

32

Classification Methods in Scikit-Learn

Scikit-Learn 分类

k 最近邻、朴素贝叶斯、支持向量机、核技巧



错误，是进步的代价。

Error is the price we pay for progress.

—— 阿尔弗雷德·怀特海 (Alfred Whitehead) | 英国数学家、哲学家 | 1861 ~ 1947



- ▶ `matplotlib.colors.ListedColormap()` 创建离散颜色映射的函数。函数接受一个颜色列表作为输入，并生成一个离散的颜色映射对象，用于在可视化中区分不同的类别或数据值
- ▶ `sklearn.datasets.load_iris()` 加载鸢尾花数据
- ▶ `sklearn.naive_bayes.GaussianNB()` 实现高斯朴素贝叶斯分类器算法
- ▶ `sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier()` 实现 k 最近邻分类器算法
- ▶ `sklearn.svm.SVC()` 实现支持向量机分类器算法



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

32.1 什么是分类？

本书前文介绍过，分类 (classification) 是有监督学习 (supervised learning) 中的一类问题。分类是指根据给定的数据集，通过对样本数据的学习，建立分类模型来对新的数据进行分类的过程。

如图 1 所示，大家已经清楚鸢尾花数据集分三类 (setosa ●、versicolor ●、virginica ●)。以花萼长度 (sepal length)、花萼宽度 (sepal width) 作为特征，大家如果采到一朵鸢尾花，花萼长度为 6.5 厘米，花瓣长度为 4.0 厘米。图 1 中 × 又叫查询点 (query point)。

根据已有数据，猜测这朵鸢尾花属于 setosa ●、versicolor ●、virginica ● 三类的哪一类可能性更大，这就是分类问题。

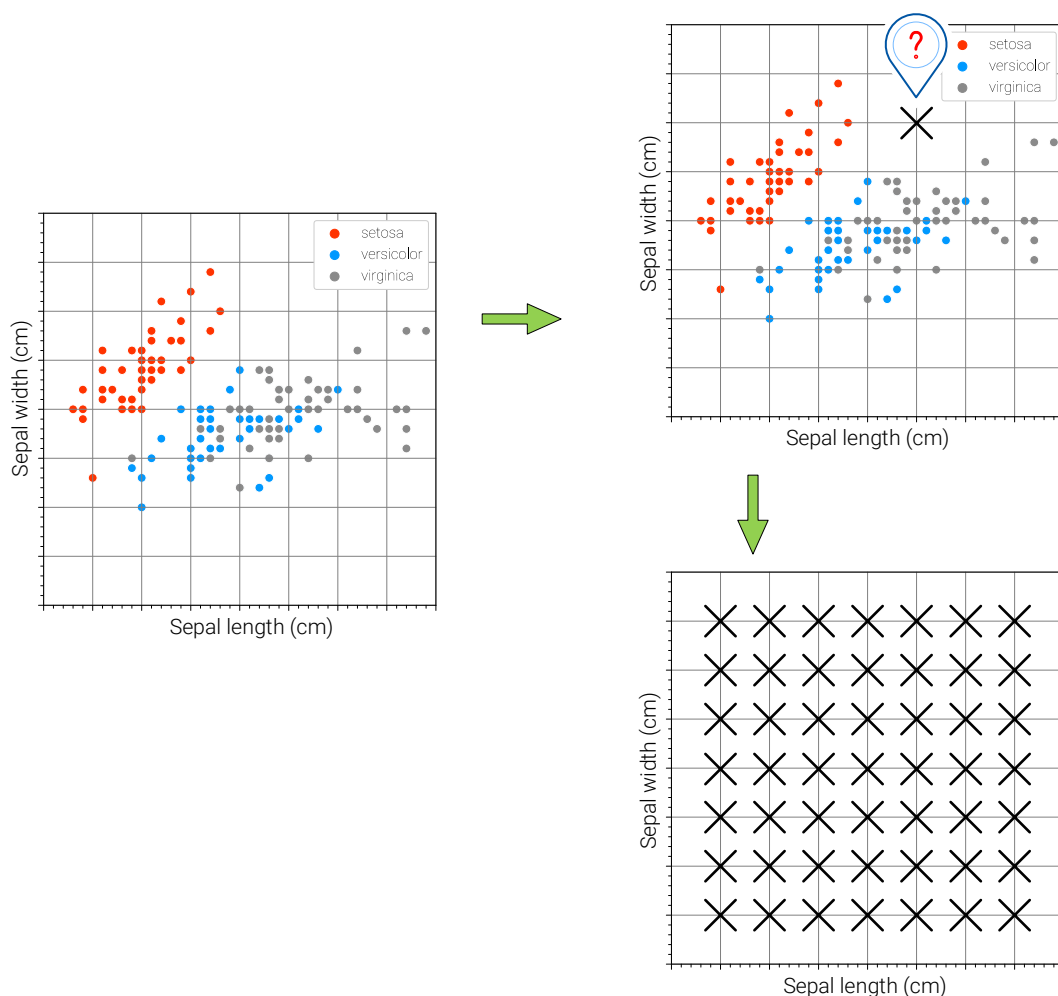


图 1. 用鸢尾花数据介绍分类算法

决策边界 (decision boundary) 是分类模型在特征空间中划分不同类别的分界线或边界。通俗地说，决策边界就像是一道看不见的墙，把不同类别的数据点分隔开。

对于鸢尾花数据集，决策边界就是将 setosa ●、versicolor ●、virginica ● 这三类点“尽可能准确地”区分的线或曲线。大家会在本章中看到，为了获得不同算法的决策边界，我们一般会用 `numpy.meshgrid()` 生成一系列均匀网格数据，然后再分别预测每个网格点的分类，以此划定决策边界。

在简单的情况下，决策边界可能是一条直线；但在复杂的问题中，决策边界可能是一条弯曲的曲线，甚至是多维空间中的超平面。

模型训练过程就是调整模型的参数，使得决策边界能够最好地拟合训练数据，并且在未见过的数据上也能表现良好。

要注意的是，决策边界的好坏直接影响分类模型的性能。一个好的决策边界能够很好地将数据分类，而一个不合适的决策边界可能导致模型预测错误。因此，选择合适的分类算法和调整模型参数是非常重要的，以获得有效的决策边界和准确的分类结果。

下面我们就用最通俗的语言，以几乎没有数学公式的方式，介绍几种常用分类算法。

32.2 k 最近邻分类

k 最近邻分类 (k -nearest neighbors), 简称 k NN。

k NN 思路很简单——“近朱者赤，近墨者黑”。更准确地说，小范围投票，少数服从多数 (majority rule)，如图 2 所示。 k 是参与投票的最近邻的数量， k 为用户输入值。

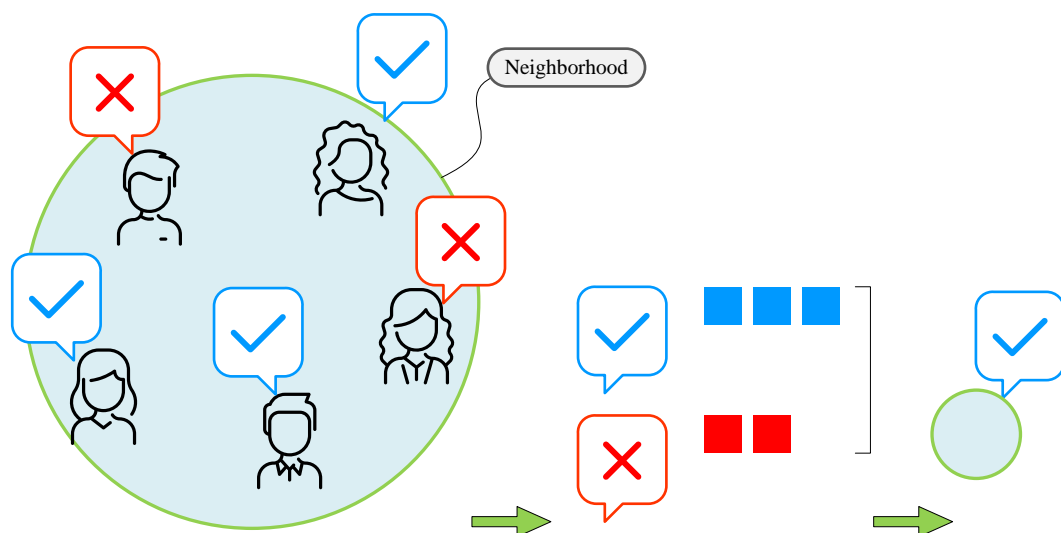


图 2. k 近邻分类核心思想——小范围投票，少数服从多数

最近邻数量 k 直接影响查询点分类结果；因此，选取合适 k 值格外重要。

图 3 所示为 k 取四个不同值时，查询点 \times 预测分类结果变化情况。如图 3 (a) 所示，当 $k = 4$ 时，查询点 \times 近邻中，3 个近邻为 ● (C_1)，1 个近邻为 ● (C_2)；采用等权重投票，查询点 \times 预测分类为 ● (C_1)。

当近邻数量 k 提高到 8 时，近邻社区中，4 个近邻为 ● (C_1)，4 个近邻为 ● (C_2)，如图 3 (b) 所示；等权重投票的话，两个标签各占 50%。因此 $k = 8$ 时，查询点 \times 恰好在决策边界上。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

如图 3 (c) 所示, 当 $k = 12$ 时, 查询点 \times 近邻中 5 个为 \bullet (C_1), 7 个为 \bullet (C_2); 等权重投票条件下, 查询点 \times 预测标签为 \bullet (C_2)。当 $k = 16$ 时, 如图 3 (c) 所示, 查询点 \times 预测标签同样为 \bullet (C_2)。

k -NN 算法选取较小的 k 值虽然能准确捕捉训练数据的分类模式; 但是, 缺点也很明显, 容易受到噪声影响。

鸢尾花书《机器学习》会专门介绍 k -NN 算法。

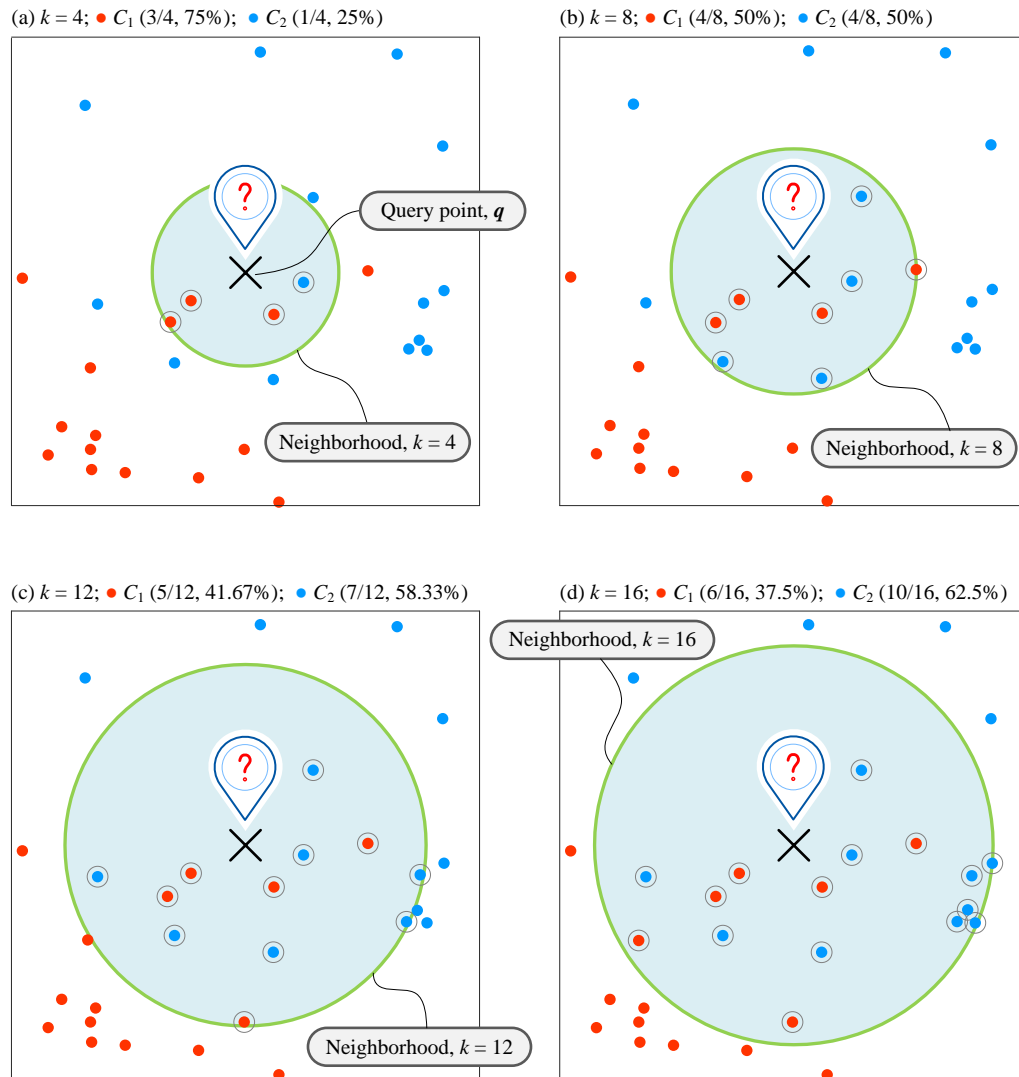


图 3. 近邻数量 k 值影响查询点的分类结果

图 4 所示为利用 k NN 算法确定的鸢尾花数据决策区域和决策边界。

图 5 为对应的代码。下面介绍其中重要的语句。

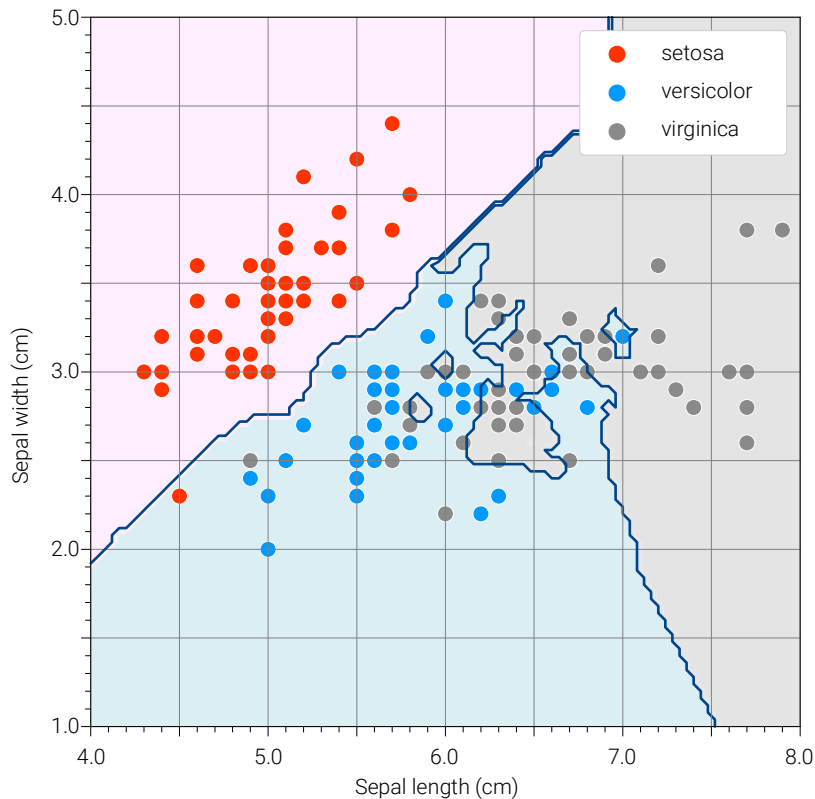


图 4. 根据花萼长度、花萼宽度，用 k -NN 算法确定决策边界

- a** 利用 `sklearn.datasets.load_iris()` 加载了鸢尾花数据集。本书前文介绍过，在 `scikit-learn` 中，`datasets` 模块提供了一些经典的示例数据集。
- b** 提取了鸢尾花数据集的前两列——花萼长度、花萼宽度——作为分类特征。
- c** 提取鸢尾花分类标签。
- d** 用 `numpy.meshgrid()` 生成网格化数据，这些就是用来预测分类的查询点。
- e** 用 `matplotlib.colors.ListedColormap()` 创建离散色谱，即颜色映射，展示鸢尾花预测分类的区域。
- f** 用 `sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(k_neighbors)` 创建了一个 k 最近邻分类器对象 `kNN`，并将 `k_neighbors` 作为参数传递给这个分类器。这里的 `k_neighbors` 指定了算法中要使用的最近邻居数量。
- g** 这行代码用训练数据 X 和相应的标签 y 来训练 k 最近邻分类器 `kNN`。在训练过程中，分类器会学习如何根据特征向量 X 将其分配到相应的标签 y 上。
- h** 利用 `numpy.c_()` 将两个一维数组按列合并，形成一个新的二维数组，即查询点。`numpy.ravel()` 函数将二维数组展平成一维数组。
- i** 这行代码用之前训练好的 k 最近邻分类器 `kNN` 对查询点进行预测，得到预测的标签 `y_predict`。
- j** 利用 `numpy.reshape()` 将预测的标签 `y_predict` 调整为与 `xx1` 相同形状，以便后续可视化。
- k** 利用 `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制分类区域。
- l** 利用 `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制分类决策边界。
- m** 利用 `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图展示鸢尾花数据集。

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
from matplotlib.colors import ListedColormap
from sklearn import neighbors, datasets

# 导入并整理数据
a iris = datasets.load_iris()
b X = iris.data[:, :2]
c y = iris.target
# 生成网格化数据
x1_array = np.linspace(4, 8, 101)
x2_array = np.linspace(1, 5, 101)
d xx1, xx2 = np.meshgrid(x1_array, x2_array)
# 创建色谱
rgb = [[255, 238, 255],
        [219, 238, 244],
        [228, 228, 228]]
rgb = np.array(rgb)/255.
e cmap_light = ListedColormap(rgb)
cmap_bold = [[255, 51, 0],
              [0, 153, 255],
              [138, 138, 138]]
cmap_bold = np.array(cmap_bold)/255.
k_neighbors = 4 # 定义kNN近邻数量k
# 创建kNN分类器对象
f kNN = neighbors.KNeighborsClassifier(k_neighbors)
g kNN.fit(X, y) # 用训练数据训练kNN
h q = np.c_[xx1.ravel(), xx2.ravel()]
# 用kNN对一系列查询点进行预测
i y_predict = kNN.predict(q)
j y_predict = y_predict.reshape(xx1.shape)
# 可视化
fig, ax = plt.subplots()
k plt.contourf(xx1, xx2, y_predict, cmap=cmap_light)
l plt.contour(xx1, xx2, y_predict, levels=[0, 1, 2],
              colors=np.array([0, 68, 138])/255.)
m sns.scatterplot(x=X[:, 0], y=X[:, 1],
                  hue=iris.target_names[y],
                  ax = ax,
                  palette=dict(setosa=cmap_bold[0, :],
                              versicolor=cmap_bold[1, :],
                              virginica=cmap_bold[2, :]),
                  alpha=1.0,
                  linewidth = 1, edgecolor=[1, 1, 1])
plt.xlim(4, 8); plt.ylim(1, 5)
plt.xlabel(iris.feature_names[0])
plt.ylabel(iris.feature_names[1])
ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25,
        color=[0.5, 0.5, 0.5])
ax.set_aspect('equal', adjustable='box')

```

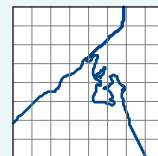
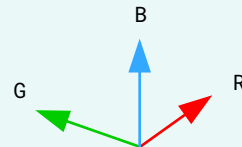


图 5. 根据花萼长度、花萼宽度，用 k-NN 算法确定决策边界，代码

32.3 高斯朴素贝叶斯分类

高斯朴素贝叶斯分类 (Gaussian Naive Bayes, GNB) 是一种基于贝叶斯定理 (Bayes' theorem) 的分类算法。



什么是贝叶斯定理?

贝叶斯定理是一种概率论中用于计算条件概率的重要公式。它描述了在已知某个条件下，另一事件发生的概率。根据贝叶斯定理，我们可以通过已知的先验概率和条件概率，来计算更新后的后验概率。这个定理在统计学、机器学习和人工智能等领域广泛应用，尤其在贝叶斯推断和贝叶斯分类中起着重要作用。

贝叶斯定理、贝叶斯分类、贝叶斯推断中有两个重要概念——先验概率 (prior probability)、后验概率 (posterior probability)。

先验概率是指在考虑任何新证据之前，我们对一个事件或假设的概率的初始估计。它基于以前的经验、先前的观察或领域知识。这种概率是“先验”的，因为它不考虑新数据或新证据，只是基于我们事先已经了解的信息。先验概率可以帮助我们在没有新数据时做出初步的估计。

假设我们要研究某地区的流感发病率。在流感季节之前，我们可能会查阅历史数据、了解流感传播的模式以及人口的健康状况，从而得出在流感季节中某人患上流感的初始估计概率，这就是先验概率。

后验概率是指在考虑了新证据或数据后，我们对一个事件或假设的概率进行更新后的估计。在得到新的信息后，我们根据贝叶斯定理来更新先验概率，以得到后验概率。贝叶斯定理将先验概率和新的证据结合起来，提供了一个更准确的概率估计。

在流感季节中，我们开始收集实际发病数据，比如每天有多少人确诊患上流感。根据这些新数据，我们可以使用贝叶斯定理来更新先前的先验概率，得到一个更准确的后验概率，以更好地预测未来发病率或做出相关决策。

图 6 所示为高斯朴素贝叶斯分类的流程图。

高斯朴素贝叶斯分类假设每个特征在给定类别下是条件独立的，即给定类别的情况下，每个特征与其他特征之间条件独立。这便是高斯朴素贝叶斯分类中“朴素”两个字的来由。然后，将每个类别的特征分布建模为高斯分布，这则是高斯朴素贝叶斯分类中“高斯”两个字的来由。

以图 6 为例，给定标签为 C_1 (红色点)，分别独立获得 $f_{X1|Y}(x_1 | C_1)$ 和 $f_{X2|Y}(x_2 | C_1)$ 。假设条件独立， $f_{Y,X1,X2}(C_1, x_1, x_2) = p_Y(C_1) \cdot f_{X1|Y}(x_1 | C_1) \cdot f_{X2|Y}(x_2 | C_1)$ 。

大家如果对上述内容有疑惑的话，请参考鸢尾花书《统计至简》第 18、19 章。

在训练时，算法从训练数据中学习每个类别的各个特征的 (条件) 均值和方差，用于计算每个特征在该类别下的概率密度函数。

当有新的未标记样本输入时，算法将计算该样本在每个类别下的条件概率 (后验概率)，并选择具有最高概率的类别作为预测结果。

高斯朴素贝叶斯分类算法的优点是简单快速、易于实现和适用于高维数据。它还能够处理连续型数据，因为它假设数据分布是高斯分布。

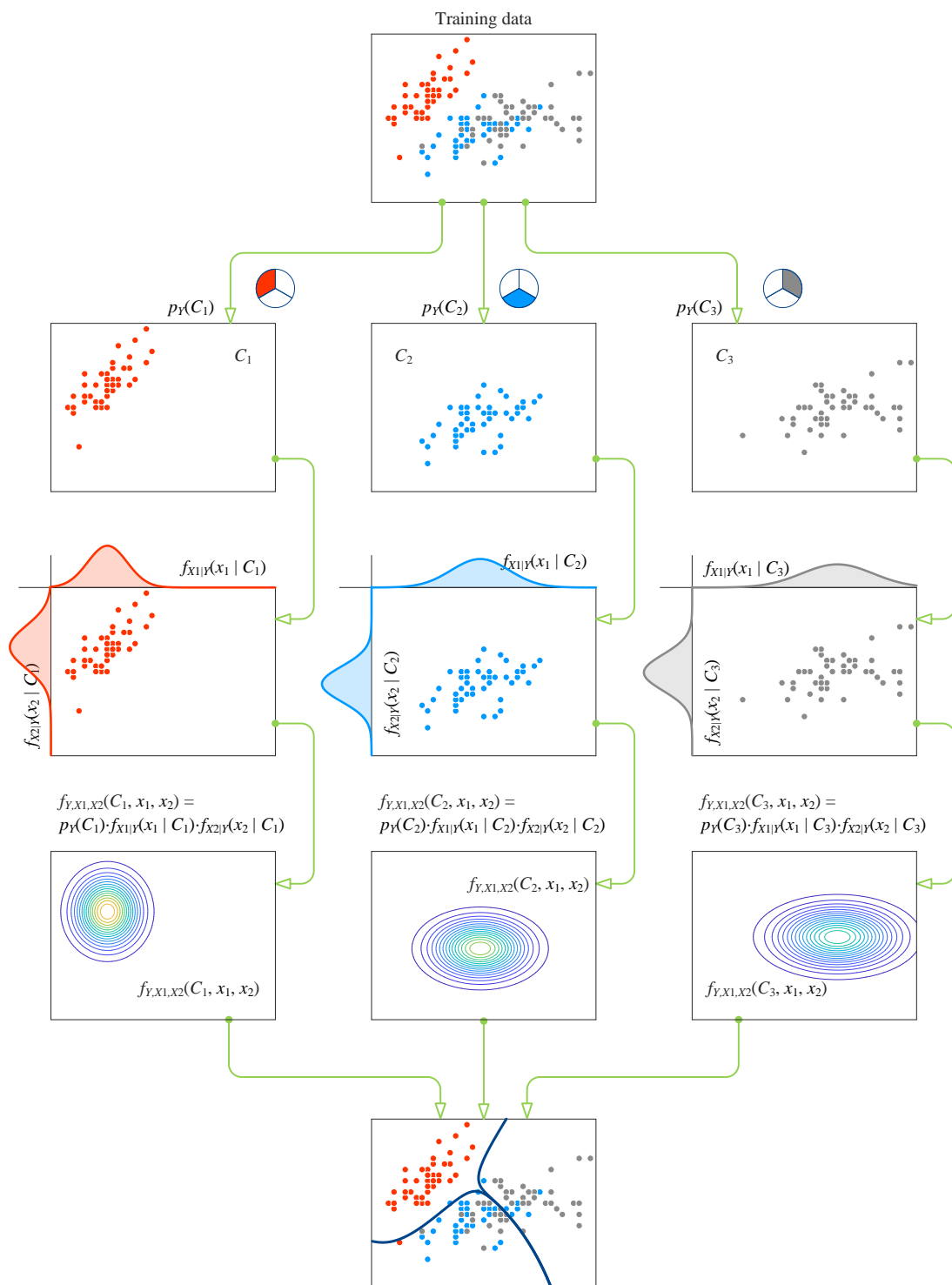


图 6. 高斯朴素贝叶斯分类过程

图 7 所示为利用高斯朴素贝叶斯分类算法获得的决策边界。图 8 所示为高斯朴素贝叶斯分类算法部分代码，请大家用图 8 替换图 5 对应语句。

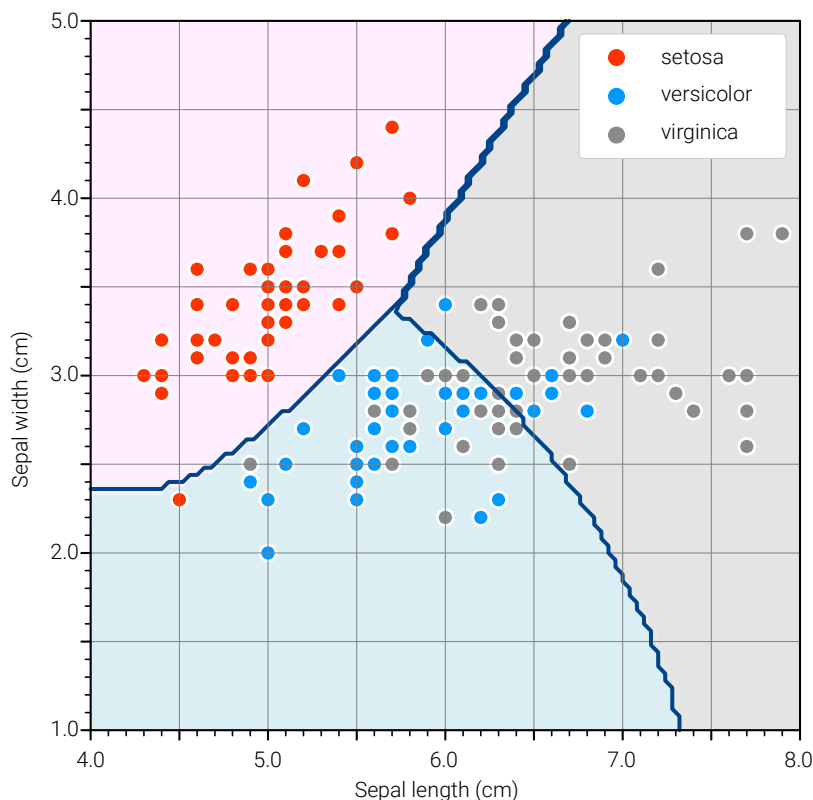


图 7. 根据花萼长度、花萼宽度，用高斯朴素贝叶斯算法确定决策边界

```

a from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
   # 创建高斯朴素贝叶斯分类器对象
b gnb = GaussianNB()
   # 用训练数据训练kNN
   gnb.fit(X, y)
   # 用高斯朴素贝叶斯分类器对一系列查询点进行预测
   y_predict = gnb.predict(q)

```

图 8. 用高斯朴素贝叶斯算法确定决策边界，部分代码

32.4 支持向量机

图 9 所示为支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 核心思路。

如图 9 所示，一片湖面左右散布着蓝色 ● 红色 ● 礁石，游戏规则是，皮划艇以直线路径穿越水道，保证船身恰好紧贴礁石。寻找一条路径，让该路径通过的皮划艇宽度最大。很明显，图 9 (b) 中规划的路径好于图 9 (a)。

图 9 (b) 中加黑圈 ○ 的五个点，就是所谓的**支持向量** (support vector)。

图9中深蓝色线，便是**决策边界**，也称**分离超平面** (separating hyperplane)。特别提醒大家注意一点，加黑圈。支持向量确定决策边界位置；其他数据并没有起到任何作用。因此，SVM 对于数据特征数量远高于数据样本量的情况也有效。

图9中两条虚线之间宽度叫做**间隔** (margin)。支持向量机的优化目标为——间隔最大化。

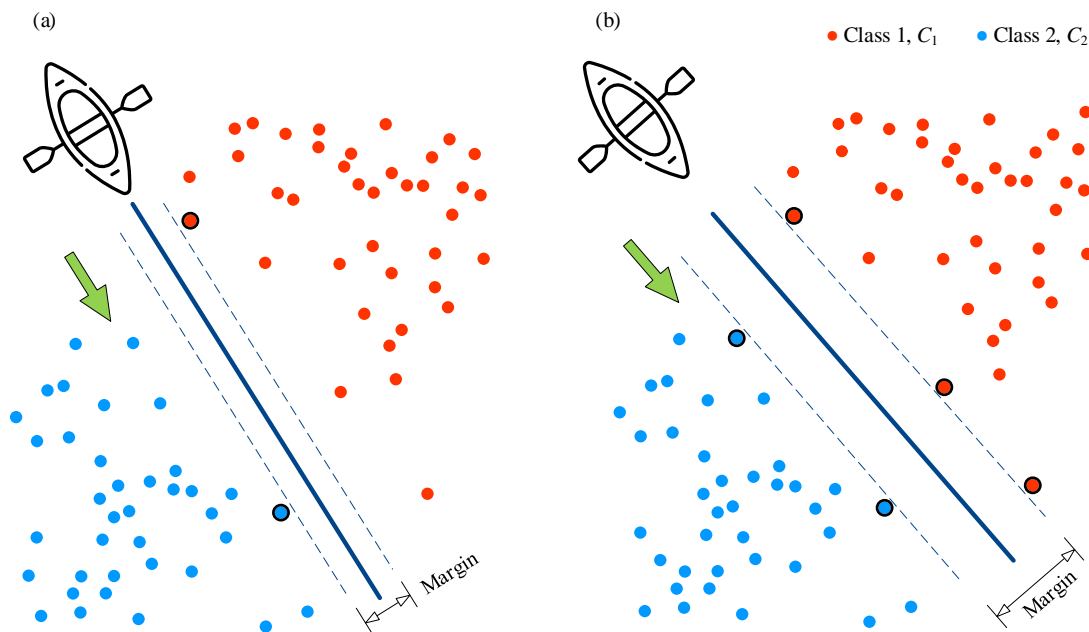


图9. 支持向量机原理

从数据角度，图9两类数据用一条直线便可以分割开来，这种数据叫做**线性可分** (linearly separable)。线性可分问题采用**硬间隔** (hard margin)；白话说，硬间隔指的是，间隔内没有数据点。

实践中，并不是所有数据都是线性可分。多数时候，数据**线性不可分** (non-linearly separable)。如图10所示，不能找到一条直线将蓝色●红色●数据分离。

对于线性不可分问题，就要引入两种方法——**软间隔** (soft margin) 和**核技巧** (kernel trick)。

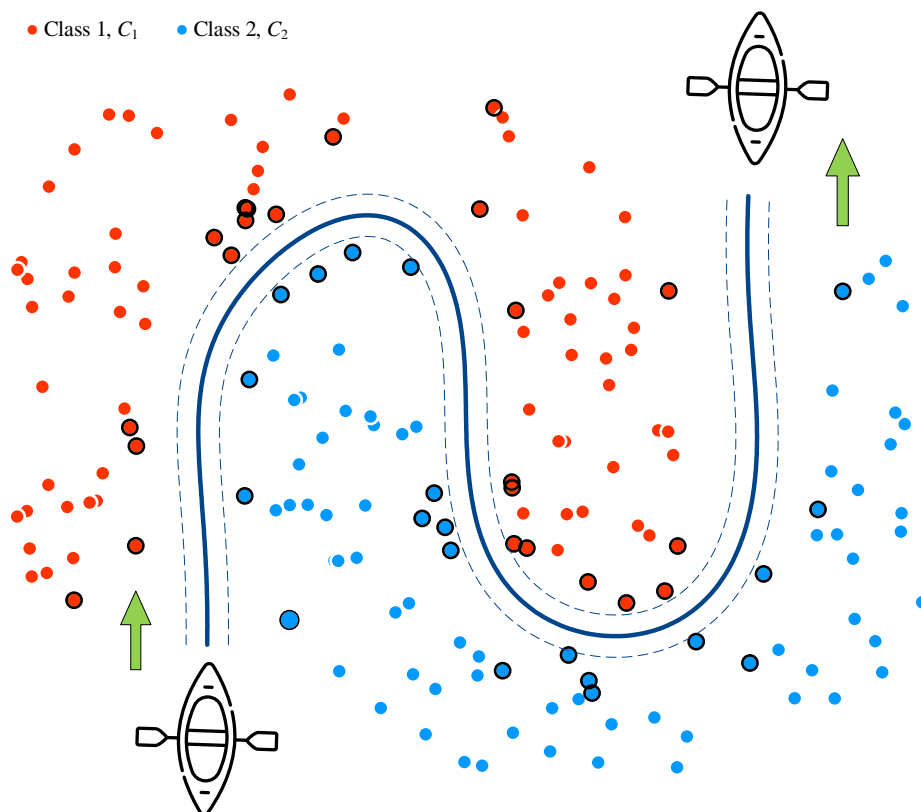


图 10. 线性不可分数据

白话说，如图 11 所示，软间隔相当于一个缓冲区 (buffer zone)。软间隔存在时，用决策边界分离数据时，有数据点侵入间隔，甚至超越间隔带。

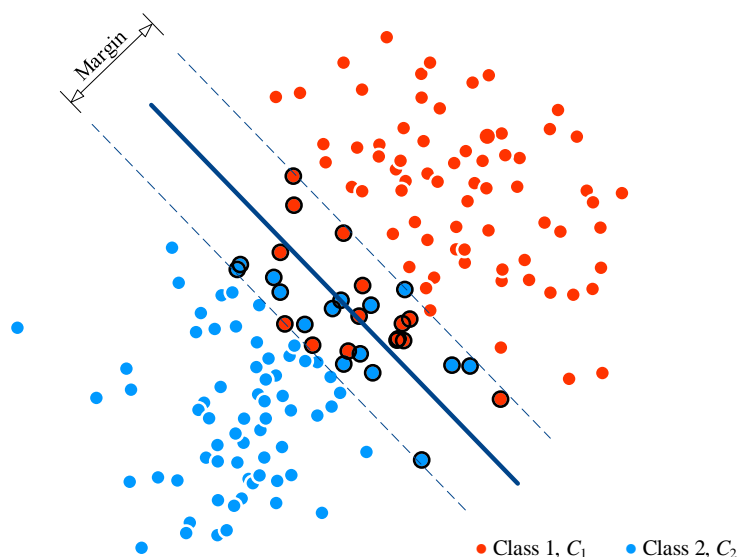


图 11. 软间隔

图 12 所示用支持向量机确定的决策边界。图 13 为支持向量机 (线性核) 算法部分代码, 请大家用图 13 替换图 5 对应语句。线性核是 SVM 中最简单的核函数之一。它适用于处理线性可分的数据集, 即可以通过一个直线 (在二维空间中) 或一个超平面 (在高维空间中) 将不同类别的样本点分开。

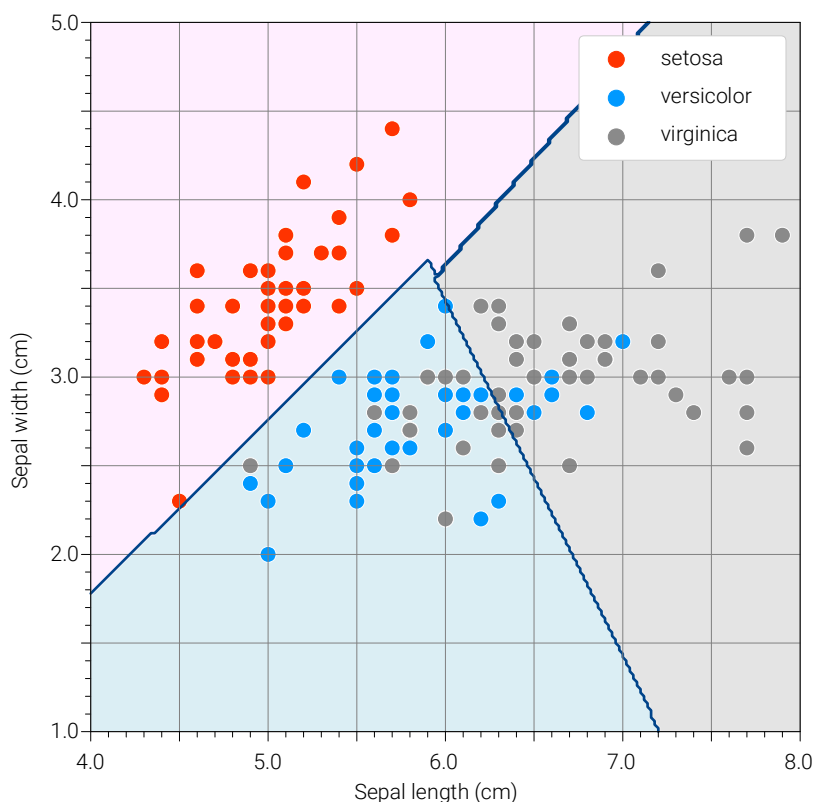


图 12. 根据花萼长度、花萼宽度, 用支持向量机 (线性核, 默认) 算法确定决策边界

```
a from sklearn import svm
# 创建支持向量机 (线性核) 分类器对象
b SVM = svm.SVC(kernel='linear')
# 用训练数据训练kNN
SVM.fit(X, y)
# 用支持向量机 (线性核) 分类器对一系列查询点进行预测
y_predict = SVM.predict(q)
```

图 13. 用支持向量机 (线性核, 默认) 算法确定决策边界, 部分代码

32.5 核技巧

核技巧将数据映射到高维特征空间, 相当于数据升维。如图 14 所示, 样本数据有两个特征, 用平面可视化数据点位置。很明显图 14 给出的原始数据线性不可分。

采用核技巧，将图 14 二维数据，投射到三维核曲面上；很明显，在这个高维特征空间，容易找到某个水平面，将蓝色 ● 红色 ● 数据分离。利用核技巧，分离线性不可分数据变得更容易。

通常，采用支持向量机解决线性不可分问题，需要并用软间隔和核技巧。如图 15 所示，SVM 分类环形数据中，核技巧配合软间隔。

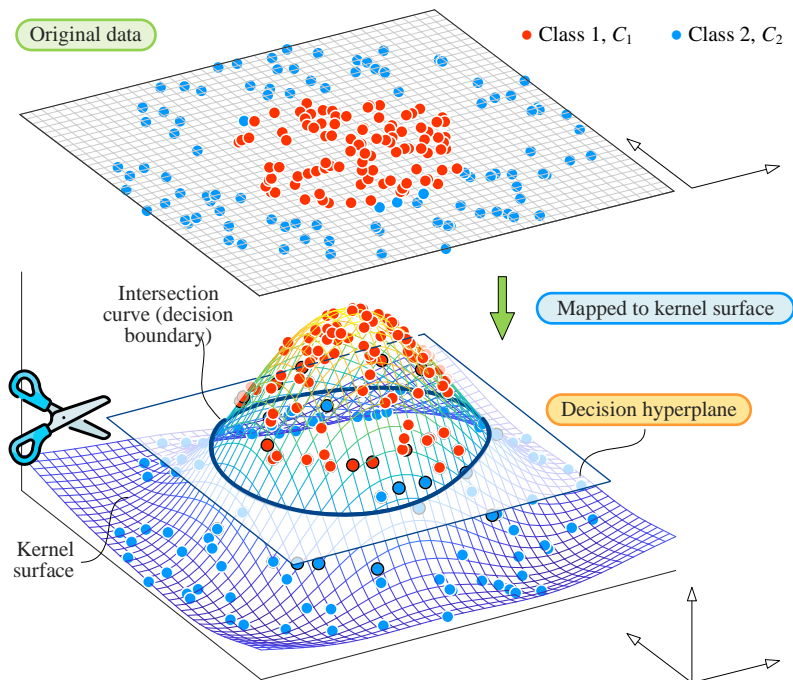


图 14. 核技巧原理

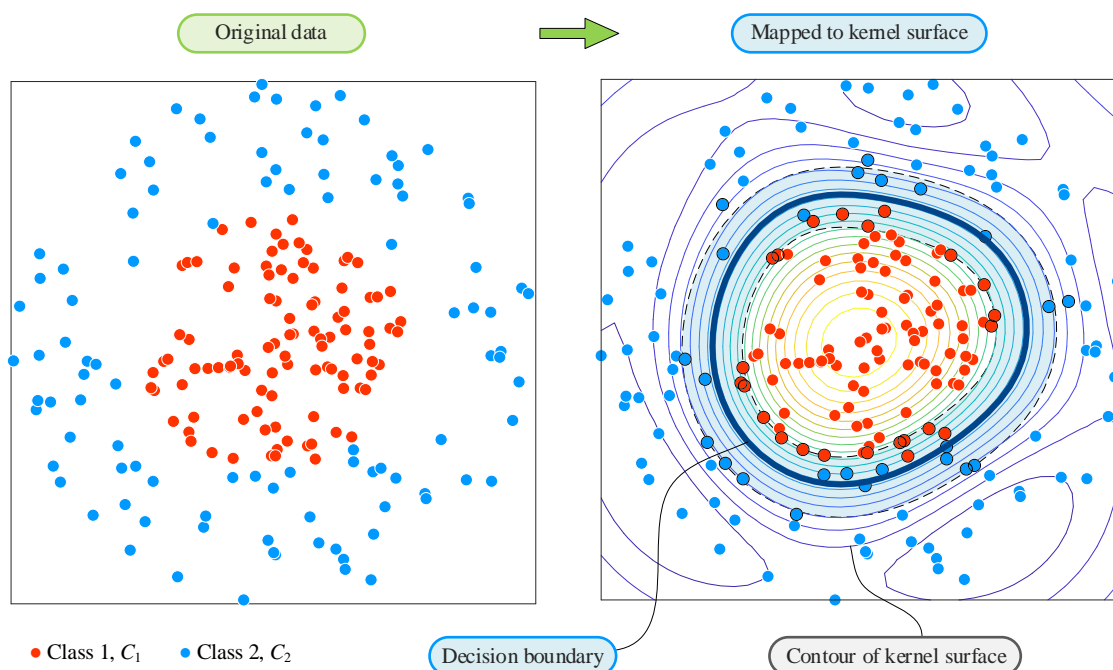


图 15. 核技巧配合软间隔

高斯核，也称为径向基核 (Radial Basis Function Kernel)，是 SVM 中常用的非线性核函数。它能够将数据映射到无穷维的特征空间，从而在低维空间中不可分的数据变得线性可分。

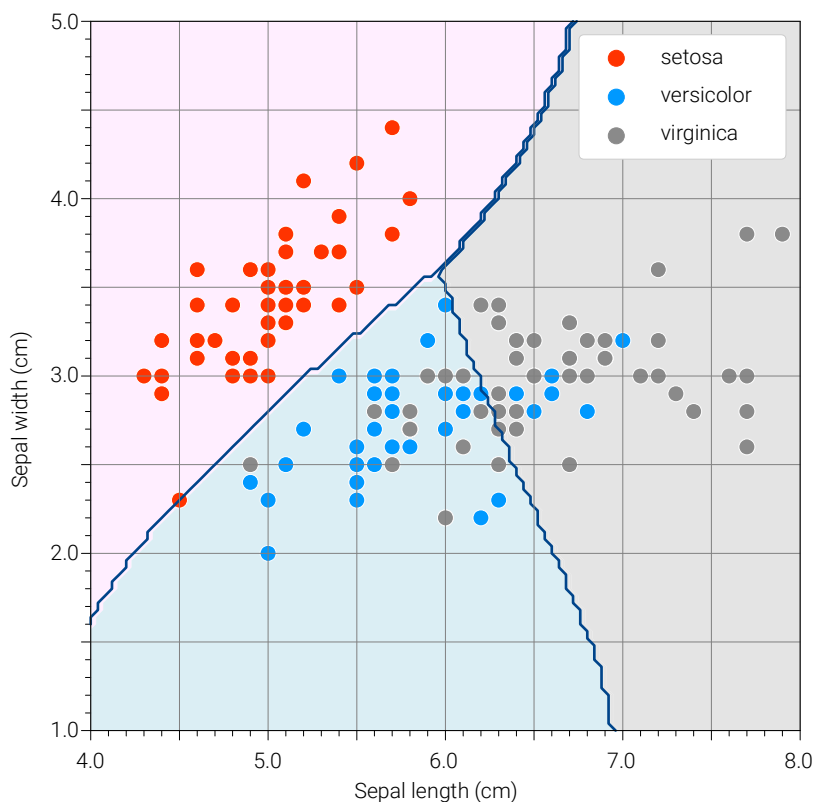


图 16. 根据花萼长度、花萼宽度，用支持向量机 (高斯核) 算法确定决策边界

```

a from sklearn import svm
# 创建支持向量机 (高斯核) 分类器对象
b SVM = svm.SVC(kernel='rbf', gamma='auto')
# 用训练数据训练knn
SVM.fit(X, y)
# 用支持向量机 (线性核) 分类器对一系列查询点进行预测
y_predict = SVM.predict(q)

```

图 17. 用支持向量机 (高斯核，默认) 算法确定决策边界，部分代码