分类算法

万永权

本节课教学目标

- 理解并掌握分类算法的基础知识点:
  - 算法：KNN、朴素贝叶斯、决策树、
  - 评估指标：准确率、精准率、召回率等;
- 掌握KNN模型的设计原理和构建流程;
- 熟悉使用Scikit-learn使用KNN进行分类的方法;

目录

CONTENTS

1. 分类问题定义
2. 模型评价指标
3. KNN分类算法
4. 朴素贝叶斯分类
5. 逻辑回归
6. 决策树

监督学习之分类问题

分类问题

- 分类是监督学习中重要的任务之一。
- 分类任务中，预测的因变量是离散型的类别标签。
- 例：
  - 反垃圾邮件系统：是/不是垃圾邮件（spam）
  - 新闻自动分类：

分类问题

◆**分类问题**是监督学习的一个核心问题，它从数据中学习一个分类决策函数或分类模型(分类器（classifier）)，对新的输入进行输出预测，输出变量取有限个离散值。

◆**核心算法**

- k近邻、决策树、贝叶斯、SVM、逻辑回归

分类

目前 ImageNet 中总共有14197122幅图像，总共分为21841个类别(synsets)，顶级类包括：amphibian、animal、appliance、bird、covering、device、fabric、fish、flower、food、fruit、fungus、furniture、geological formation、invertebrate、mammal、musical instrument、plant、reptile、sport、structure、tool、tree、utensil、vegetable、vehicle、person 共27个。

不同分类任务

Binary Classification

- Spam
- Not spam

Multiclass Classification

- Dog
- Cat
- Horse
- Fish
- Bird
- ...

Multi Label Classificiation

Horror: 0.02%
Romance: 0.02%
Adventure: 99.96%
Documentary: 0.0%

分类模型

- 监督学习中，分类任务就是从数据中学习一个模型（也叫分类器），应用这一模型，对给定的输入 X ，预测相应的输出 Y。
- 这个模型的一般形式包括：
  - 决策函数　　$Y = f(X)$
  - 条件概率分布　$P(Y|X)$

- 其中的条件概率又有两种方法获得：
  - 直接对条件概率值 $P(Y|X)$ 建模
  - 首先对联合分布概率 $P(X,Y)$ 建模然后使用贝叶斯公式计算所有类别的条件概率值 $P(Y|X)$，选择概率最大的一种或几种作为预测结果

模型的评价

教材P159， 5.5节

准确率（Accuracy）

- 准确率是最好理解的评价指标，它是一个比值：

$$\text{准确率} = \frac{\text{算法分类正确的数据个数}}{\text{输入算法的数据的个数}}$$

- 在数据的类别不均衡，特别是有极偏的数据存在的情况下，准确率不能客观评价模型的优劣。
例如，1000人中有5人患病：

$$\text{准确率} = \frac{\text{算法分类正确的数据个数}}{\text{输入算法的数据的个数}}$$

$$= \frac{995}{1000} = 99.5\%$$

模型的评价

正例、负例

二分类问题的混淆矩阵由 4 部分构成。

首先将二分类问题中，最关心的、数量为少数的那一部分数据，称之为正例（positive）。

例如，如果需要预测癌症，癌症患者就定义为正例，剩下的就定义为负例（negative）。

模型的评价

混淆矩阵

标识	预测类别	真实类别	预测是否正确
TP	P	P	T
TN	N	N	T
FP	P	N	F
FN	N	P	F

这 4 个定义由 2 个字母组成：

- 第 1 个字母表示算法预测正确或者错误；
- 第 2 个字母表示算法预测的结果。

模型的评价

混淆矩阵（误差矩阵）

	预测类别 P	预测类别 N
真实类别 P	TP	FN
真实类别 N	FP	TN

精确率（Precision）

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

预测为正例的那些数据里预测正确的数据占比

模型的评价

混淆矩阵（误差矩阵）

	预测类别 P	预测类别 N
真实类别 P	TP	FN
真实类别 N	FP	TN

召回率（Recall）

$$recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

真实为正例的那些数据里预测正确的数据占比

模型的评价

- 在不同的应用场景下，关注点是不同的。
- 例如，在预测股票的时候，更关心精确率，即预测涨的那些股票里，真的涨了有多少，因为那些预测涨的股票已经投资买入了。

- 而在预测病患的场景下，更关注召回率，即真的患病的那些人里预测错误的情况应该越少越好，因为真的患病如果没有检测出来，后果很严重。而之前那个预测所有人都健康的模型，其召回率就是 0。

不同的应用场景，关注点不同

1. 地震的预测

对于地震的预测，我们希望的是召回率非常高，也就是说每次地震我们都希望预测出来。

宁可错杀三千，不可放过一个

2. 嫌疑人定罪

基于不错怪一个好人的原则，对于嫌疑人的定罪我们希望是非常准确的。及时有时候放过了一些罪犯（召回率低），但也是值得的。

宁可放过三千，不可错杀一个

模型的评价

- 精准率和召回率是此消彼长的，即精准率高了，召回率就下降，在一些场景下要兼顾精准率和召回率，这就是 F1 score（F1测度）。

$$\frac{1}{F1} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{precision} + \frac{1}{recall}\right)$$

$$F1 = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

- F1测度是精准率和召回率的调和平均数。
- 只有当精准率和召回率二者都非常高的时候，它们的调和平均才会高。
- 如果其中之一很低，调和平均就会被拉得接近于那个很低的数。

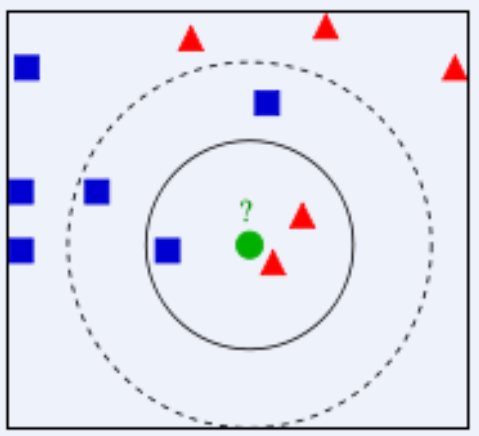
KNN算法

02

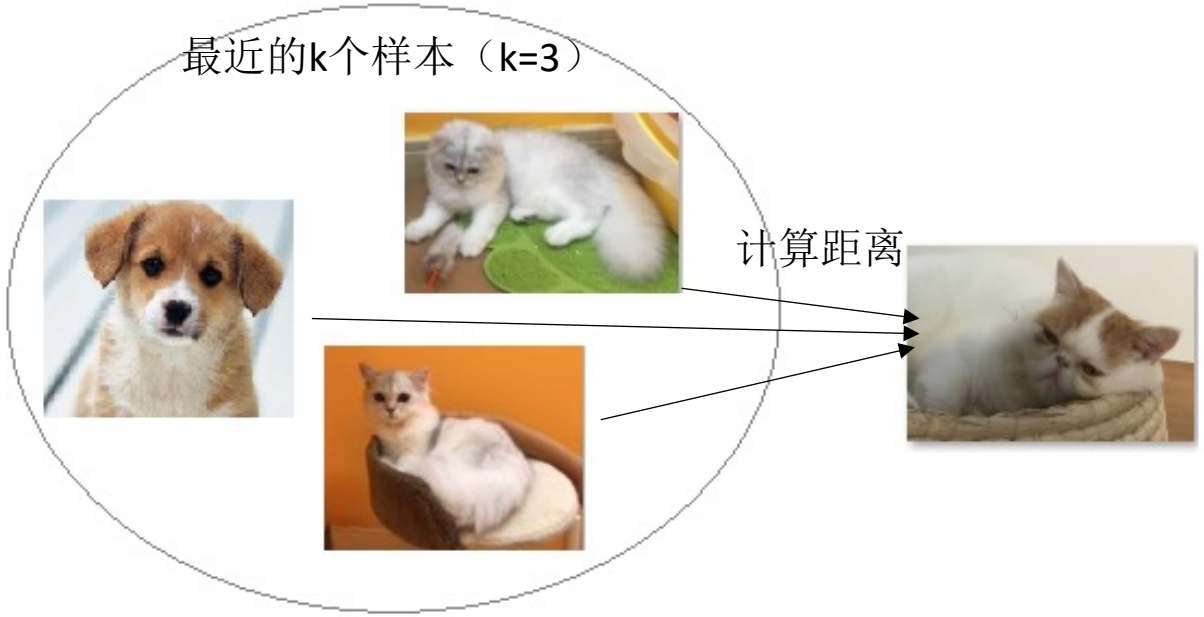
KNN

- KNN分类算法（K-Nearest-Neighbors Classification),又叫K近邻算法。它是概念极其简单，而效果又很优秀的分类算法。
- 1967年由Cover T和Hart P提出。
- KNN分类算法的核心思想：
  - 如果一个样本在特征空间中的k个最相似(即特征空间中最邻近)的样本中的大多数属于某一个类别，则该样本也属于这个类别。

近朱者赤、近墨者黑
——晋·傅玄《太子少傅箴》



如图，假设已经获取一些动物的特征，且已知这些动物的类别。现在需要识别一只新动物，判断它是哪类动物。



KNN分类示意图

首先找到与这个物体最接近的k个动物。假设k=3，则可以找到2只猫和1只狗。由于找到的结果中大多数是猫，则把这个新动物划分为猫类。

K最近邻方法

- K最近邻法的基本规则是：
- 在所有N个样本中，找到测试样本的K（K<=N）个最近邻样本，当 k=1 时，KNN方法就变成了最近邻方法。
- KNN 方法中，K 一般为奇数，跟投票表决一样，避免因两种票数相等而难以决策。

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。

K-近邻算法 要素之一

◆距离度量选择

- 特征空间中两个实例点的距离是两个实例点相似程度的反映。
- KNN模型的特征空间一般是n维实数向量空间R^n。

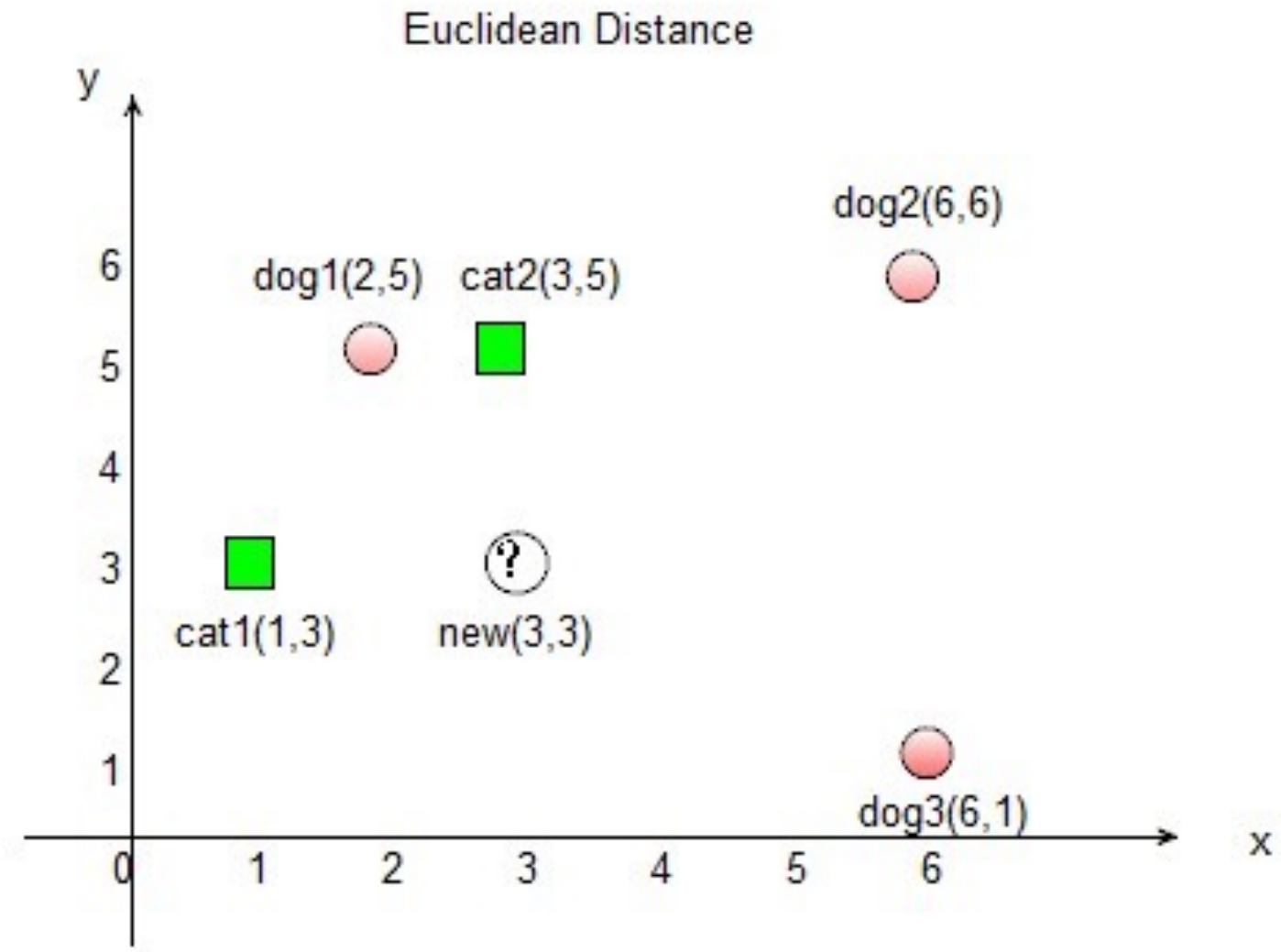
欧氏距离 $$d_{ij}=\sqrt{\sum_{k=1}^{N}(x_{ik}-x_{jk})}$$

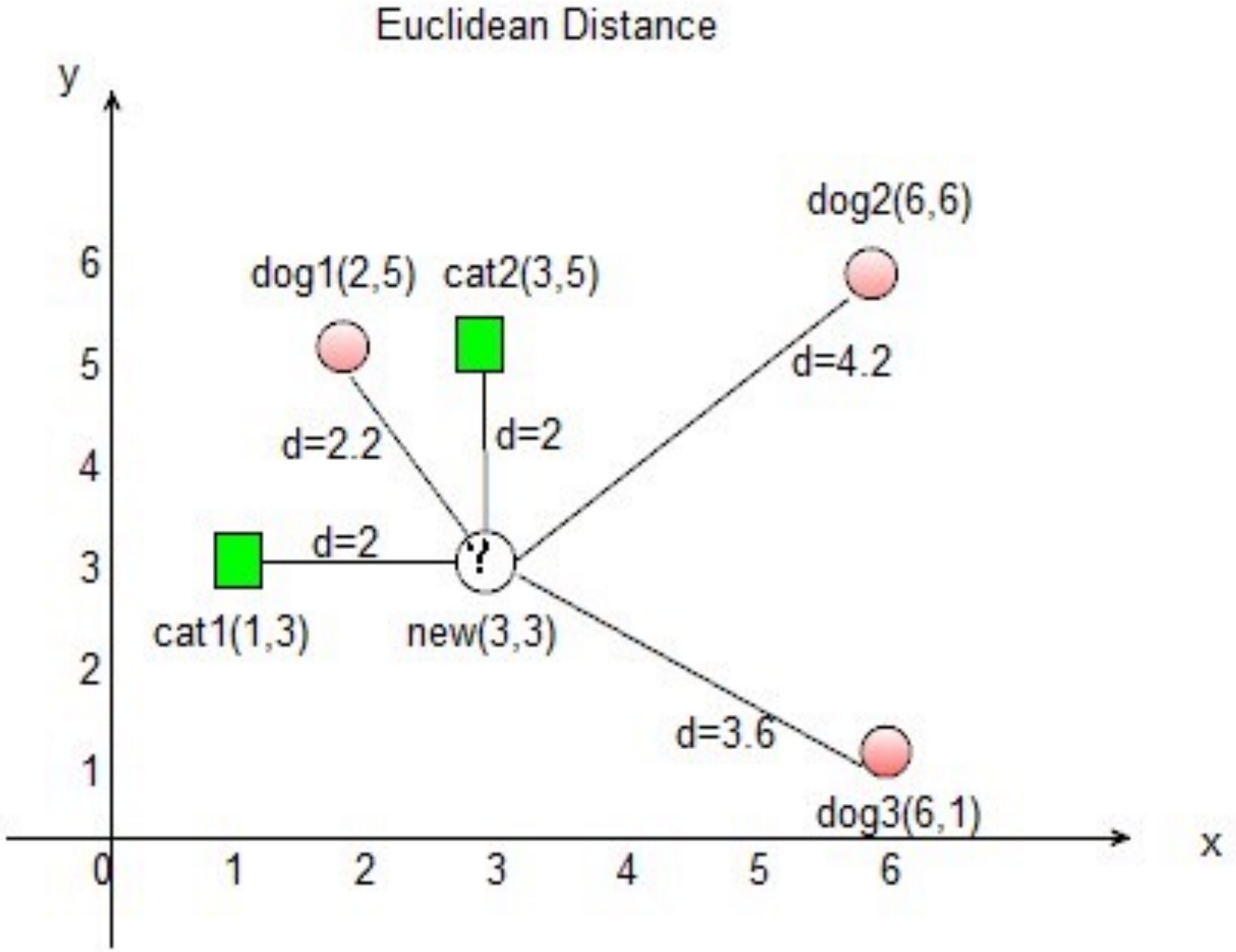
曼哈顿距离 $$d_{ij}=\sum_{k=1}^{N}\left|x_{ik}-x_{jk}\right|$$

余弦相似度 $$d_{ij}=\frac{\sum_{k=1}^{N}x_{ik}\cdot x_{jk}}{\sqrt{\sum_{k=1}^{N}x_{ik}^{2}}\sqrt{\sum_{k=1}^{N}x_{jk}^{2}}}$$

欧式距离公式:

$$\rho = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1}$$

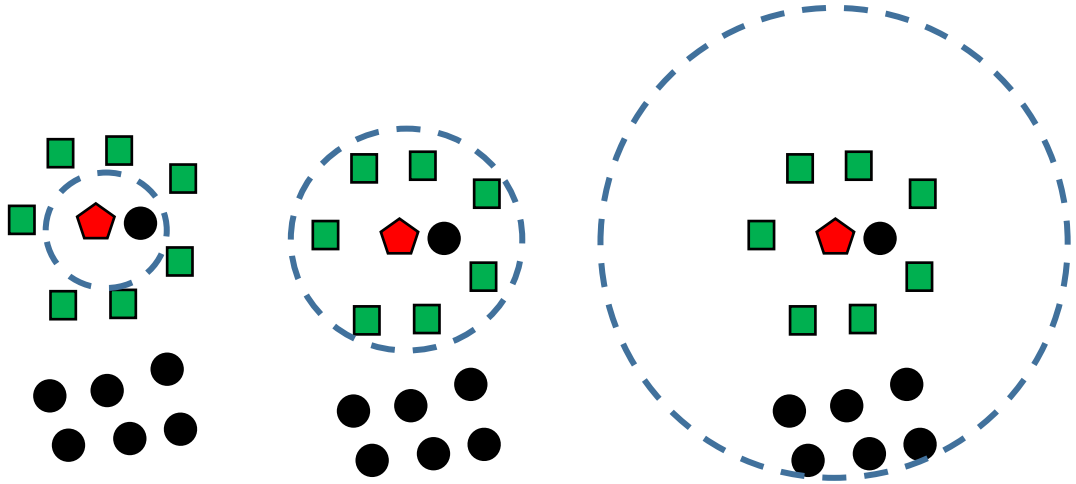



Euclidean Distance
y
x
6
5
4
3
2
1
0
1
2
3
4
5
6
dog1(2,5)
cat2(3,5)
dog2(6,6)
d=2.2
d=2
d=4.2
d=2
?
cat1(1,3)
new(3,3)
d=3.6
dog3(6,1)

K-近邻算法 要素之二

◆K值的选择

- K值的选择会对KNN算法的结果产生重大影响。
- 如果选择较小的K值，学习”的近似误差会减小，预测结果会对近邻的实例点非常敏感，整体模型变得更复杂，容易发生过拟合。
- 如果选择较大的K值，模型变得更简单，但近似误差会增大，导致分类模糊，即欠拟合。



K值太小　　K值适中　　K值太大

下面举例看k值对预测结果的影响。对图5.2中的动物进行分类，当k=3时，分类结果为“猫：狗=2：1”，所以属于猫；当k=5时，表决结果为“猫：狗：熊猫=2：3：1”，所以判断目标动物为狗。

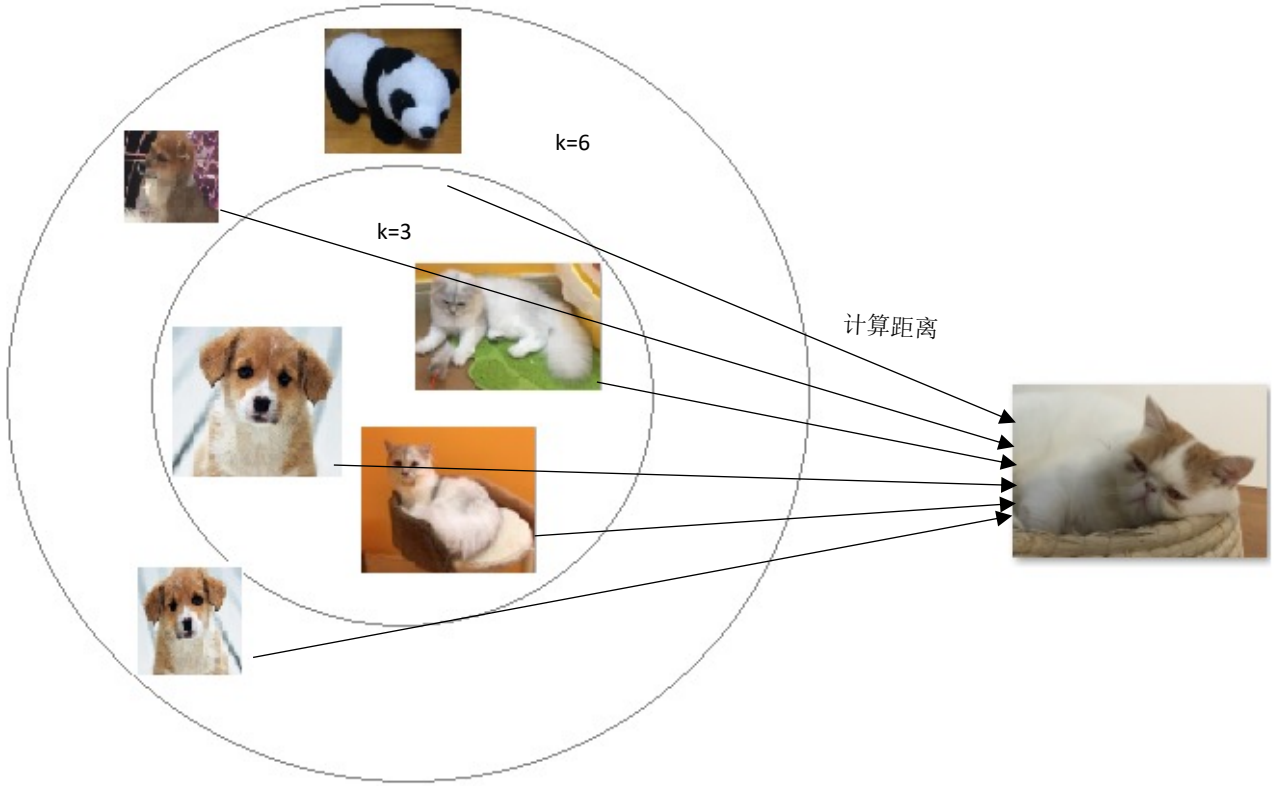


图5.2 不同K值对结果的影响示意图

K值的选取

- 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。
- K 值通常是采用交叉检验来确定。
- 经验规则： K 一般低于训练样本数的平方根。

(a) Neighborhood too small.

(b) Neighborhood just right.

(c) Neighborhood too large.

K-近邻算法 要素之三

- 分类决策规则

分类结果的确定往往采用多数表决原则，即由输入实例的k个最邻近的训练实例中的多数类决定输入实例的类别

KNN流程

- KNN算法完成**分类**任务时的流程：
- 对数据集中每个未知类别的样本依次执行以下操作。
  - ①准备好已知类别标签的数据集D，对数据进行预处理，假设D中共有N个数据样本。
  - ②计算测试样本x（即待分类样本）到D中每个样本的距离，存入数组Dist[1..N]。
  - ③对Dist[1..N]中元素进行增序排序，找出其中距离最小的K个样本。
  - ④统计这K个样本所属类别出现的频率。
  - ⑤找出出现频率最高的类别，记为c，作为测试样本x的预测类别。

KNN分类实例-蚊子分类

1981年生物学家格若根（W． Grogan）和维什（W．Wirth）发现了两类蚊子(或飞蠓midges)．他们测量了这两类15只蚊子的翼长和触角长，数据如下：

翼长	触角长	类别
1.78	1.14	Apf
1.96	1.18	Apf
1.86	1.20	Apf
1.72	1.24	Af
2.00	1.26	Apf
2.00	1.28	Apf
1.96	1.30	Apf
1.74	1.36	Af

翼长	触角长	类别
1.64	1.38	Af
1.82	1.38	Af
1.90	1.38	Af
1.70	1.40	Af
1.82	1.48	Af
1.82	1.54	Af
2.08	1.56	Af

问：如果抓到三只新的蚊子，它们的触角长和翼长分别为：

#1：1.90, 1.25;

#2：1.82，1.50；

#3：1.96, 1.43；

问它们应分别属于哪一个种类?

结果

翼长	触角长	类别	#1 距离	#2 距离	#3距离
1.78	1.14	1	0.16	0.36	0.34
1.96	1.18	1	**0.09**	0.35	0.25
1.86	1.2	1	**0.06**	0.30	0.25
1.72	1.24	0	0.18	0.28	0.31
2	1.26	1	0.10	0.30	0.17
2	1.28	1	0.10	0.28	0.16
1.96	1.3	1	**0.08**	0.24	**0.13**
1.74	1.36	0	0.19	0.16	0.23
1.64	1.38	0	0.29	0.22	0.32
1.82	1.38	0	0.15	**0.12**	**0.15**
1.9	1.38	0	0.13	0.14	**0.08**
1.7	1.4	0	0.25	0.16	0.26
1.82	1.48	0	0.24	**0.02**	0.15
1.82	1.54	0	0.30	**0.04**	0.18
2.08	1.56	0	0.36	0.27	0.18

当K=3时：

#1：为1类Apf;

#2：为0类Af;

#3：为0类Af;

若K=5时，结果是否发生改变?

KNN算法的优缺点

- **KNN算法的优点**有：
  - 思路简单，易于理解，易于实现，无需训练过程，不必估计参数，可直接用训练数据来实现分类。
  - 只需人为确定两个参数，即K的值和距离函数。KNN算法支持多分类。
- **KNN算法有以下4点不足**：
  ① 对超参数K的选择十分敏感，针对同一个数据集和同一个待测样本选择不同K值，会导致得到完全不同的分类结果。
  ② 当样本不平衡时，例如一个类中样本数很多，而其他类中样本数很少，有可能导致总是将新样本归入大容量类别中，产生错误分类。
  ③ 当不同类别的样本数接近时或有噪声时，会增加决策失误的风险。
  ④ 当样本的特征维度很高或训练数据量很大时，计算量较大，KNN算法效率会降低，因为对每一个待分类样本都要计算它与全体已知样本之间的距离，才能找到它的K个最近邻点。目前常用的解决方法是事先对已知样本进行剪枝，去除对分类作用不大的样本；另外，可以对训练数据进行快速K近邻搜索。

5.2 初识KNN——鸢尾花分类

1．查看数据

SKlearn中的iris数据集有5个key，分别如下：

- target_names：分类名称，包括setosa、versicolor和virginica类。
- data：特征数据值。
- target：分类（150个）。
- DESCR: 数据集的简介。
- feature_names: 特征名称。

【例】查看鸢尾花iris数据集。

2．数据集拆分

使用train_test_split函数。train_test_split函数属于sklearn.model_selection类中的交叉验证功能，能随机地将样本数据集合拆分成训练集和测试集。

【例】对iris数据集进行拆分，并查看拆分结果。

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split( iris_dataset['data'],
iris_dataset['target'], random_state=2)
```

3. 使用散点矩阵查看数据特征关系

在数据分析中，同时观察一组变量的散点图是很有意义的，这也被称为散点图矩阵（scatter plot matrix）。创建这样的图表工作量巨大，可以使用scatter_matrix函数。scatter_matrix函数是Pandas提供了一个能从DataFrame创建散点图矩阵的函数。

函数格式：

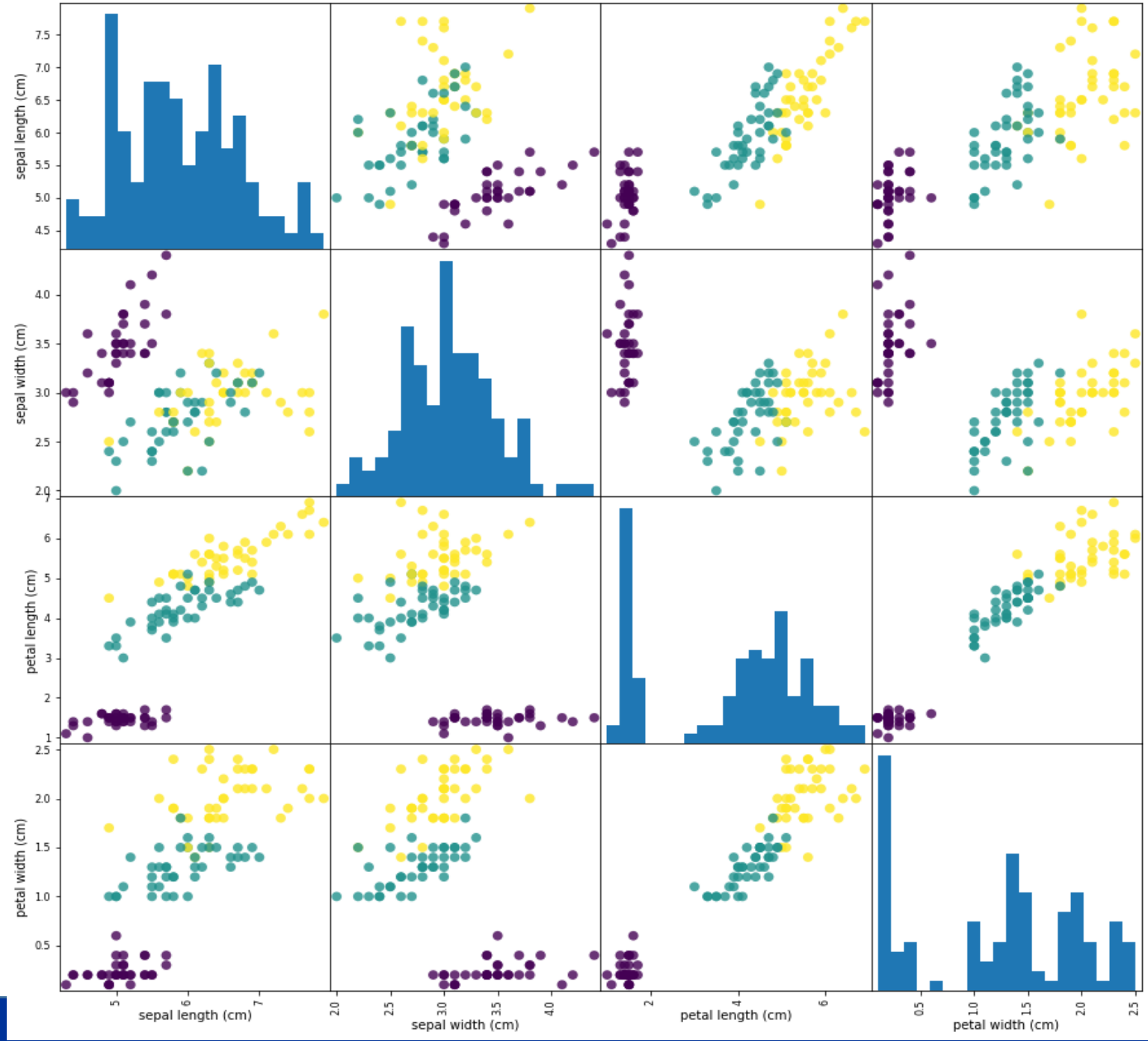
scatter_matrix(frame, alpha=0.5, c,figsize=None, ax=None, diagonal='hist', marker='.', density_kwds=None,hist_kwds=None, range_padding=0.05, **kwds)

重要参数解释：

- frame：Pandas dataframe对象。
- alpha：图像透明度，一般取(0,1)。
- figsize：以英寸为单位的图像大小，一般以元组 (width, height) 形式设置。
- Diagonal：必须且只能在{‘hist’,‘kde’}中选择1个，’hist’表示直方图(Histogram plot),’kde’表示核密度估计(Kernel Density Estimation)；该参数是scatter_matrix函数的关键参数。
- marker：Matplotlib可用的标记类型，如’.’，’,’，’o’等。

【例】对鸢尾花数据结果，使用scatter_matrix显示训练集与测试集的散点图矩阵。

```
pd.plotting.scatter_matrix(iris_dataframe, c=y_train, figsize=(15, 15), marker='o', hist_kwds={'bins': 20}, s=60, alpha=.8)
```


sepal length (cm)
sepal width (cm)
petal length (cm)
petal width (cm)

4．建立KNN模型

在Python中，实现KNN方法使用的是KNeighborsClassifier类，KNeighborsClassifier类属于Scikit-learn的neighbors包。

KNeighborsClassifier使用很简单，核心操作包括三步：

1）创建KNeighborsClassifier对象，并进行初始化。

基本格式：

sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=5, weights='uniform', algorithm='auto', leaf_size=30,p=2, metric='minkowski', metric_params=None, n_jobs=None, **kwargs)

主要参数：

- n_neighbors：int型,可选，缺省值是5，代表KNN中的近邻数量k值。
- weights：计算距离时使用的权重，缺省值是“uniform”，表示平等权重。也可以取值“distance”，则表示按照距离的远近设置不同权重。还可以自主设计加权方式，并以函数形式调用。
- metric：距离的计算，缺省值是“minkowski”。当p=2, metric='minkowski'时，使用的是欧式距离。p=1,metric='minkowski'时为曼哈顿距离。

2）调用fit方法，对数据集进行训练。

函数格式：fit(X, y)

说明：以X为训练集，以y为测试集对模型进行训练。

3）调用predict函数，对测试集进行预测。

函数格式：predict(X)

说明：根据给定的数据预测其所属的类别标签。

综合实验：KNN对鸢尾花数据集进行分类

```
from sklearn import datasets
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split
#导入鸢尾花数据并查看数据特征
iris = datasets.load_iris()
print('数据集结构：',iris.data.shape)
# 获取属性
iris_X = iris.data
# 获取类别
iris_y = iris.target
# 划分成测试集和训练集
iris_train_X,iris_test_X,iris_train_y,iris_test_y=train_test_split(iris_X,iris_y,test_size=0.2, random_state=0)
#分类器初始化
knn = KNeighborsClassifier()
#对训练集进行训练
knn.fit(iris_train_X, iris_train_y)
#对测试集数据的鸢尾花类型进行预测
predict_result = knn.predict(iris_test_X)
print('测试集大小：',iris_test_X.shape)
print('预测结果：',predict_result)
print('预测精确率：',knn.score(iris_test_X, iris_test_y))
```

程序显示出了30个测试样本的预测结果
测试样本的真值是什么？
请设法显示出来。

```
数据集结构： (150, 4)
测试集大小： (30, 4)
真实结果： [2 1 0 2 0 2 0 1 1 1 2 1 1 1 1 0 1 1 0 0 2 1 0 0 2 0 0 1 1 0]
预测结果： [2 1 0 2 0 2 0 1 1 1 2 1 1 1 2 0 1 1 0 0 2 1 0 0 2 0 0 1 1 0]
预测精确率： 0.9666666666666667
```