Задание:

1. Выберите набор данных (датасет) для решения задачи классификации или регресии.
2. В случае необходимости проведите удаление или заполнение пропусков и кодирование категориальных признаков.
3. С использованием метода train_test_split разделите выборку на обучающую и тестовую.
4. Обучите модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оцените качество модели с помощью трех подходящих для задачи метрик.
5. Постройте модель и оцените качество модели с использованием кросс-валидации. Проведите эксперименты с тремя различными стратегиями кросс-валидации.
6. Произведите подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации.
7. Повторите пункт 4 для найденного оптимального значения гиперпараметра K. Сравните качество полученной модели с качеством модели, полученной в пункте 4.
8. Постройте кривые обучения и валидации.

Датасет: wine

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.model_selection import learning_curve, validation_curve
from sklearn.model_selection import KFold, RepeatedKFold, LeaveOneOut, LeavePOut, Shuffle
from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate
from sklearn.metrics import roc_curve,confusion_matrix, roc_auc_score, accuracy_score, ba

from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import classification_report

import warnings

warnings.filterwarnings('ignore')
plt.style.use('ggplot')
```

```
# Считывание данных
data = pd.read_csv('Wine.csv', sep=";")
data.head()
```

	Class	Alcohol	Malic acid	Ash	Alcalinity of ash	Magnesium	Total phenols	Flavanoids	Nonfla pl
0	1	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	
1	1	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	
2	1	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	
3	1	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	

```
# Типы данных
data.dtypes
```

```
Class                           int64
Alcohol                       float64
Malic acid                    float64
Ash                           float64
Alcalinity of ash             float64
Magnesium                       int64
Total phenols                 float64
Flavanoids                    float64
Nonflavanoid phenols          float64
Proanthocyanins               float64
Color intensity               float64
Hue                           float64
OD280/OD315 of diluted wines  float64
Proline                         int64
dtype: object
```

```
# Проверка на пустые значения
for col in data.columns:
    print('{} - {}'.format(col, data[data[col].isnull()].shape[0]))
```

```
Class - 0
Alcohol - 0
Malic acid - 0
Ash - 0
Alcalinity of ash - 0
Magnesium - 0
Total phenols - 0
Flavanoids - 0
Nonflavanoid phenols - 0
Proanthocyanins - 0
Color intensity - 0
Hue - 0
OD280/OD315 of diluted wines - 0
Proline - 0
```

```
# Размерность данных
data.shape
```

```
(178, 14)
```

Разделим выборку при помощи train_test_split

```
CLASS = 'Class'
RANDOM_STATE = 17
TEST_SIZE = 0.3

X = data.drop(CLASS, axis=1).values
Y = data[CLASS].values

X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_size=TEST_SIZE, random_sta
print('X_train: {}'.format(X_train.shape))
print('X_test: {}'.format(X_test.shape))
```

```
X_train: (124, 13)
X_test: (54, 13)
```

Обучение ан различном числе соседей и оценка качества

```
# Задаем число соседей
NEIGHBOURS_MAX_COUNT = 50
neighbours_count = np.arange(1, NEIGHBOURS_MAX_COUNT+1)

train_accuracy =np.empty(NEIGHBOURS_MAX_COUNT)
test_accuracy = np.empty(NEIGHBOURS_MAX_COUNT)

for i, k in enumerate(neighbours_count):
    # Настройка классификатора Knn с K соседями
    knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = k)

    # Обучить модель
    knn.fit(X_train, Y_train)

    # Вычислить точность на тренировочном наборе
    train_accuracy[i] = knn.score(X_train, Y_train)

    # Вычислить точность на тестовом наборе
    test_accuracy[i] = knn.score(X_test, Y_test)

# Построить набор
plt.title('k-NN различное число соседей')
plt.plot(neighbours_count, test_accuracy, label='Тестовая точность')
plt.plot(neighbours_count, train_accuracy, label='Обучающая точность')
plt.legend()
plt.xlabel('Число соседей')
plt.ylabel('Точность')
plt.show()
```


```
# Обучение и оценка качества
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = 20)
knn.fit(X_train, Y_train)

Y_pred = knn.predict(X_test)
print(classification_report(Y_test, Y_pred))
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           1       0.88      0.83      0.86        18
           2       0.76      0.76      0.76        21
           3       0.50      0.53      0.52        15
```

Постройте модель и оцените качество модели с использованием кросс-валидации

```
CROSS_VALIDATOR_GENERATOR = 5
N_NEIGHBOURS_TAG = 'n_neighbors'

param_grid = {N_NEIGHBOURS_TAG : np.arange(1, NEIGHBOURS_MAX_COUNT + 1)}
knn = KNeighborsClassifier()

knn_cv= GridSearchCV(knn, param_grid, cv = CROSS_VALIDATOR_GENERATOR)
knn_cv.fit(X_train,Y_train)
```

```
knn_cv.best_score_
```

```
0.7741935483870968
```

```
Y_pred = knn_cv.predict(X_test)
print(classification_report(Y_test, Y_pred))
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           1       0.89      0.89      0.89        18
           2       0.71      0.71      0.71        21
           3       0.47      0.47      0.47        15

   micro avg       0.70      0.70      0.70        54
   macro avg       0.69      0.69      0.69        54
weighted avg       0.70      0.70      0.70        54
```

```
knn_cv.best_params_
```

```
{'n_neighbors': 13}
```

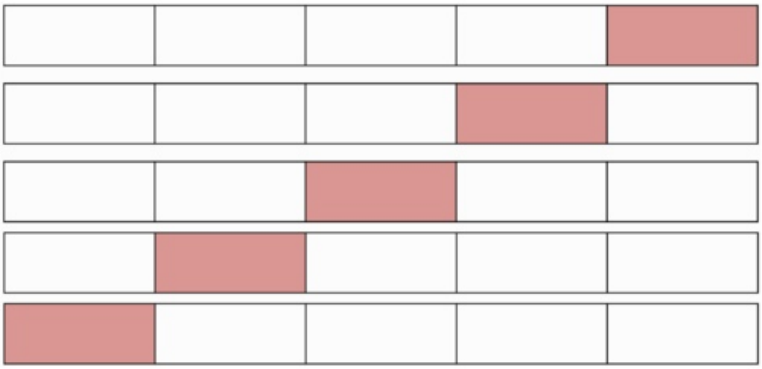
K-fold Данная стратегия работает в соответствии с определением кросс-валидации.

Каждой стратегии в scikit-learn ставится в соответствии специальный класс-итератор, который может быть указан в качестве параметра cv функций cross_val_score и cross_validate.

k-fold кросс-валидация [править]

1. Обучающая выборка разбивается на k непересекающихся одинаковых по объему частей;
2. Производится k итераций. На каждой итерации происходит следующее:
    1. Модель обучается на $k-1$ части обучающей выборки;
    2. Модель тестируется на части обучающей выборки, которая не участвовала в обучении.

Каждая из k частей единожды используется для тестирования. Как правило, $k = 10$ (5 в случае малого размера выборки).



$$T^l = F_1 \cup \cdots \cup F_k, |F_i| \approx \frac{l}{k},$$

$$CV_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} Q(\mu(T^l \setminus F_i), F_i) \to min$$

```
FOLDS_COUNT = 5
BEST_PARAMS = knn_cv.best_params_[N_NEIGHBOURS_TAG]

knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = BEST_PARAMS)
cv = KFold(n_splits = FOLDS_COUNT)
scores = cross_val_score(knn, X, Y, cv = cv)

np.mean(scores)
```

```
0.5263492063492062
```

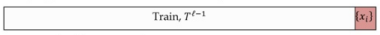
Leave One Out (LOO) В тестовую выборку помещается единственный элемент (One Out). Количество фолдов в этом случае определяется автоматически и равняется количеству элементов.

Данный метод более ресурсоемкий чем KFold.

Существует эмпирическое правило, что вместо Leave One Out лучше использовать KFold на 5 или 10 фолдов.

Кросс-валидация по отдельным объектам (Leave-One-Out) [править]

Выборка разбивается на $l-1$ и 1 объект l раз.



$LOO = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} Q(\mu(T^l \setminus p_i), p_i) \to min$, где $p_i = (x_i, y_i)$.

Преимущества LOO в том, что каждый объект ровно один раз участвует в контроле, а длина обучающих подвыборок лишь на единицу меньше длины полной выборки.

Недостатком LOO является большая ресурсоёмкость, так как обучаться приходится L раз. Некоторые методы обучения позволяют достаточно быстро перенастраивать внутренние параметры алгоритма при замене одного обучающего объекта другим. В этих случаях вычисление LOO удаётся заметно ускорить.

```
loo = LeaveOneOut()
loo.get_n_splits(X)

for train_index, test_index in loo.split(X):
   Y_train, Y_test = Y[train_index], Y[test_index]

knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = BEST_PARAMS)
scores = cross_val_score(knn, X, Y, cv = loo)

np.mean(scores)
```

```
0.6910112359550562
```

Repeated K-Fold

```
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = BEST_PARAMS)
cv = RepeatedKFold(n_splits = FOLDS_COUNT, n_repeats = 2)
scores = cross_val_score(knn, X, Y, cv = cv)

np.mean(scores)
```

```
0.6713492063492063
```

Постройте кривые обучения и валидации.

```
# Кривые обучения
def plot_learning_curve(estimator, title, X, y, ylim=None, cv=None,
                        n_jobs=None, train_sizes=np.linspace(.1, 1.0, 5)):

    plt.figure()
    plt.title(title)
    if ylim is not None:
        plt.ylim(*ylim)
    plt.xlabel("Training examples")
    plt.ylabel("Score")
    train_sizes, train_scores, test_scores = learning_curve(
        estimator, X, y, cv=cv, n_jobs=n_jobs, train_sizes=train_sizes)
    train_scores_mean = np.mean(train_scores, axis=1)
    train_scores_std = np.std(train_scores, axis=1)
    test_scores_mean = np.mean(test_scores, axis=1)
    test_scores_std = np.std(test_scores, axis=1)
    plt.grid()

    plt.fill_between(train_sizes, train_scores_mean - train_scores_std,
                     train_scores_mean + train_scores_std, alpha=0.1,
                     color="r")
    plt.fill_between(train_sizes, test_scores_mean - test_scores_std,
                     test_scores_mean + test_scores_std, alpha=0.1, color="g")
    plt.plot(train_sizes, train_scores_mean, 'o-', color="r",
             label="Training score")
    plt.plot(train_sizes, test_scores_mean, 'o-', color="g",
             label="Cross-validation score")

    plt.legend(loc="best")
    return plt


knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = 4)
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_size=TEST_SIZE, random_st

plot_learning_curve(knn, 'n_neighbors=4', X_train, Y_train, cv=5)
```

```
<module 'matplotlib.pyplot' from '/usr/local/lib/python3.6/dist-packages/matplotli
```


```
# Кривая валидации
def plot_validation_curve(estimator, title, X, y,
                          param_name, param_range, cv,
                          scoring="accuracy"):

    train_scores, test_scores = validation_curve(
        estimator, X, y, param_name=param_name, param_range=param_range,
        cv=cv, scoring=scoring, n_jobs=1)
    train_scores_mean = np.mean(train_scores, axis=1)
    train_scores_std = np.std(train_scores, axis=1)
    test_scores_mean = np.mean(test_scores, axis=1)
    test_scores_std = np.std(test_scores, axis=1)

    plt.title(title)
    plt.xlabel(param_name)
    plt.ylabel("Score")
    plt.ylim(0.0, 1.1)
    lw = 2
    plt.plot(param_range, train_scores_mean, label="Training score",
                 color="darkorange", lw=lw)
    plt.fill_between(param_range, train_scores_mean - train_scores_std,
                     train_scores_mean + train_scores_std, alpha=0.2,
                     color="darkorange", lw=lw)
    plt.plot(param_range, test_scores_mean, label="Cross-validation score",
                 color="navy", lw=lw)
    plt.fill_between(param_range, test_scores_mean - test_scores_std,
                     test_scores_mean + test_scores_std, alpha=0.2,
                     color="navy", lw=lw)
    plt.legend(loc="best")
    return plt

n_range = np.array(range(5,55,5))
plot_validation_curve(KNeighborsClassifier(n_neighbors=4), 'knn',
                      X_train, y_train,
                      param_name='n_neighbors', param_range=n_range,
                      cv=5, scoring="accuracy")
```