# 中北大学软件学院

# 实验报告

专	业:	软件工程
方	向:	人工智能
课程名称:		机器学习实践
班	级:	22130418
学	号:	2213041835、2213041816
姓	名:	吕炳荣、刘晓峰
辅导教师:		程晓鼎

2024年3月制

<b>出</b>		
成 绩	:	

实验时间

2025年03月23日14时至18时

学时数

4 学时

## 1. 实验名称

空气质量等级的 K-近邻法预测

# 2. 实验目的

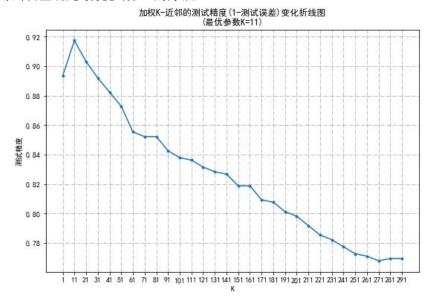
理解 K-近邻法原理,基于具体数据能对其做应用,掌握 K-近邻法的代码实现。体会 K-近邻法三要素(距离度量、K 值选择、分类决策规则)对算法性能的影响。

# 3.实验内容

分析空气质量监测数据,根据数据建立空气质量等级的 K-近邻法预测模型,分析不同距离度量方法、不同 K 取值以及不同分类决策规则下的算法准确率,通过测试误差确定最优参数 K。

# 4. 实验原理或流程图

距离度量方法:如曼哈顿距离、欧氏距离、切比雪夫距离等分类决策规则:如多数表决、倒数加权表决、高斯加权表决等通过测试误差确定最优参数 K 的方法:



### 5. 实验过程或源代码

# -\*- coding: utf-8 -\*import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

import seaborn as sns

from sklearn.model\_selection import train\_test\_split, GridSearchCV, cross\_val\_score, validation\_curve

from sklearn.preprocessing import StandardScaler, LabelEncoder

from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

from sklearn.metrics import accuracy\_score, classification\_report import warnings

# --- 0. 全局设置 ---

warnings.filterwarnings('ignore') # 忽略一些不影响结果的警告

plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei'] # 设置中文字体为黑体

plt.rcParams['axes.unicode\_minus'] = False # 解 决 负 号 显 示问 题

sns.set\_style('whitegrid') # 设置 seaborn 风格

DATA\_FILE = '北京市空气质量数据.xlsx' # 数据文件路径

RANDOM\_STATE = 42 # 随机种子, 保证结果可复现

TEST\_SIZE = 0.3 # 测试集比例

CV\_FOLDS = 5 # 交叉验证折数

 $MAX_K = 20 \# 探索的最大 K 值$ 

```
# --- 1. 数据加载与预处理 ---
print("--- 1. 数据加载与预处理 ---")
try:
    df = pd.read excel(DATA FILE)
    print(f"成功加载数据: {DATA FILE}")
    print("数据前 5 行:\n", df.head())
    print("\n 数据信息:")
    df.info()
except FileNotFoundError:
    print(f"错误: 未找到数据文件 {DATA FILE}")
    exit()
# 特征选择 (选择 'PM2.5' 到 'O3' 之间的所有列作为特征)
# 假设 'AQI', '质量等级' 在前两列,污染物特征从第3列(索
引 2) 开始, 直到最后一列'O3'(索引-1)
X = df.iloc[:, 3:-1].values # & PM2.5, PM10, SO2, CO,
NO2, O3 作为特征 (注意索引调整)
y raw = df['质量等级'].values
print("\n 选择的特征 (X 前 5 行):\n", X[:5])
print("原始目标变量 (y raw 前 5 个):", y raw[:5])
# 目标变量标签编码
le = LabelEncoder()
y encoded = le.fit transform(y raw)
print("\n 编码后的目标变量 (y encoded 前 5 个):",
y encoded[:5])
```

```
print("目标变量类别:", le.classes)
#数据标准化(对特征进行)
scaler = StandardScaler()
X scaled = scaler.fit transform(X)
print("\n 标准化后的特征 (X scaled 前 5 行):\n",
X scaled[:5])
# 划分训练集和测试集
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    X scaled, y encoded,
    test size=TEST SIZE,
    random state=RANDOM STATE,
    stratify=y encoded # 保持类别比例
print(f"\n 数据集划分为: 训练集 {X train.shape[0]} 条,
试集 {X test.shape[0]} 条")
# --- 2. 探索性数据分析 (EDA) 可视化 ---
print("\n--- 2. 生成 EDA 可视化图表 ---")
plt.figure(figsize=(18, 10))
plt.suptitle("空气质量数据探索性分析", fontsize=16, y=1.02)
# 质量等级分布
plt.subplot(2, 3, 1)
sns.countplot(x=df[' 质 量 等 级 '], order=df[' 质 量 等 级
'].value counts().index, palette='viridis')
plt.title('质量等级分布')
plt.ylabel('样本数量')
```

```
# PM2.5 分布
plt.subplot(2, 3, 2)
sns.histplot(df['PM2.5'], kde=True, color='skyblue')
plt.title('PM2.5 浓度分布')
plt.xlabel('PM2.5 (µg/m<sup>3</sup>)')
plt.ylabel('频数')
# 主要污染物箱线图
plt.subplot(2, 3, 3)
# 使用原始 X 数据进行可视化更有意义
sns.boxplot(data=df.iloc[:, 3:-1], palette='Set2')
plt.xticks(rotation=30)
plt.title('主要污染物浓度箱线图')
plt.ylabel('浓度')
# 特征相关性热力图
plt.subplot(2, 3, 4)
# 使用原始 X 数据进行可视化更有意义
corr matrix = df.iloc[:, 3:-1].corr()
sns.heatmap(corr matrix,
                         annot=True, cmap='coolwarm',
fmt=".2f", linewidths=.5)
plt.title('污染物相关性矩阵')
# O3 与 PM2.5 关系散点图
plt.subplot(2, 3, 5)
sns.scatterplot(data=df, x='PM2.5', y='O3', hue=' 质 量 等 级 ',
palette='magma', alpha=0.7)
plt.title('PM2.5 与 O3 关系 (按质量等级着色)')
plt.xlabel('PM2.5 (µg/m<sup>3</sup>)')
plt.ylabel('O3 (\mu g/m^3)')
```

```
plt.tight layout(rect=[0, 0, 1, 0.98]) # 调整布局防止标题重叠
plt.show()
# --- 3. K-近邻模型构建与参数选择 ---
print("\n--- 3. K-近邻模型构建与参数选择 ---")
# 定义高斯权重函数 (与原代码一致)
def gaussian weight(distances):
    # 避免除以零或极小距离导致权重过大
    epsilon = 1e-6
    return np.exp(-0.5 * (distances**2) / np.mean(distances +
epsilon)**2) # 稍微调整以增加稳定性
# 定义参数网格
param grid = {
    'n neighbors': list(range(1, MAX K + 1)),
    'metric': ['euclidean', 'manhattan', 'chebyshev'],
    # 'weights': ['uniform', 'distance'] # 暂时不包括自定义权
重, GridSearchCV 不支持直接传入函数名
    'weights': ['uniform', 'distance']
}
# 如果需要测试自定义权重,可以在 GridSearch 后单独进行或
修改 GridSearchCV 流程
# 使用 GridSearchCV 进行参数搜索 (寻找最佳 K、距离度
量、基础权重)
print(f"\n 使 用
               GridSearchCV 寻找最佳参数组合
(K=1-{MAX K}, 距离度量,基础权重)...")
knn = KNeighborsClassifier()
```

```
grid search = GridSearchCV(knn, param grid, cv=CV FOLDS,
scoring='accuracy', n jobs=-1, verbose=1)
grid_search.fit(X_train, y_train)
# 输出最佳参数
best params basic = grid search.best params
best_score_basic = grid_search.best_score_
print(f"\nGridSearchCV
                       找
                          到
                              的
                                最佳基础参数:
{best params basic}")
print(f"对应的交叉验证准确率: {best score basic:.4f}")
#考虑自定义高斯权重 (使用找到的最佳 K 和 metric)
best k = best params basic.get('n neighbors', 5) # 使用找到的
最佳 K, 若失败则用 5
best metric = best params basic.get('metric', 'manhattan') # 使
用找到的最佳 metric
                  KNeighborsClassifier(n neighbors=best_k,
knn gaussian
metric=best metric, weights=gaussian weight)
scores gaussian
               =
                   cross val score(knn gaussian,
                                               X train,
y train, cv=CV FOLDS, scoring='accuracy', n jobs=-1)
mean score gaussian = np.mean(scores gaussian)
print(f" 使 用 高 斯 权 重 的 交 叉 验 证 准 确 率
                                            (k=\{best k\},
metric={best metric}): {mean score gaussian:.4f}")
# 确定最终最佳参数 (比较基础权重和高斯权重)
best weights = best params basic['weights']
best score = best score basic
if mean score gaussian > best score basic:
    best weights = gaussian weight
    best score = mean score gaussian
    print("高斯权重表现更优。")
else:
```

```
print(f" {best weights.capitalize()
                                                     if
isinstance(best weights, str) else '基础'}权重表现更优或相当。
")
final best params
                       {'n neighbors':
                                      best k,
                                                'metric':
                  =
best metric, 'weights': best weights}
print(f"\n 最终确定的最佳参数组合: { {k: (v if isinstance(v,
       int))
               else
                      'gaussian')
                                   for
                                          k,
final best params.items()} }") # 打印时显示函数名
print(f"对应的最佳交叉验证准确率: {best score:.4f}")
# --- 4. 分析 K 值对模型性能的影响 ---
print("\n--- 4. 分析 K 值对模型性能的影响 ---")
      validation curve 分析 K 值影响 (使用找到的最佳
# 使用
metric 和 weights)
train scores, valid scores = validation curve(
     KNeighborsClassifier(metric=best metric,
weights=best weights),
    X_train, y_train, # 在训练集上进行分析更标准
    param name="n neighbors",
    param range=list(range(1, MAX K + 1)),
     cv=CV FOLDS,
     scoring="accuracy",
    n jobs=-1
)
# 计算平均得分和误差
train mean = np.mean(train scores, axis=1)
valid mean = np.mean(valid scores, axis=1)
train error = 1 - train mean
valid error = 1 - valid mean
```

```
# 绘制 K 值与误差率曲线
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(list(range(1, MAX K + 1)), train error, 'o-', color='r',
label='训练误差率')
plt.plot(list(range(1, MAX K + 1)), valid error, 'o-', color='g',
label='交 叉 验 证 误 差 率 ')
plt.xlabel('K 值 (n neighbors)')
plt.ylabel('误差率')
                                  型
                                      性
                                          能
                                                 影
                                                     响
plt.title(f'K
                对
                       KNN
                              模
                                             的
            值
(metric={best metric},
                           weights={"gaussian"
                                                     if
callable(best weights) else best weights})')
plt.xticks(list(range(1, MAX K + 1)))
plt.legend()
plt.grid(True)
# 标记最佳 K 值点
plt.axvline(x=best k, color='blue', linestyle='--', label=f' 最 佳
K = \{best k\}'\}
plt.legend() # 更新图例以包含最佳 K 线
plt.show()
optimal k from curve = np.argmin(valid error) + 1 # 从曲线
中找到误差最低的 K
print(f" 从验证
                  曲
                     线 看 ,
                               最优
                                        K
                                            值 约 为:
{optimal k from curve} (交叉验证误差最低点)")
print(f"GridSearch 找到的最优 K 值为: {best k}")
# --- 5. 分析不同距离度量和分类决策规则的影响
```

```
print("\n--- 5. 分析不同参数的影响 (参数消融实验) ---")
# 辅助绘图函数
def plot_comparison(scores dict, title, xlabel, ylabel, palette):
     plt.figure(figsize=(8, 5))
     keys = list(scores dict.keys())
     values = list(scores dict.values())
     sns.barplot(x=keys, y=values, palette=palette)
     plt.title(title)
     plt.xlabel(xlabel)
     plt.ylabel(ylabel)
     # 在柱状图上显示数值
     for i, v in enumerate(values):
          plt.text(i, v + 0.005, f'\{v:.3f\}', ha='center',
va='bottom')
     plt.ylim(min(values) * 0.95, max(values) * 1.05) # 调整 y
轴范围
    plt.show()
# a) 不同距离度量对比 (使用最佳 K 和 'distance' 权重)
metrics to compare = ['euclidean', 'manhattan', 'chebyshev']
metric scores = {}
print(f"\n 比较不同距离度量 (固定 k={best k},
weights='distance'):")
for m in metrics to compare:
     knn metric test
KNeighborsClassifier(n neighbors=best k,
                                               metric=m,
weights='distance') # 使用 distance 权重对比
           = cross val score(knn metric test, X train,
y train, cv=CV FOLDS, scoring='accuracy', n jobs=-1)
     metric scores[m] = np.mean(scores)
     print(f"-\{m\}: 平均准确率 = \{metric scores[m]:.4f\}")
plot comparison(metric scores, '不同距离度量对准确率的影响
```

```
', '距离度量', '平均交叉验证准确率', 'rocket')
# b) 不 同 分 类 决 策 规 则 对 比 (使 用 最 佳 K 和 最 佳 metric)
weights to compare = {'uniform': '多数表决', 'distance': '距离
加权', gaussian weight: '高斯加权'}
weight scores = {}
print(f"\n 比 较 不 同 分 类 决 策 规 则 (固 定 k={best k},
metric={best metric}):")
for w func, w name in weights to compare.items():
    knn weight test
KNeighborsClassifier(n neighbors=best k, metric=best metric,
weights=w func)
                cross val score(knn weight test,
    scores
                                              X train,
y train, cv=CV FOLDS, scoring='accuracy', n jobs=-1)
    weight scores[w name] = np.mean(scores)
                           平
             {w name}:
                               均
                                    准
                                        确
                                             率
    print(f"-
{weight scores[w name]:.4f}")
plot comparison(weight scores, '不同分类决策规则对准确率
的影响','分类决策规则','平均交叉验证准确率','mako')
# --- 6. 参数组合热力图 (来自 GridSearchCV 结果) ---
print("\n--- 6. 可视化参数组合性能 (GridSearchCV 热力图)
---")
try:
    results df = pd.DataFrame(grid search.cv results)
    #选择只包含 uniform 和 distance 权重的行进行透视
    results subset = results df[results df['param weights'] !=
gaussian weight] # 排除自定义函数行
    pivot table
results subset.pivot table(index='param n neighbors',
```

```
columns=['param metric', 'param weights'], # 多列组合
values='mean test score')
    # 为了简化显示,可以分别绘制不同权重的热力图
    for weight_type in ['uniform', 'distance']:
         pivot subset
results subset[results subset['param weights']
weight type].pivot table(
              index='param n neighbors',
              columns='param metric',
              values='mean test score'
         plt.figure(figsize=(10, 7))
         sns.heatmap(pivot subset, annot=True, fmt=".3f",
cmap="viridis", linewidths=.5)
         plt.title(f'KNN
                        准确率热力图
                                             ( 权 重:
{weight type.capitalize()})')
         plt.xlabel('距离度量 (Metric)')
         plt.ylabel('K 值 (n neighbors)')
         plt.show()
except Exception as e:
    print(f"绘制热力图时出错: {e}. 可能 GridSearchCV 结
果格式不兼容或无数据。")
# --- 7. 最终模型评估 ---
print("\n--- 7. 在测试集上评估最终模型 ---")
# 使用找到的最佳参数创建最终模型
final knn = KNeighborsClassifier(**final best params) # 使用
```

```
** 解包字典传入参数
# 训练最终模型 (使用所有训练数据)
final knn.fit(X train, y train)
print("\n 最终模型已使用最佳参数在整个训练集上训练完成。
")
# 在测试集上进行预测
y pred = final knn.predict(X test)
# 评估模型性能
test accuracy = accuracy score(y test, y pred)
print(f"\n 最终模型在测试集上的准确率: {test accuracy:.4f}")
print("\n 测试集分类报告:")
      le.inverse transform 将编码后的 y test 和 y pred
# 使用
转回原始标签显示
# 但 classification report 本身可以接受 target names 参数
print(classification report(y test,
                                           y pred,
target names=le.classes ))
print("\n--- 实验结束 ---")
```

```
--- 1. 数据加载与预处理 ---
成功加载数据: 北京市空气质量数据.xlsx
          日期 AQI 质量等级 PM2.5 PM10 S02 C0 N02 03
                         45 111 28 1.5 62 52
0 2014-01-01 81
2 2014-01-03
数据信息:
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 2155 entries, 0 to 2154
Data columns (total 9 columns):
# Column Non-Null Count Dtype
            2155 non-null datetime64[ns]
    质量等级
             2155 non-null object
   PM10 2155 non-null int64
          2155 non-null int64
          2155 non-null float64
          2155 non-null int64
        2155 non-null int64
        2155 non-null int64
7 NO2
         2155 non-null int64
dtypes: datetime64[ns](1), float64(1), int64(6), object(1)
memory usage: 151.6+ KB
选择的特征 (X 前5行):
[[ 45. 111. 28. 1.5 62. ]
[ 47. 98. 29. 1.3 52. ]
[114. 147. 40.
                2.8 75.]
[ 91. 117. 36.
原始目标变量 (y_raw 前5个): ['良' '轻度污染' '良' '轻度污染' '轻度污染']
编码后的目标变量 (y_encoded 前5个): [4 5 4 5 5]
目标变量类别: ['严重污染''中度污染''优''无''良''轻度污染''重度污染']
标准化后的特征 (X_scaled 前5行):
[[-0.32434822 0.30751958 1.29814083 0.54735734 0.72985305]
[ 0.78230743 1.15235245 4.2960559 2.80226691 2.10192174]
```

数据集划分为: 训练集 1508 条, 测试集 647 条

```
--- 2. 生成 EDA 可视化图表 ---

--- 3. K-近邻模型构建与参数选择 ---

使用 GridSearchCV 寻找最佳参数组合 (K=1-20, 距离度量, 基础权重)...

Fitting 5 folds for each of 120 candidates, totalling 600 fits

GridSearchCV 找到的最佳基础参数: {'metric': 'manhattan', 'n_neighbors': 20, 'weights': 'distance'}

对应的交叉验证准确率: 0.7334

使用高斯权重的交叉验证准确率 (k=20, metric=manhattan): 0.7341

高斯权重表现更优。

最终确定的最佳参数组合: {'n_neighbors': 20, 'metric': 'manhattan', 'weights': 'gaussian'}

对应的最佳交叉验证准确率: 0.7341

--- 4. 分析 K 值对模型性能的影响 ---
从验证曲线看,最优 K 值约为: 19 (交叉验证误差最低点)

GridSearch 找到的最优 K 值为: 20
```

#### --- 5. 分析不同参数的影响 (参数消融实验) ---

比较不同距离度量 (固定 k=20, weights='distance'):

- euclidean: 平均准确率 = 0.7221

- manhattan: 平均准确率 = 0.7334

- chebyshev: 平均准确率 = 0.6910

比较不同分类决策规则 (固定 k=20, metric=manhattan):

- 多数表决: 平均准确率 = 0.7201

- 距离加权: 平均准确率 = 0.7334

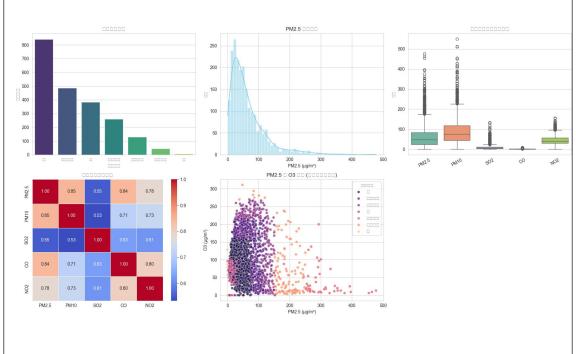
- 高斯加权: 平均准确率 = 0.7341

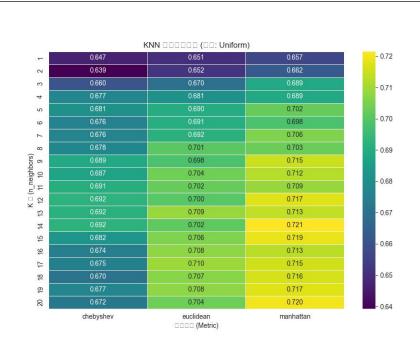
- --- 6. 可视化参数组合性能 (GridSearchCV 热力图) ---
- --- 7. 在测试集上评估最终模型 ---

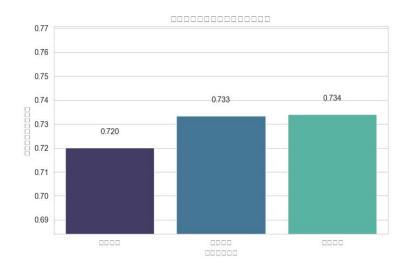
最终模型已使用最佳参数在整个训练集上训练完成。

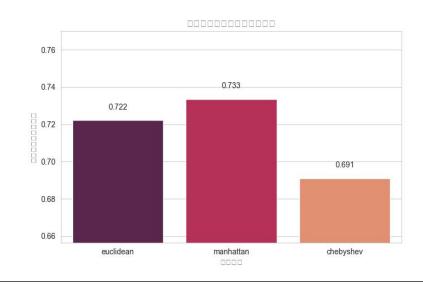
最终模型在测试集上的准确率: 0.7295

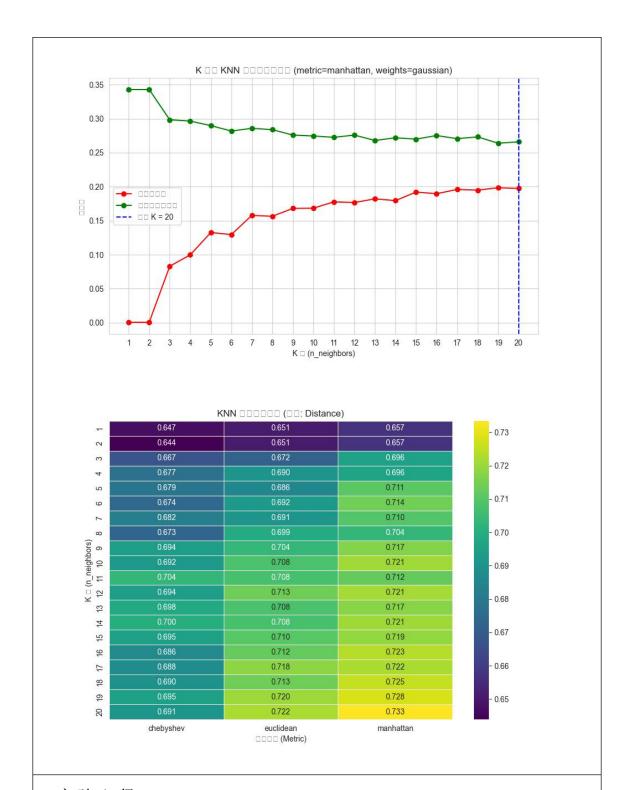
#### 测试集分类报告: precision recall f1-score support 严重污染 0.91 0.71 0.80 14 78 中度污染 0.63 0.49 0.55 0.79 0.90 0.84 115 0.00 0.00 0.00 0.74 0.85 0.79 253 0.60 轻度污染 0.65 0.56 146 重度污染 0.86 0.64 0.74 39 accuracy 0.73 647 macro avg 0.65 0.59 0.62 647 weighted avg 0.72 0.73 0.72 647 --- 实验结束 ---











#### 6. 实验心得

通过本次实验,我不仅掌握了 K-NN 算法的基本原理和 Python 实现(基于 scikit-learn p ,更深刻体会到:

理论与实践结合的重要性:理解 K-NN 的三个核心要素(K、距离、权重)如何在实际代码中体现,并通过调整它们观察对模型性能的直接影响,远比单纯阅读理论更具启发性。

数据预处理的关键性:对于 K-NN 这类基于距离的算法,特征标准化是不可或缺的一步,直接关系到模型的有效性。

模型调优的必要性与方法:没有所谓的"万能"参数设置,必须根据具体数据集进行调

优。GridSearch 和 Validation Curve 是进行系统化参数选择和理解模型行为的有力工具。

评估指标的全面性:单一的准确率可能无法完全反映模型在不平衡数据集上的表现,结合分类报告中的精确率、召回率、F1分数能提供更全面的视角。

算法的局限性: K-NN 计算复杂度较高(尤其是在大数据集上预测时,需要计算与所有训练样本的距离),且对数据维度敏感(高维稀疏数据下距离度量可能失效),存储需求也较大(需要保存整个训练集)。

总的来说,这次实验是一次宝贵的机器学习实践经历,它锻炼了我的数据分析、模型构建、参数调优和结果解读能力,并为后续学习更复杂的算法打下了基础。