middle| C_1\right)}_{\text{Likelihood}} = \underbrace{f_{X1|Y}\left(x_1 \middle| C_1\right) f_{X2|Y}\left(x_2 \middle| C_1\right)}_{\text{Conditional independence}} \\ \underbrace{f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2 \middle| C_2\right)}_{\text{Likelihood}} = \underbrace{f_{X1|Y}\left(x_1 \middle| C_2\right) f_{X2|Y}\left(x_2 \middle| C_2\right)}_{\text{Conditional independence}} \end{cases} \tag{10}$$

推广到 D 个特征情况，“特征条件独立”假设下，似然概率为：

$$\underbrace{f_{\chi|Y}\left(\boldsymbol{x} \middle| C_k\right)}_{\text{Likelihood}} = f_{X1|Y}\left(x_1 \middle| C_k\right) f_{X2|Y}\left(x_2 \middle| C_k\right) \dots f_{X_D|Y}\left(x_D \middle| C_k\right) = \prod_{j=1}^{D} f_{X_j|Y}\left(x_j \middle| C_k\right) \tag{11}$$

⚠ 请大家格外注意，A 和 B 相互独立，无法推导得到 A 和 B 条件独立。而 A 和 B 条件独立，也无法推导得到 A 和 B 相互独立。《统计至简》第 3 章专门介绍过条件独立。

特征条件独立 → 联合概率

根据贝叶斯定理，联合概率为：

$$\underbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x},C_k\right)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_Y\left(C_k\right)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{\chi|Y}\left(\boldsymbol{x} \middle| C_k\right)}_{\text{Likelihood}} \tag{12}$$

⚠ 注意，先验概率 $p_Y(C_k)$ 为概率质量函数 (probability mass function, PMF)。这是因为 Y 是离散随机变量，Y 的取值为分类标签 C_1、C_2 … C_K，并非连续。

将 (11) 代入 (12)，可以得到“特征条件独立”条件下，联合概率为：

$$\underbrace{f_{\chi,Y}\left(\boldsymbol{x},C_k\right)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_Y\left(C_k\right)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{\chi|Y}\left(\boldsymbol{x} \middle| C_k\right)}_{\text{Likelihood}} = \underbrace{p_Y\left(C_k\right)}_{\text{Prior}} \underbrace{\prod_{j=1}^{D} f_{X_j|Y}\left(x_j \middle| C_k\right)}_{\text{Conditional independence}} \tag{13}$$

“朴素”贝叶斯优化问题

有了本节分析，基于 (13)，(7) 所示朴素贝叶斯优化问题可以写成：

$$\hat{y} = \underset{C_k}{\arg\max}\; p_Y\left(C_k\right) \prod_{j=1}^{D} f_{X_j|Y}\left(x_j \middle| C_k\right) \tag{14}$$

这样，我们便解决了“朴素贝叶斯”中的“朴素”部分！

朴素贝叶斯分类流程

图 5 所示为朴素贝叶斯分类流程图，图中散点数据为鸢尾花前两个特征——花萼长度、花萼宽度。

图 5 中概率密度基于核密度估计 (Kernel Density Estimation, KDE)。《统计至简》第 17 章介绍过 KDE 方法。

请大家现在快速浏览这幅图，完成本章学习之后，再回过头来再仔细观察图 5 细节。

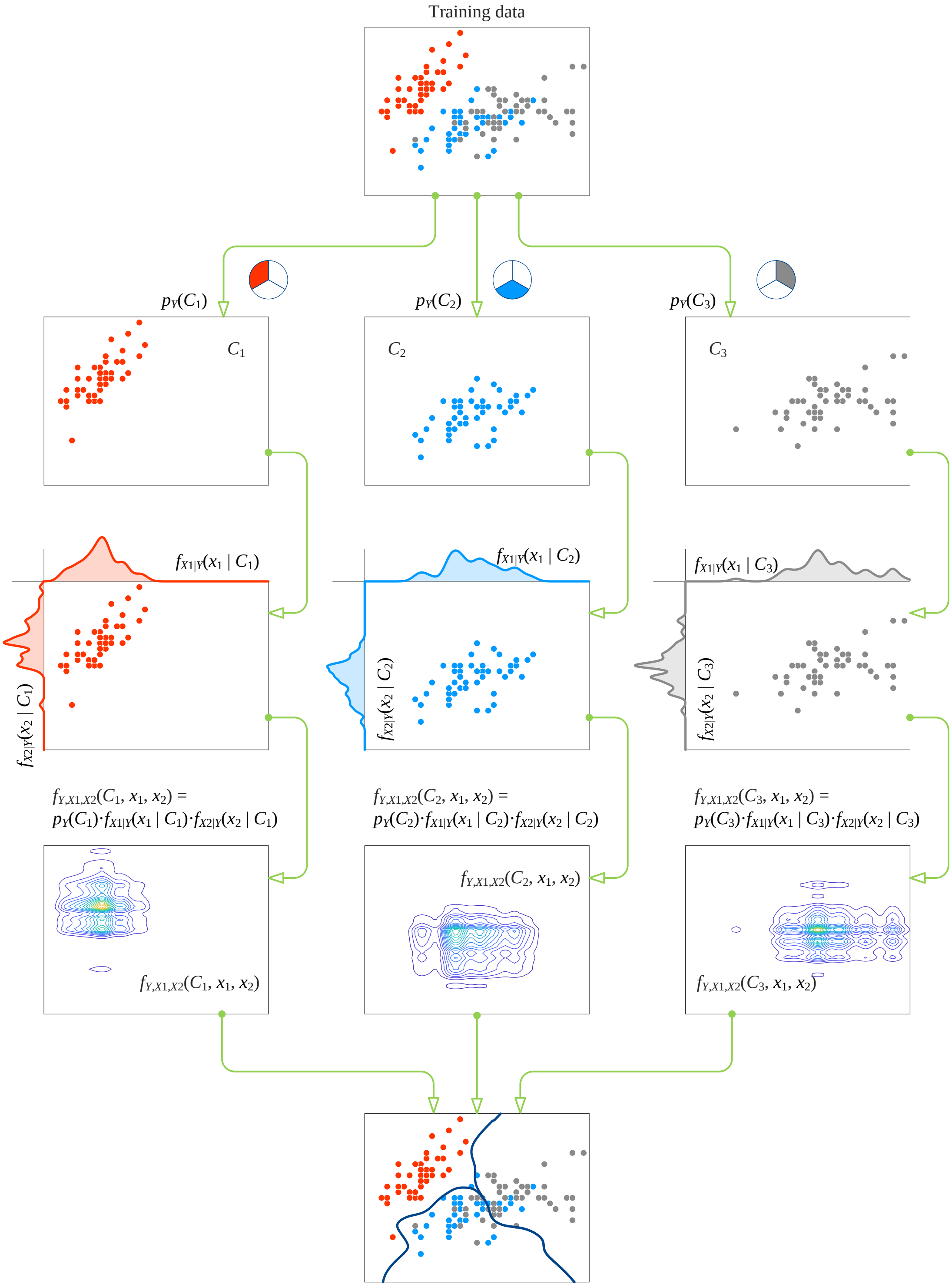


图 5. 朴素贝叶斯分类过程，基于 KDE

4.3 先验概率

先验概率计算最为简单。鸢尾花数据 C_1、C_2 和 C_3 三类对应的先验概率为：

$$p_Y(C_1) = \frac{\text{count}(C_1)}{\text{count}(\Omega)}, \quad p_Y(C_2) = \frac{\text{count}(C_2)}{\text{count}(\Omega)}, \quad p_Y(C_3) = \frac{\text{count}(C_3)}{\text{count}(\Omega)}, \tag{15}$$

鸢尾花数据共有 150 个数据点，count(Ω) = 150；而 C_1、C_2 和 C_3 三类各占 50，因此，

$$p_Y(C_1) = p_Y(C_2) = p_Y(C_3) = \frac{50}{150} = \frac{1}{3} \tag{16}$$

图 6 所示为鸢尾花数据先验概率结果。

⚠ 注意，一般情况各类数据先验概率并不相等。

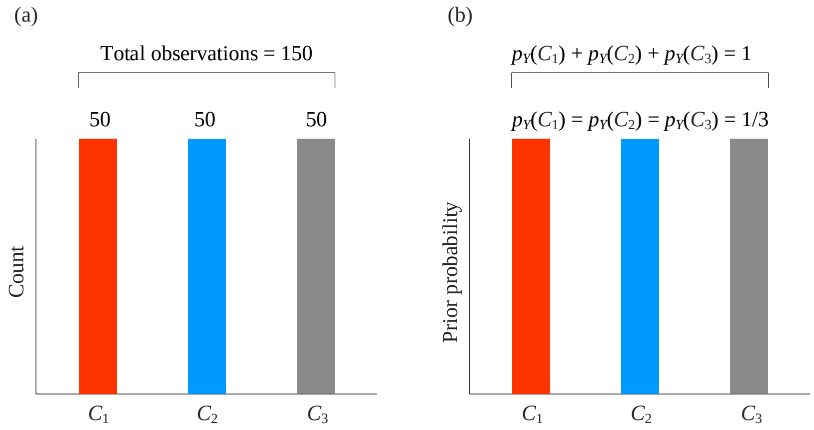


图 6. 鸢尾花数据先验概率

4.4 似然概率

根据前三节所述，朴素贝叶斯分类算法核心在于三方面：(1) 贝叶斯定理建立似然概率、先验概率和后验概率三者联系；(2) 估算似然概率时，假设特征之间条件独立；(3) 优化目标为，最大化后验概率，或最大化联合概率 (似然 × 先验)。

根据 (13)，想要获得联合概率，就先需要利用“特征条件独立”计算得到似然概率。

下面，我们利用花萼长度 (x_1) 和花萼宽度 (x_2) 两个特征 ($D = 2$)，解决鸢尾花三分类 ($K = 3$, C_1、C_2 和 C_3) 问题。本节先讨论如何获得 C_1、C_2 和 C_3 似然概率密度。

C_1 的似然概率

图 7 所示为求解似然概率密度 $f_{\chi|Y}(\boldsymbol{x} \mid C_1)$ 的过程。只考虑 setosa (C_1, $y = 0$) 样本数据点 ●，分别估算两个特征的条件边际分布 $f_{X1|Y}(x_1 \mid C_1)$ 和 $f_{X2|Y}(x_2 \mid C_1)$。

需要特别注意的是，图 7 中，$f_{X1|Y}(x_1 \mid C_1)$ 和 $f_{X2|Y}(x_2 \mid C_1)$ 曲线覆盖阴影区域面积均为 1。

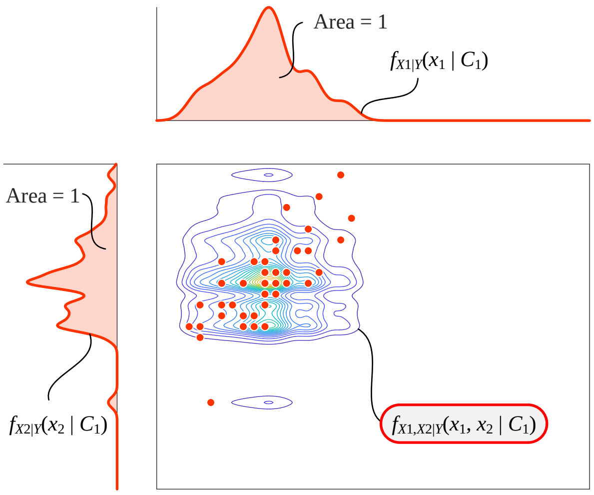


图 7. 分类 C_1 样本数据，鸢尾花花萼长度 x_1 和花萼宽度 x_2 条件独立，得到似然概率密度 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$

根据 (11)，似然概率 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 可以通过下式计算得到：

$$f_{\chi|Y}\left(\boldsymbol{x}|C_1\right) = f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2|C_1\right) = f_{X1|Y}\left(x_1|C_1\right)\cdot f_{X2|Y}\left(x_2|C_1\right) \tag{17}$$

得到的 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 结果对应图 7 中等高线。而 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 曲面和水平面围成几何体的体积为 1，也就是说，$f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 在 $\mathbb{R}^2$ 的二重积分结果为 1，这个值是概率。而 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 的"偏积分"为条件边际分布 $f_{X1|Y}(x_1 \mid C_1)$ 或 $f_{X2|Y}(x_2 \mid C_1)$，它们还是概率密度，并非概率值。

《数学要素》第 14 章聊过"偏求和"，第 18 章聊过"偏积分"，建议大家回顾。

本章估算条件边际分布时用的是高斯核密度估计方法。下一章则采用二元高斯分布 (Gaussian distribution) 来估算条件边际分布。因此，下一章的分类算法被称作，高斯朴素贝叶斯分类 (Gaussian Naïve Bayes classification)。

C_2 和 C_3 的似然概率

类似 (17)，C_2 和 C_3 似然概率可以通过下式估算得到：

$$\begin{cases} f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2|C_2\right) = f_{X1|Y}\left(x_1|C_2\right)\cdot f_{X2|Y}\left(x_2|C_2\right) \\ f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2|C_3\right) = f_{X1|Y}\left(x_1|C_3\right)\cdot f_{X2|Y}\left(x_2|C_3\right) \end{cases} \tag{18}$$

图 8 和图 9 等高线分别对应似然概率密度函数 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 | C_2)$ 和 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 | C_3)$ 结果。有了上一节的先验概率和本节得到的似然概率密度，我们可以求解联合概率。

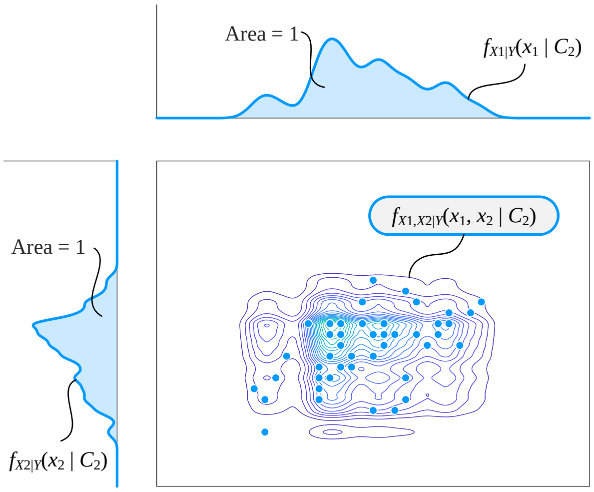


图 8. 分类 C_2 样本数据，鸢尾花花萼长度 x_1 和花萼宽度 x_2 条件独立，得到似然概率密度函数 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 | C_2)$

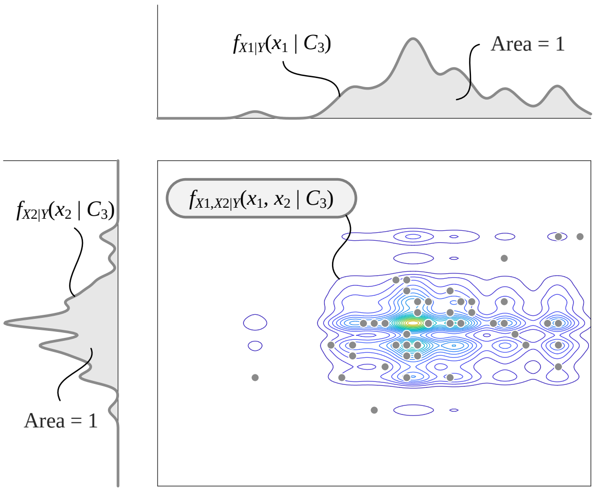


图 9. 分类 C_3 样本数据，鸢尾花花萼长度 x_1 和花萼宽度 x_2 条件独立，得到似然概率密度函数 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 | C_3)$

4.5 联合概率

C_1 的联合概率

根据 (13) 可以计算得到联合概率。对于鸢尾花三分类问题，假设"特征条件独立"，利用贝叶斯定理，联合概率 $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$ 可以通过下式得到：

$$\begin{aligned}\underbrace{f_{X1,X2,Y}\left(x_1,x_2,C_1\right)}_{\text{Joint}} &= \underbrace{f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2 \mid C_1\right)}_{\text{Likelihood}}\underbrace{p_Y\left(C_1\right)}_{\text{Prior}} \\ &= \underbrace{f_{X1|Y}\left(x_1 \mid C_1\right)\cdot f_{X2|Y}\left(x_2 \mid C_1\right)}_{\text{Conditional independence}}\underbrace{p_Y\left(C_1\right)}_{\text{Prior}}\end{aligned} \tag{19}$$

利用 (17)，我们已经得到似然概率密度曲面 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$。(16) 给出先验概率 $p_Y(C_1)$，代入 (19) 可以求得联合概率 $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$：

$$\underbrace{f_{X1,X2,Y}\left(x_1,x_2,C_1\right)}_{\text{Joint}} = \underbrace{f_{X1,X2|Y}\left(x_1,x_2 \mid C_1\right)}_{\text{Likelihood}}\times \underbrace{\frac{1}{3}}_{\text{Prior}} \tag{20}$$

容易发现，先验概率 $p_Y(C_1) = 1/3$ 相当于一个缩放系数。

图 10 所示为联合概率 $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$ 概率密度曲面。图 10 的 z 轴数值为概率密度值，并非概率。

我们知道似然概率密度曲面 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_1)$ 和水平面围成三维形状的体积为 1。而图 10 中联合概率 $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$ 和水平面围成体积为 $p_Y(C_1) = 1/3$。也就是说，$f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$ 在 $\mathbb{R}^2$ 的二重积分结果为 1/3，这个值是概率值。

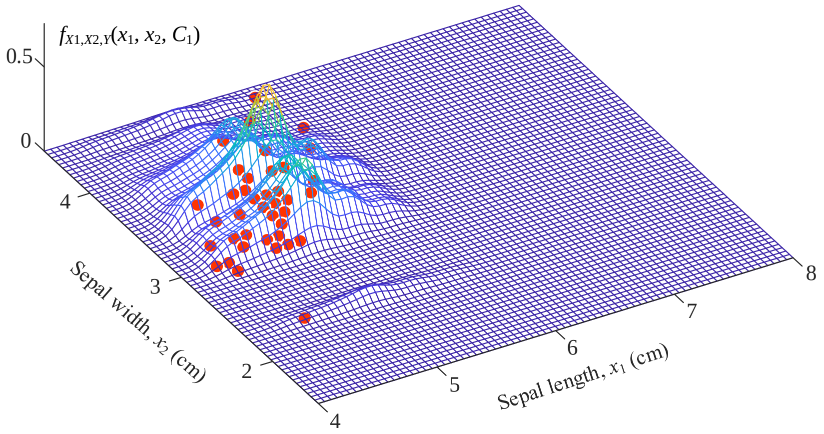


图 10. $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_1)$ 概率密度曲面，基于 KDE

C_1 和 C_2 的联合概率

类似地，我们可以计算得到另外两个联合概率 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_2)$ 和 $f_{X1,X2|Y}(x_1, x_2 \mid C_3)$，对应曲面分别如图 11 和图 12 所示。

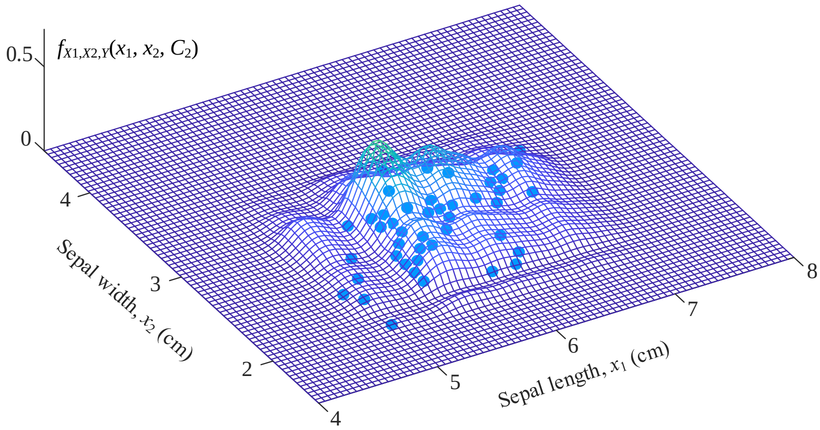


图 11. $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_2)$ 概率密度曲面，基于 KDE

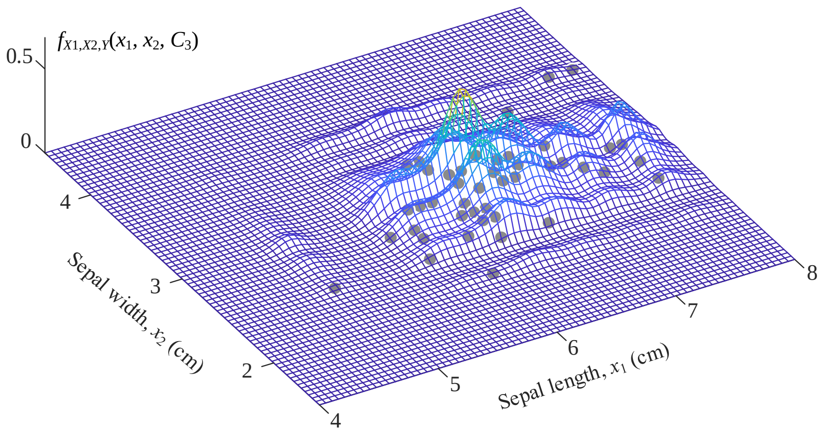


图 12. $f_{X1,X2,Y}(x_1, x_2, C_3)$ 概率密度曲面，基于 KDE

分类

至此，根据 (7) 我们可以比较上述三个联合概率密度曲面高度，从而获得决策边界。图 13 所示为采用朴素贝叶斯分类算法，基于 KDE 估算条件边际概率密度，得到的鸢尾花三分类边界。

请大家注意，目前 Python 的 Scikit-learn 工具包暂时不支持基于 KDE 的朴素贝叶斯分类。Scikit-learn 提供基于高斯分布的朴素贝叶斯分类器，这是下一章要介绍的内容。另外，KDE 朴素贝叶斯分类得到的决策边界不存在解析解。而高斯朴素贝叶斯分类得到的决策边界存在解析解。

利用 (7) 思想——比较联合概率大小——我们已经完成分类问题。但是，一般情况我们都会求出证据因子，并求得后验概率。如前文所述，后验概率又叫成员值，可以直接表达分类可能性百分比，便于可视化和解释结果。根据贝叶斯公式，要想得到后验概率，需要求得证据因子，这是下一节介绍的内容。

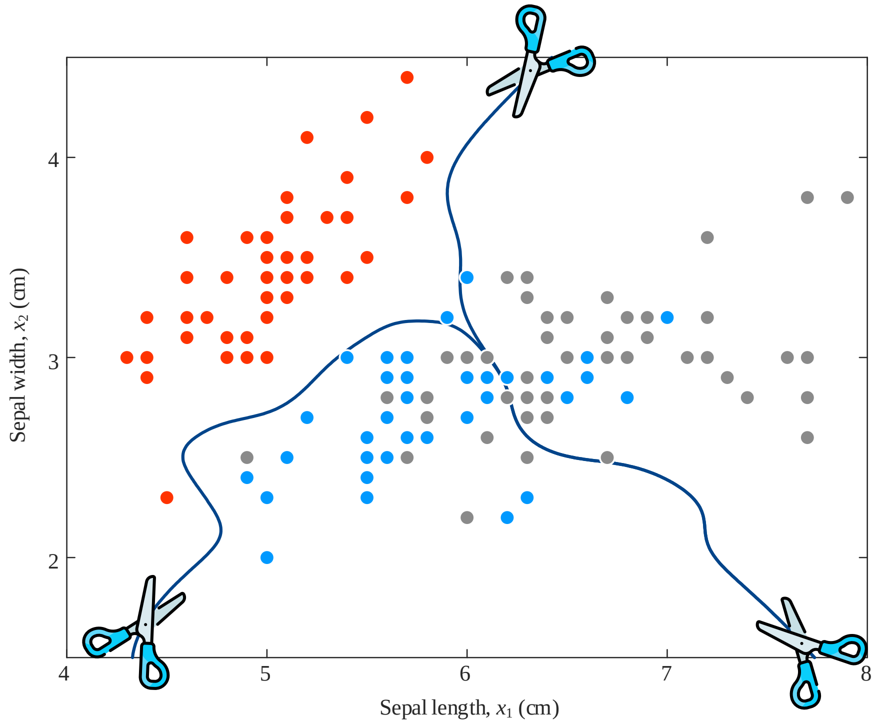


图 13. 朴素贝叶斯决策边界，基于核密度估计 KDE

4.6 证据因子

假设特征条件独立，利用全概率定理和 (13)，证据因子 $f_\chi(\boldsymbol{x})$ 概率密度可以通过下式计算得到：

$$\underbrace{f_\chi(\boldsymbol{x})}_{\text{Evidence}} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \underbrace{f_{\chi,Y}(\boldsymbol{x}, C_k)}_{\text{Joint}} \right\} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \underbrace{p_Y(C_k)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{\chi|Y}(\boldsymbol{x}|C_k)}_{\text{Likelihood}} \right\} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \underbrace{p_Y(C_k)}_{\text{Prior}} \underbrace{\prod_{j=1}^{D} f_{X_j|Y}(x_j|C_k)}_{\text{Conditional independence}} \right\} \tag{21}$$

两特征、三分类问题

当 $K = 3$ 时，对于两特征分类问题，证据因子 $f_{X1,X2}(x_1, x_2)$ 可以利用下式求得：

$$\begin{aligned} \underbrace{f_{X1,X2}(x_1,x_2)}_{\text{Evidence}} &= \underbrace{f_{X1,X2,Y}(x_1,x_2,C_1)}_{\text{Joint}} + \underbrace{f_{X1,X2,Y}(x_1,x_2,C_2)}_{\text{Joint}} + \underbrace{f_{X1,X2,Y}(x_1,x_2,C_3)}_{\text{Joint}} \\ &= \underbrace{p_Y(C_1)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{X1,X2|Y}(x_1,x_2|C_1)}_{\text{Likelihood}} + \underbrace{p_Y(C_2)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{X1,X2|Y}(x_1,x_2|C_2)}_{\text{Likelihood}} + \underbrace{p_Y(C_3)}_{\text{Prior}} \underbrace{f_{X1,X2|Y}(x_1,x_2|C_3)}_{\text{Likelihood}} \end{aligned} \tag{22}$$

这步计算很容易理解，对于鸢尾花数据，上一节得到的三个联合概率曲面 (图 10 ~ 图 12) 叠加便得到证据因子 $f_{X1,X2}(x_1, x_2)$ 概率密度曲面。图 14 所示为运算过程。图 14 实际上也是一种概率密度估算的方法。

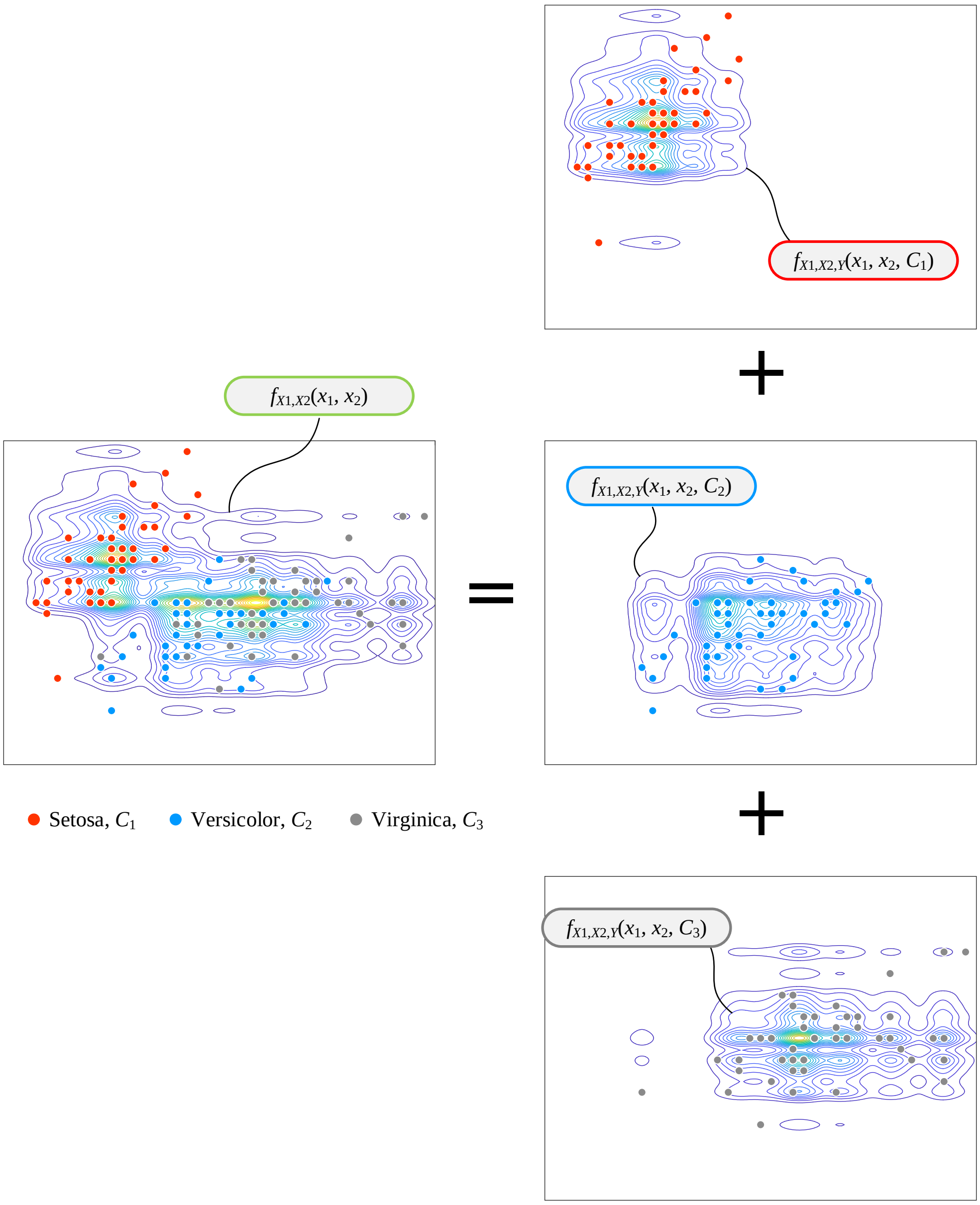


图 14. 估算证据因子概率密度，基于 KDE

概率密度估算

图 15 所示为利用“特征条件独立”构造得到的证据因子 $f_{X1,X2}(x_1, x_2)$ 概率密度曲面。$f_{X1,X2}(x_1, x_2)$ 概率密度曲面和水平面构成的几何形体体积为 1。

图 4 所示为假设“特征独立”条估算的证据因子概率密度曲面。前文提过，图 4 这个曲面没有准确捕捉样本数据分布特点；然而，图 15 曲面较为准确描述样本数据分布。

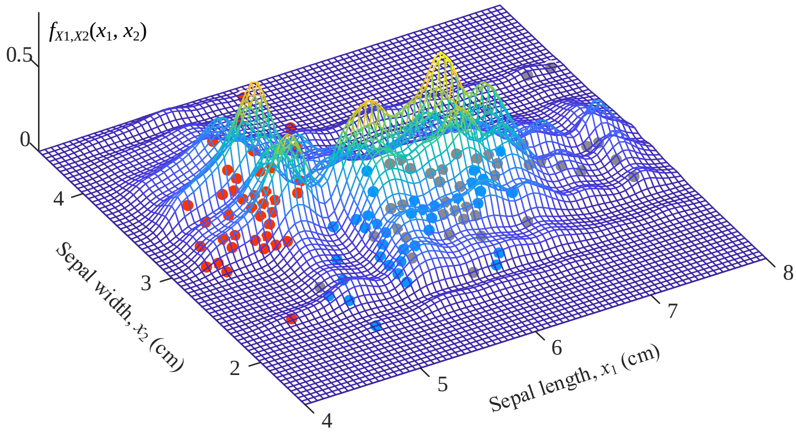


图 15. 估算得到的概率密度曲面，特征条件独立，基于 KDE

4.7 后验概率：成员值

有了前两节计算得到联合概率和证据因子，本节我们计算后验概率。

当 $K = 3$ 时，如果证据因子 $f_{X1,X2}(x_1, x_2)$ 不为 0，后验概率 $f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 可以通过下式得到：

$$\underbrace{f_{Y|X1,X2}\left(C_1 \mid x_1, x_2\right)}_{\text{Posterior}} = \frac{\overbrace{f_{X1,X2,Y}\left(x_1, x_2, C_1\right)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{f_{X1,X2}\left(x_1, x_2\right)}_{\text{Evidence}}} \tag{23}$$

白话来讲，后验概率 $f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 的含义是，给定 (x_1, x_2) 的具体值，分类标签为 C_1 的可能性多大？所以，$f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 并不是概率密度，$f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 是概率。

图 16 所示为后验概率 $f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 曲面，容易发现曲面高度在 [0, 1] 之间。

同理，可以计算得到另外两个后验概率 $f_{Y|X1,X2}(C_2 \mid x_1, x_2)$ 和 $f_{Y|X1,X2}(C_3 \mid x_1, x_2)$。比较三个后验概率曲面高度关系，可以得到和图 13 完全一致的决策边界。

对于三分类问题，后验概率 (成员值) 存在以下关系：

$$\underbrace{f_{Y|X1,X2}\left(C_1 \mid x_1, x_2\right)}_{\text{Posterior}} + \underbrace{f_{Y|X1,X2}\left(C_2 \mid x_1, x_2\right)}_{\text{Posterior}} + \underbrace{f_{Y|X1,X2}\left(C_3 \mid x_1, x_2\right)}_{\text{Posterior}} = 1 \tag{24}$$

白话说，给定平面上任意一点 (x_1, x_2)，它的分类可能性只有三个——C_1、C_2、C_3。因此，上式中，三个条件概率之和为 1。

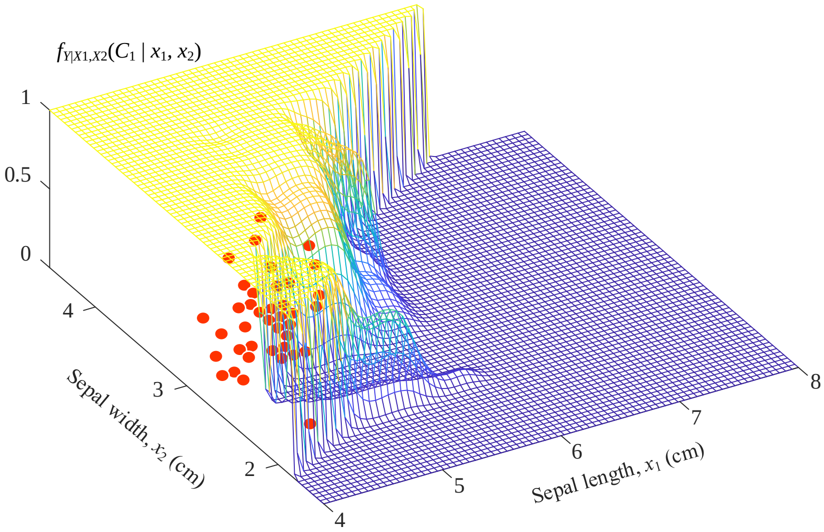


图 16. $f_{Y|X1,X2}(C_1 \mid x_1, x_2)$ 后验概率曲面，基于 KDE

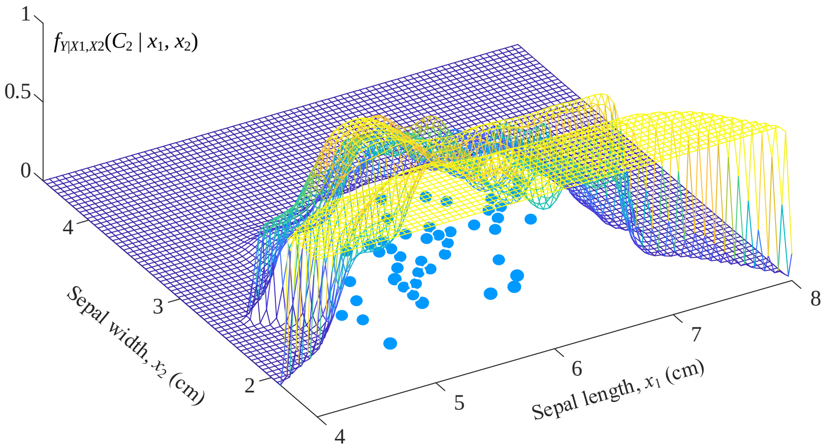


图 17. $f_{Y|X1,X2}(C_2 \mid x_1, x_2)$ 后验概率曲面，基于 KDE

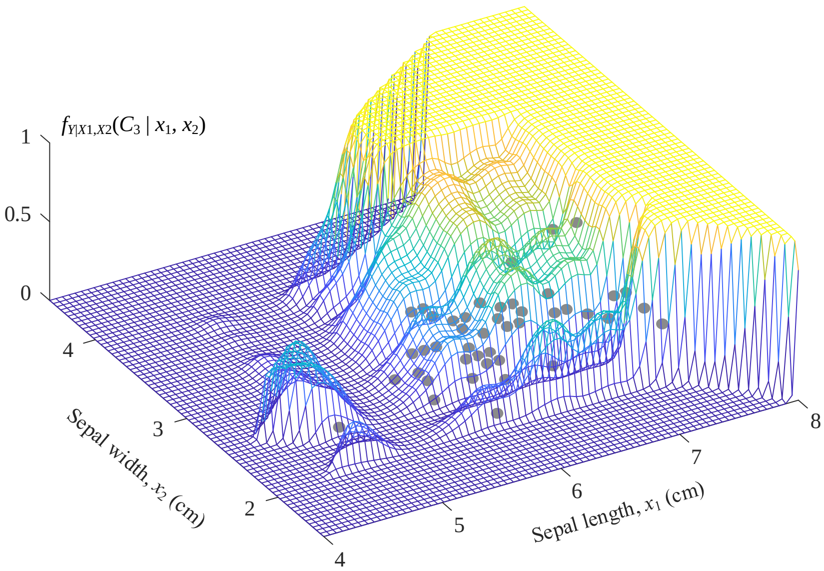


图 18. $f_{Y|X1,X2}(C_3 \mid x_1, x_2)$ 后验概率曲面，基于 KDE

本章最后请大家特别注意以下几点：

- 贝叶斯定理和全概率定理是朴素贝叶斯分类器的理论基础；
- 朴素贝叶斯分类器的“朴素”来自假设“特征条件独立”；
- 后验 ∝ 似然 × 先验；
- 比较联合概率 (似然 × 先验) 大小，可以预测分类；
- 假设“特征条件独立”，联合概率叠加得到证据因子，这是一种概率密度估算方法；
- 后验概率，本身就是概率值，取值范围在 [0, 1] 之间；
- 比较后验概率大小，同样可以预测分类。

下一章介绍高斯朴素贝叶斯。下一章采用和本章几乎一致的内容安排，请大家对照阅读。这两章共用一个思维导图。