Введение в машинное обучение

Библиотека языка Питон Scikit-Learn

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

адаптировано для версии 0.20

Установка

http://scikit-learn.org/stable/install.html

входит во многие дистрибутивы

```
import sklearn as sk
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

Что есть

`sklearn.datasets`

генерация / загрузка данных

алгоритмы классификации, регрессии, кластеризации

`model_selection`

организация экспериментов для выбора модели, перебор параметров

`preprocessing`
`feature_extraction`

предобработка / подготовка данных / генерация признаков

Что есть, кроме хороших алгоритмов…

Перемешивание

Раньше

```
rng = np.random.RandomState(0)
permutation = rng.permutation(len(X))
X, y = X[permutation], y[permutation]
```

Сейчас

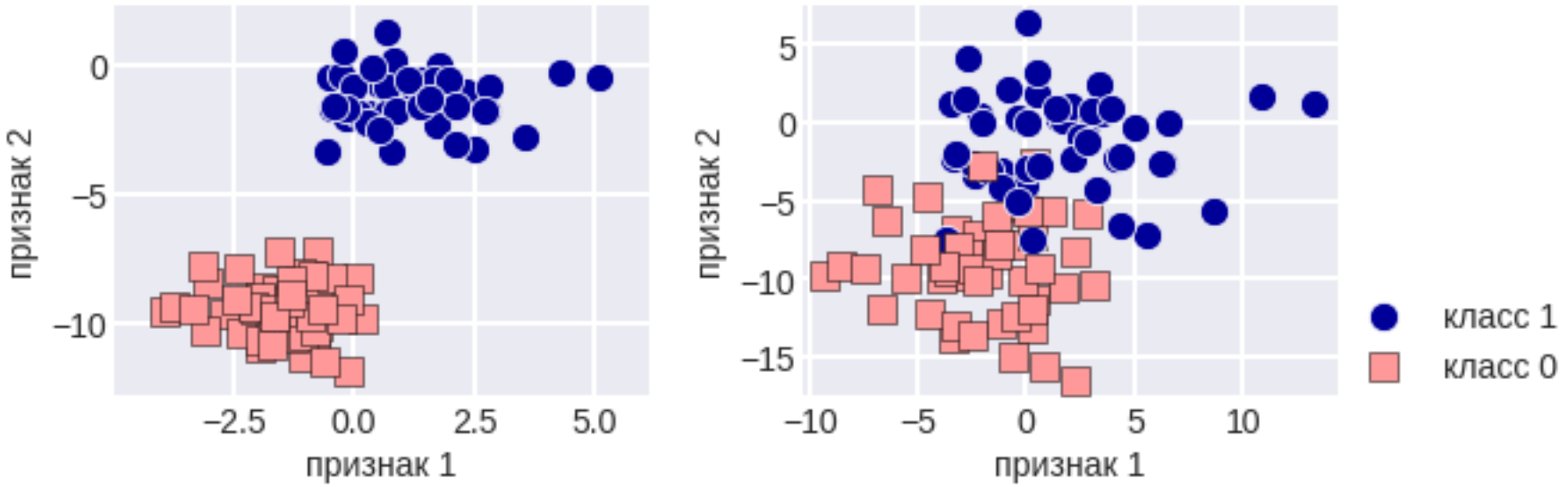
```
from sklearn.utils import shuffle
X, y = shuffle(X, y)
```

Разбиение на обучение и контроль – одна строчка

```
from sklearn.cross_validation import train_test_split
from sklearn.model_selection import train_test_split # с версии 0.20

train_X, test_X, train_y, test_y = train_test_split(X, y, train_size=0.5,
                                                    random_state=1999)
```

Встроенные датасеты (генераторы)

«Кучки»




```
from sklearn.datasets import make_blobs
X, y = make_blobs(centers=2, random_state=2)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
```

n_samples, n_features – **размеры**

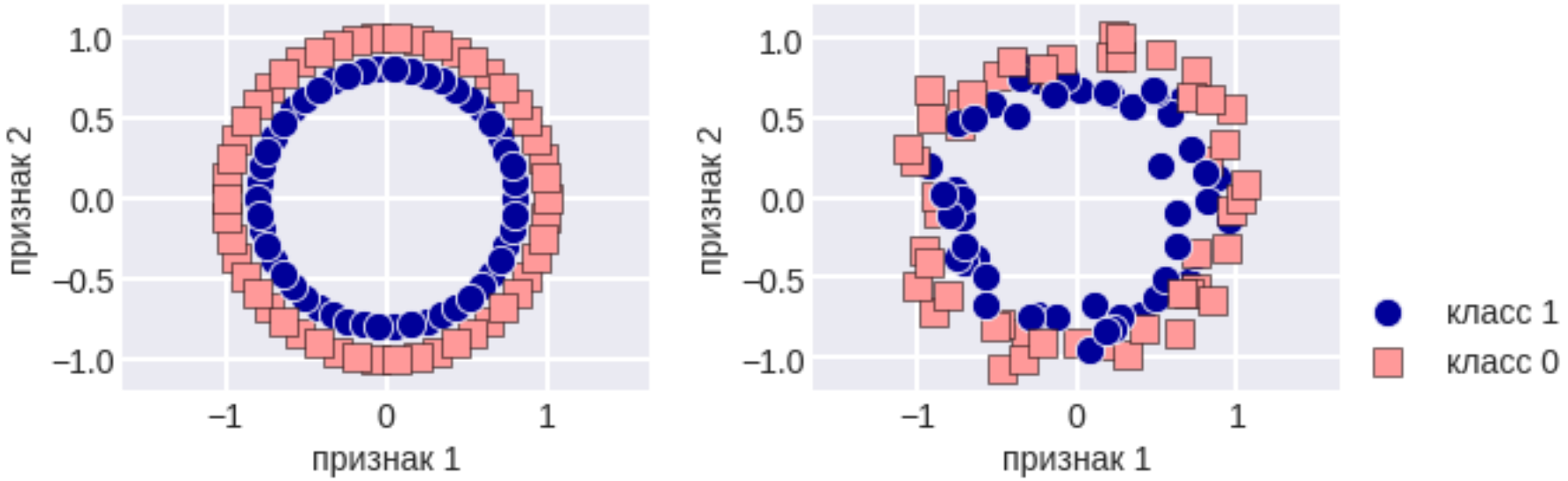
centers – **сколько кучек**

cluster_std – **дисперсия**

random_state – **инициализация генератора**

Встроенные датасеты (генераторы)

«Кольца»




```
from sklearn.datasets import make_circles
X, y = make_circles(noise=0.1, random_state=1)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
```

n_samples – **размеры**

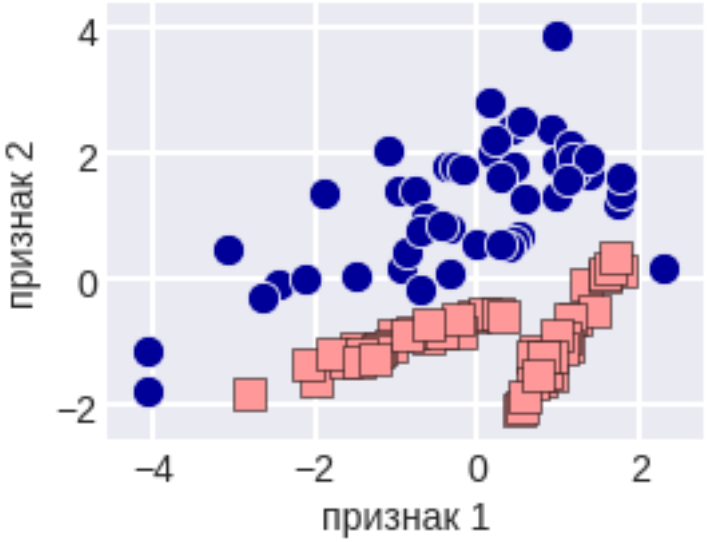
shuffle – **перемешивание**

noise – **дисперсия**

Встроенные датасеты (генераторы)

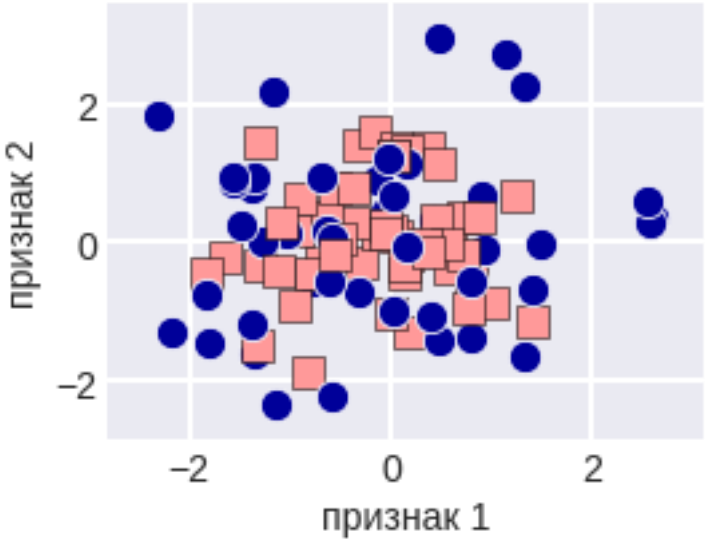
«Классификация»

```
make_classification(n_samples=100,
                    n_features=2,
                    n_informative=2,
                    n_redundant=0,
                    n_repeated=0,
                    n_clusters_per_class=2)
```



Из книги Хасти

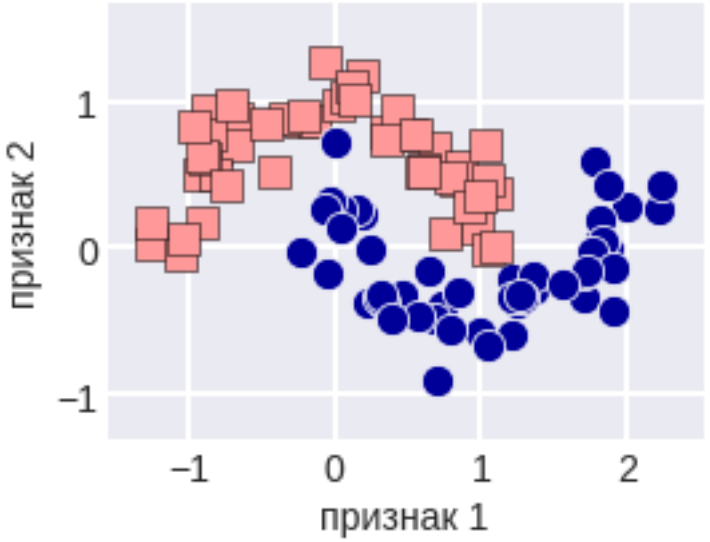
```
make_hastie_10_2(n_samples=100)
```



Встроенные датасеты (генераторы)

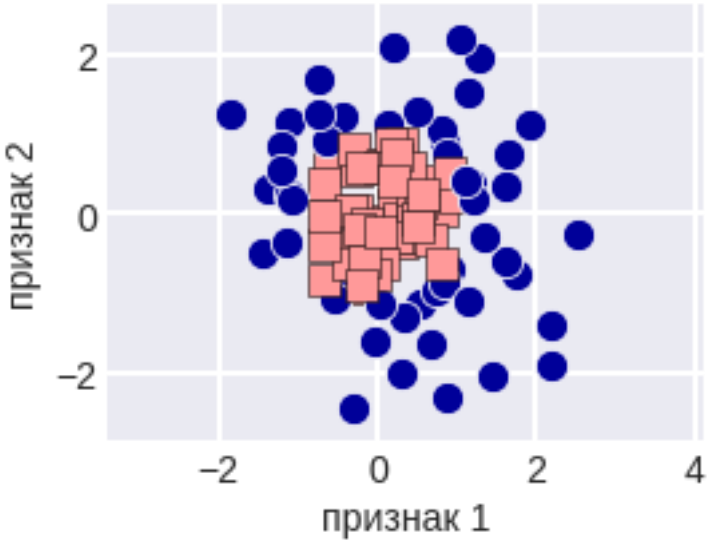
Два месяца

```
make_moons(n_samples=100,
           noise=0.15,
           random_state=1)
```



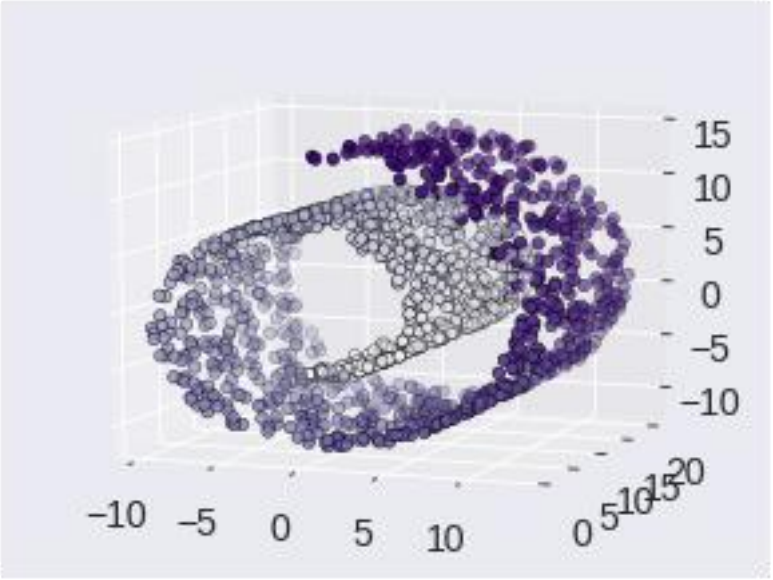
Квантили нормального распределения

```
make_gaussian_quantiles(n_classes=2,
                        random_state=1)
```



Встроенные датасеты (генераторы)

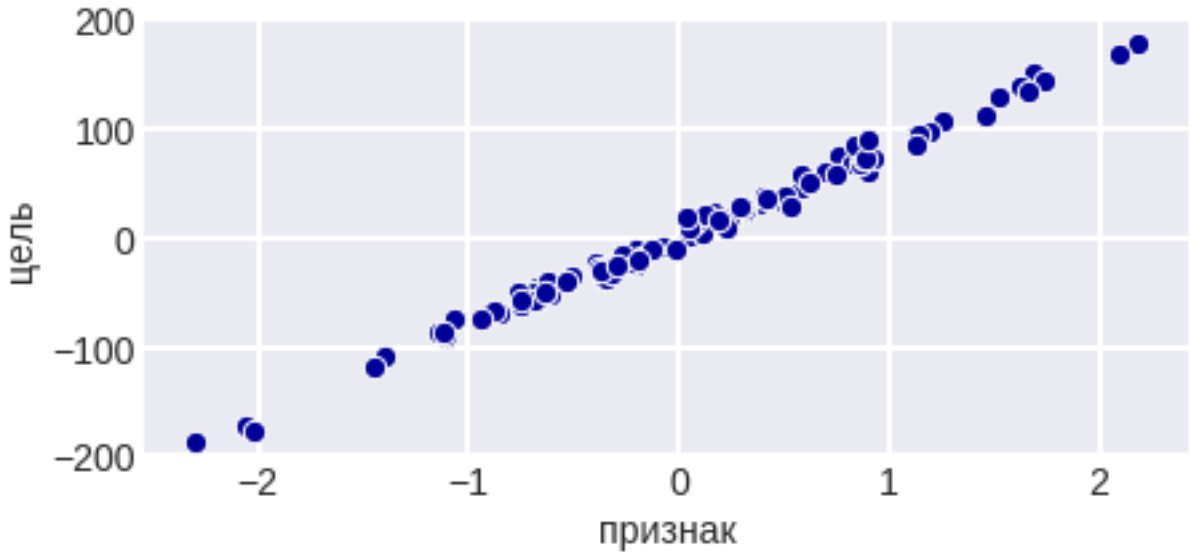
```
from sklearn.datasets import make_swiss_roll
n_samples = 1500
noise = 0.05
X, y = make_swiss_roll(n_samples, noise)
import mpl_toolkits.mplot3d.axes3d as p3

fig = plt.figure(figsize=(4, 3))
ax = p3.Axes3D(fig)
ax.view_init(10, -70)
ax.scatter(X[:, 0], X[:, 1], X[:, 2],
           s=20, c=y, cmap='Purples',
           edgecolor='k', linewidth=0.5)
```



Встроенные датасеты (генераторы)

Регрессия

```
from sklearn.datasets import make_regression
X, y = make_regression(n_samples=100, n_features=1,
                       n_informative=1, n_targets=1,
                       bias=0.0, effective_rank=None,
                       tail_strength=0.5, noise=7.0,
                       shuffle=True, coef=False, random_state=1)
```



разные регрессии:

```
datasets.make_friedman1
datasets.make_friedman2
datasets.make_friedman3
```

Встроенные датасеты (генераторы)

`make_multilabel_classification`

– многоклассовая задача с пересекающимися классами

`make_spd_matrix`
`make_sparse_spd_matrix`

– случайная симметричная положительно определённая матрица

`make_low_rank_matrix`

– матрица малого ранга

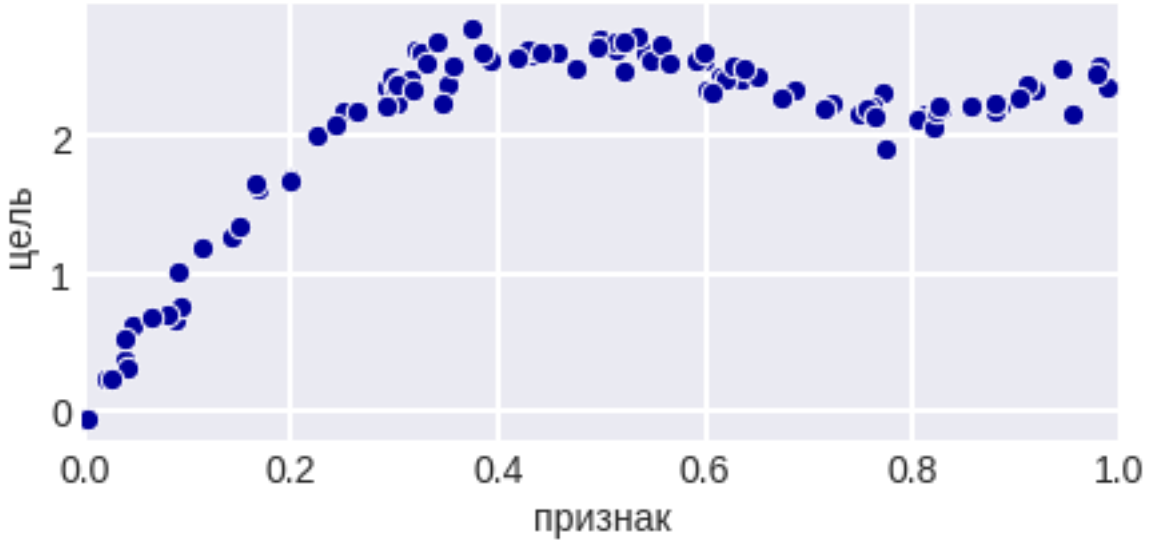
`make_sparse_uncorrelated`

– регрессия

```
X ~ N(0, 1)
y(X) = X[:, 0] + 2 * X[:, 1] - 2 * X[:, 2] - 1.5 * X[:, 3]
```

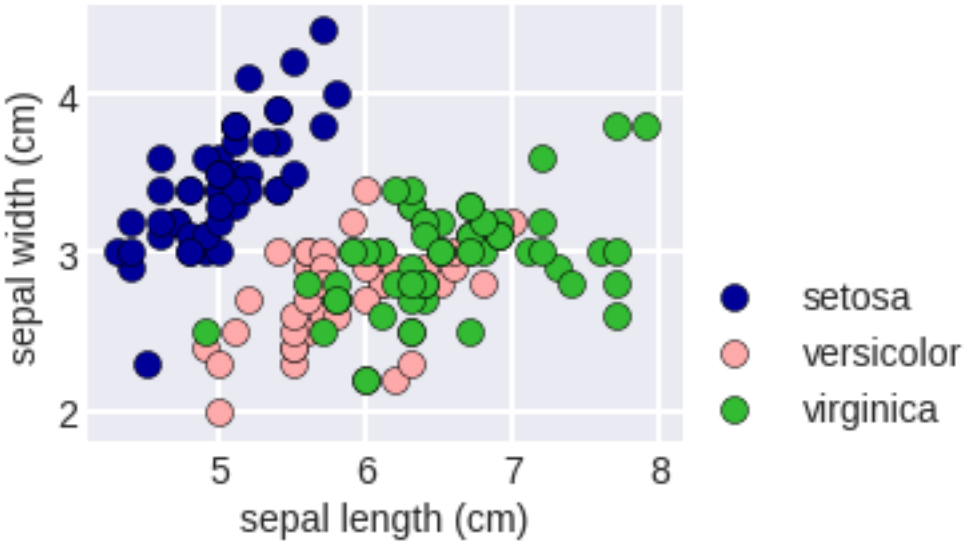
Ручная генерация данных

```
n_samples = 100
np.random.seed(10)
X = np.random.rand(n_samples)
Y = np.sin(5 * X) + 5 * np.log1p(X) + 0.1 * np.random.randn(n_samples)
```



Встроенные датасеты (загрузчики)

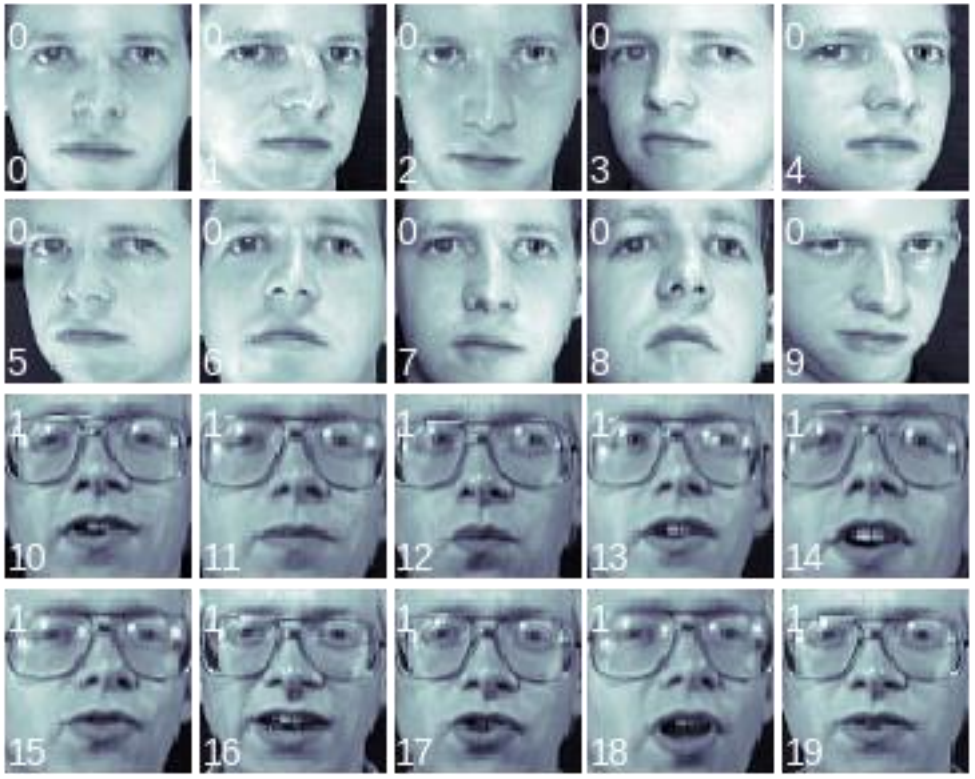
```
from sklearn import datasets
iris = datasets.load_iris()
X_iris, y_iris = iris.data, iris.target
```



	sepal length (cm)	sepal width (cm)	petal length (cm)	petal width (cm)
0	5.1	3.5	1.4	0.2
1	4.9	3.0	1.4	0.2
2	4.7	3.2	1.3	0.2
3	4.6	3.1	1.5	0.2
4	5.0	3.6	1.4	0.2

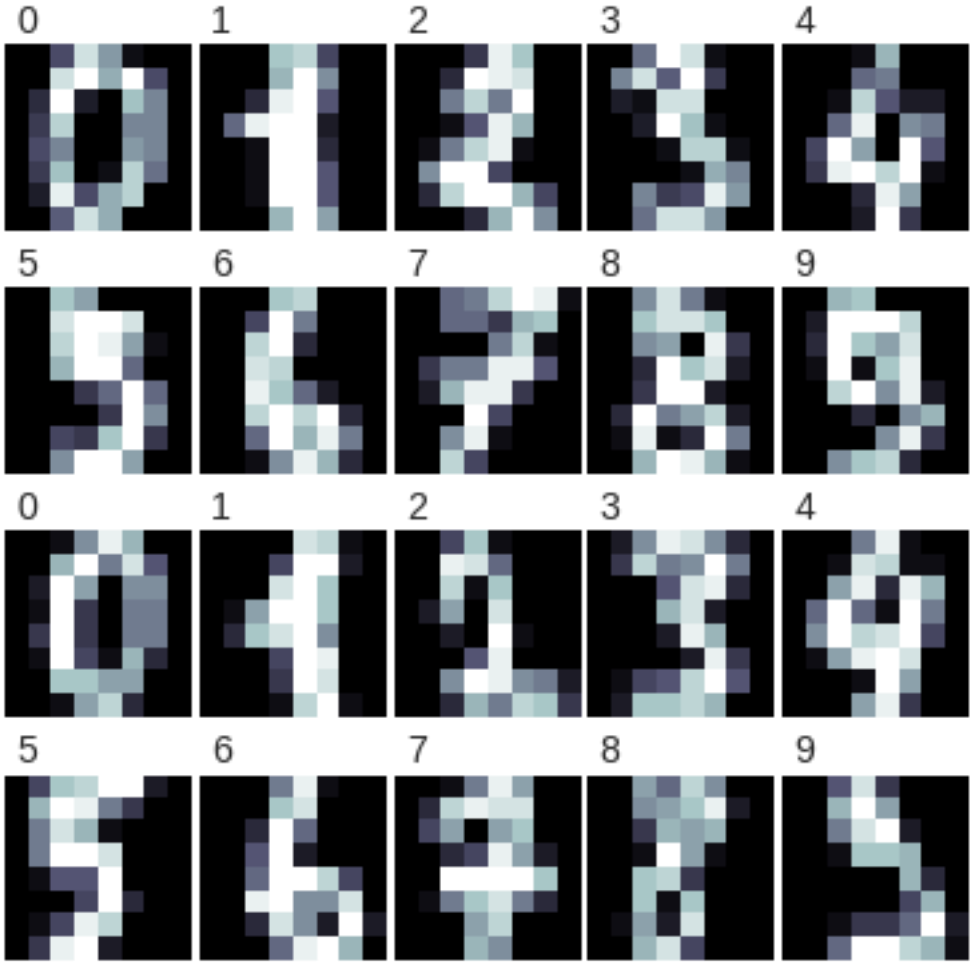
Встроенные датасеты (загрузчики)

```
from sklearn.datasets import fetch_olivetti_faces
faces = fetch_olivetti_faces()

print (faces.keys())
print (faces.images.shape)
print (faces.data.shape)
dict_keys(['data', 'images',
           'target', 'DESCR'])
(400, 64, 64)
(400, 4096)

print_faces(faces.images,
            faces.target, 20)

def print_faces(images, target, top_n):
    fig = plt.figure(figsize=(5, 5))
    fig.subplots_adjust(bottom=0, top=1, hspace=0.05, wspace=0.05)
    for i in range(top_n):
        p = fig.add_subplot(5, 5, i + 1, xticks=[], yticks=[])
        p.imshow(images[i], cmap=plt.cm.bone)
        p.text(0, 14, str(target[i]), color='white')
        p.text(0, 60, str(i), color='white')
```



Встроенные датасеты (загрузчики)

```
from sklearn.datasets import load_digits
digits = load_digits()
X_digits, y_digits = digits.data, digits.target
```



Встроенные датасеты (загрузчики)

```
from sklearn.datasets import fetch_20newsgroups
news = fetch_20newsgroups(subset='all')
print (type(news.data), type(news.target), type(news.target_names))
<class 'list'> <class 'numpy.ndarray'> <class 'list'>

print (news.target_names)
['alt.atheism', 'comp.graphics', 'comp.os.ms-windows.misc',
'comp.sys.ibm.pc.hardware', 'comp.sys.mac.hardware', ...

print (news.data[5])
From: tell@cs.unc.edu (Stephen Tell)
Subject: Re: subliminal message flashing on TV
Organization: The University of North Carolina at Chapel Hill
Lines: 25
NNTP-Posting-Host: rukbat.cs.unc.edu

In article <7480237@hpfcso.FC.HP.COM> myers@hpfcso.FC.HP.COM (Bob Myers)
writes:
>> Hi.  I was doing research on subliminal suggestion for a psychology
>> paper, and I read that one researcher flashed hidden messages on the
>> TV screen at 1/200ths of a second.  Is that possible?
```

Интерфейсы

У Scikit-learn единый способ использования всех методов.

Для всех моделей (estimator object) доступны следующие методы.

`model.fit()` – **настройка на данные (обучение)**

`model.fit(X, y)` – **для обучения с учителем (supervised learning)**

`model.fit(X)` – **для обучение без учителя (unsupervised learning)**

`model.predict`	`model.transform`
Classification	**Preprocessing**
Regression	**Dimensionality Reduction**
Clustering	**Feature Extraction**
	Feature selection

Для обучения с учителем:

`model.predict(X_test)` – **предсказать значения целевой переменной**

`model.predict_proba()` – **выдать «степень уверенности» в ответе (вероятность) – для некоторых моделей**

`model.decision_function()` – **решающая функция – для некоторых моделей**

`model.score()` – **в большинстве моделей встроены методы оценки их качества работы**

`model.transform()` – **для отбора признаков (feature selection) «сжимает» обучающую матрицу. Для регрессионных моделей и классификаторов (linear, RF и т.п.) выделяет наиболее информативные признаки**

Для обучения без учителя

`model.transform()` – **преобразует данные**

`model.fit_transform()` – **не во всех моделях – эффективная настройка и трансформация обучения**

`model.predict()` – **для кластеризации (не во всех моделях) – получить метки кластеров**

`model.predict_proba()` – **Gaussian mixture models (GMMs) получают вероятности принадлежности к компонентам для каждой точки**

`model.score()` – **некоторые модели (KDE, GMMs) получают правдоподобие (насколько данные соответствуют модели)**

Совет – для 2D-визуализации

Напишите подобную функцию… (см. дальше результаты работы)

```
def plot_2d_separator(classifier, X, fill=False, line=True, ax=None, eps=None):
    if eps is None:
        eps = 1.0 #X.std() / 2.
    x_min, x_max = X[:, 0].min() - eps, X[:, 0].max() + eps
    y_min, y_max = X[:, 1].min() - eps, X[:, 1].max() + eps
    xx = np.linspace(x_min, x_max, 100)
    yy = np.linspace(y_min, y_max, 100)

    X1, X2 = np.meshgrid(xx, yy)
    X_grid = np.c_[X1.ravel(), X2.ravel()]
    try:
        decision_values = classifier.decision_function(X_grid)
        levels = [0]
        fill_levels = [decision_values.min(), 0, decision_values.max()]
    except AttributeError:
        # no decision_function
        decision_values = classifier.predict_proba(X_grid)[:, 1]
        levels = [.5]
        fill_levels = [0, .5, 1]

    if ax is None:
        ax = plt.gca()
    if fill:
        ax.contourf(X1, X2, decision_values.reshape(X1.shape),
                    levels=fill_levels, colors=['cyan', 'pink'])
    if line:
        ax.contour(X1, X2, decision_values.reshape(X1.shape), levels=levels,
                   colors="black")
    ax.set_xlim(x_min, x_max)
    ax.set_ylim(y_min, y_max)
    ax.set_xticks(())
    ax.set_yticks(())
```

Работа с моделями (1)

```
# данные
from sklearn.datasets import make_blobs
X, y = make_blobs(centers=2, random_state=0)

# разбивка: обучение - контроль
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                                                    random_state=0)

# обучение модели и предсказание
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
classifier = LogisticRegression()
classifier.fit(X_train, y_train)
prediction = classifier.predict(X_test)

# качество
print (np.mean(prediction == y_test))                    0.8
print (classifier.score(X_test, y_test)) # более удобная  0.8
print (classifier.score(X_train, y_train))               0.93
```

Работа с моделями (2)

```
# визуализация
plot_2d_separator(classifier, X, fill=True)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=70)
```

```
# матрица несоответствий
from sklearn.metrics import confusion_matrix
print (confusion_matrix(y_test, prediction))
```

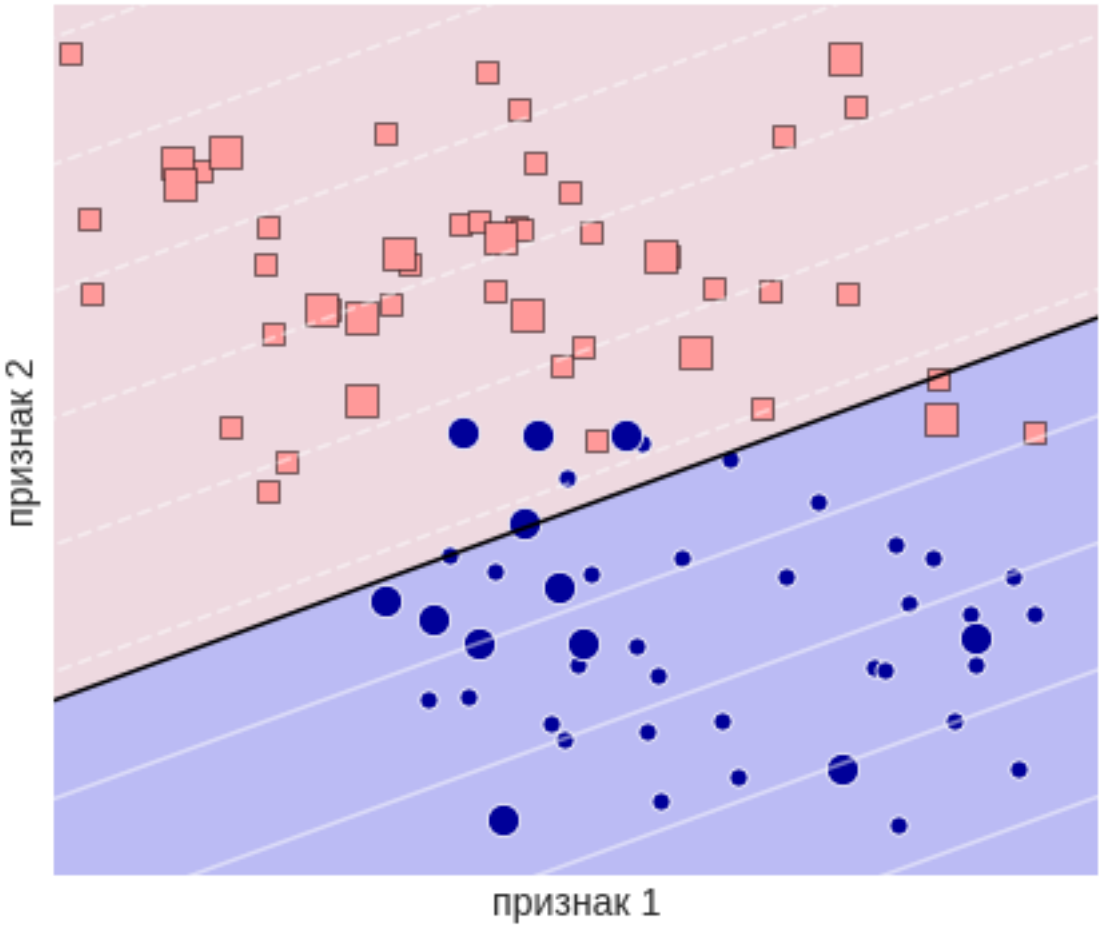
```
[[12  1]
 [ 4  8]]
```

```
# отчёт о точности
from sklearn.metrics import classification_report
print(classification_report(y_test, prediction))
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           0       0.75      0.92      0.83        13
           1       0.89      0.67      0.76        12

   micro avg       0.80      0.80      0.80        25
   macro avg       0.82      0.79      0.79        25
weighted avg       0.82      0.80      0.80        25
```

Работа с моделями

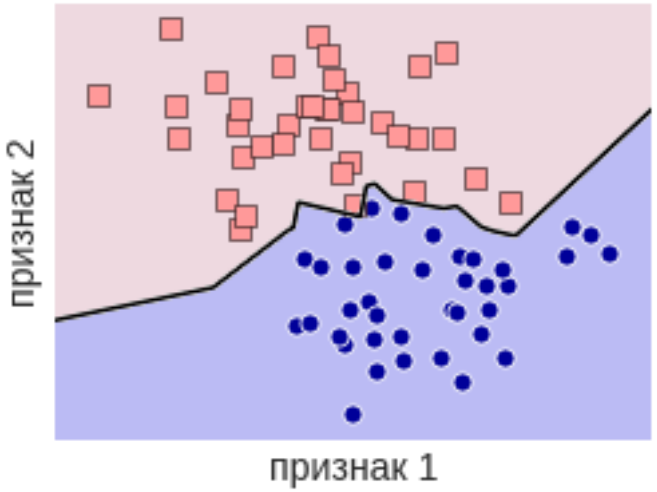
Что получилось (логистическая регрессия)



«Метод ближайшего соседа»

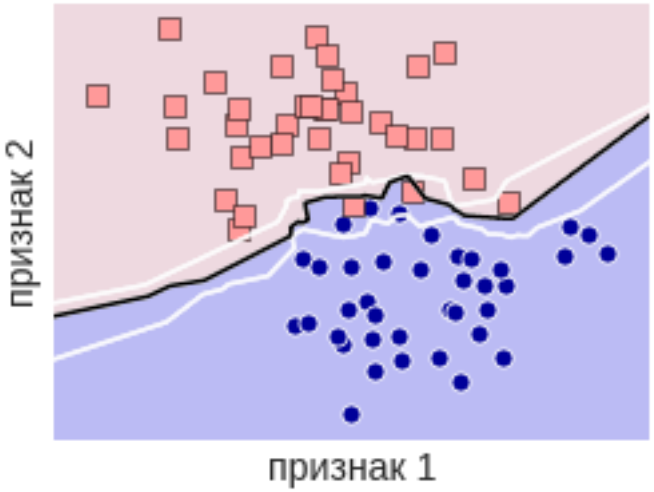
```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
knn.fit(X_train, y_train)
```

n_neighbors=1



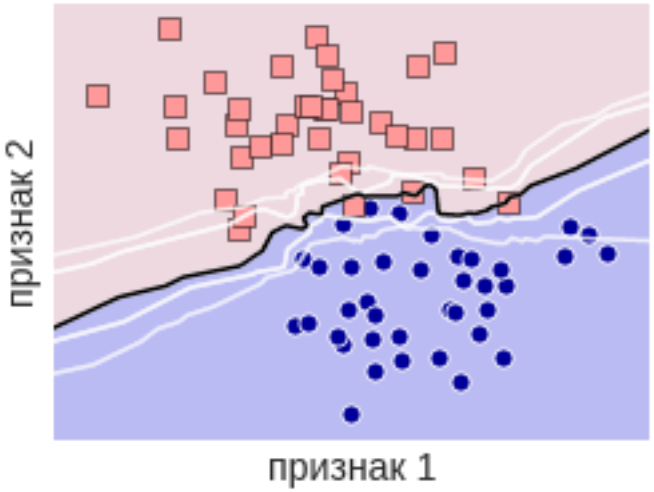
92%

n_neighbors=3



96%

n_neighbors=5



96%

Замечание: здесь разный масштаб по осям

«Метод ближайшего соседа»

`n_neighbors` – **число соседей**

`weights` – **веса («uniform», «distance», функция)**

`algorithm` – **алгоритм для эффективного нахождения соседей («auto», «ball_tree», «kd_tree», «brute»)**

`leaf_size` – **для BallTree / KDTree**

`p` – **параметр для метрики Минковского**

`metric` – **метрика («minkowski»)**

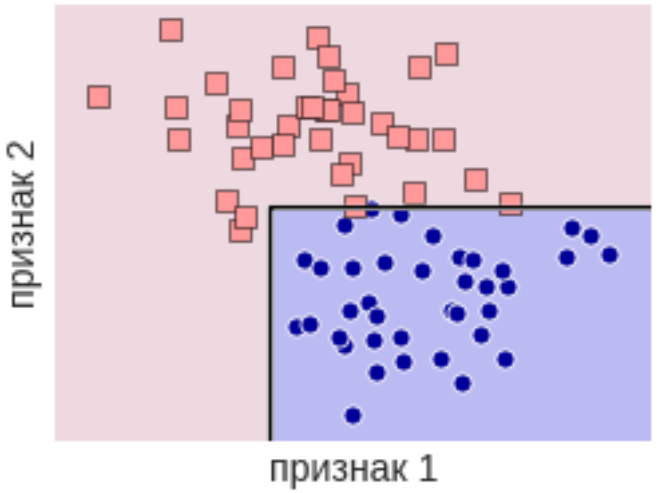
`metric_params` – **параметры для метрики**

`n_jobs` – **число процессов для нахождения соседей**

«Решающее дерево»

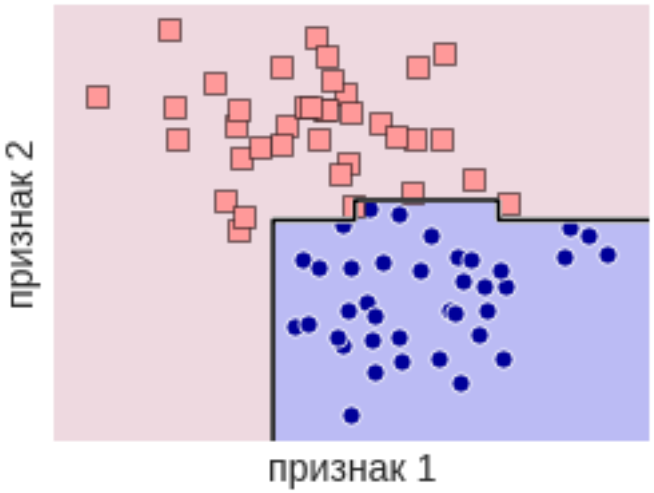
```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
tree = DecisionTreeClassifier(max_depth=10)
tree.fit(X_train, y_train)
```

`max_depth=10`



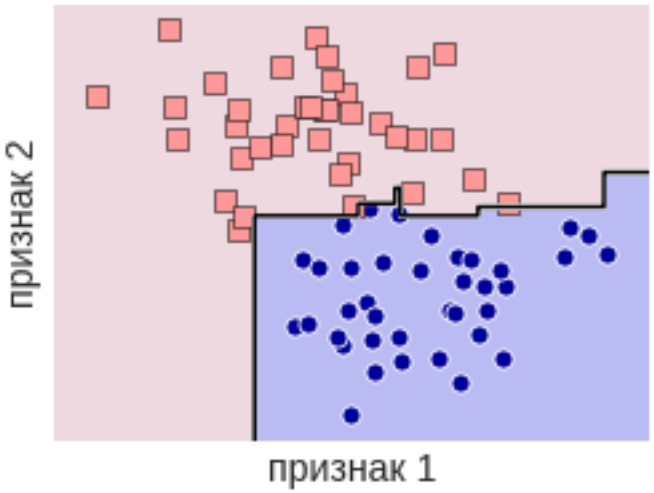
88%

`splitter='random'`



92%

`splitter='random'`
`max_features=1`



92%

«Решающее дерево»

criterion – **критерий расщепления «gini» / «entropy»**

splitter – **разбиение «best» / «random»**

max_depth – **допустимая глубина**

min_samples_split – **минимальная выборка для разбиения**

min_samples_leaf – **минимальная мощность листа**

min_weight_fraction_leaf – **аналогично с весом**

max_features – **число признаков, которые смотрим для нахождения разбиения**

random_state – **инициализация генератора случайных чисел**

max_leaf_nodes – **допустимое число листьев**

min_impurity_decrease – **порог «зашумлённости» для разбиения**

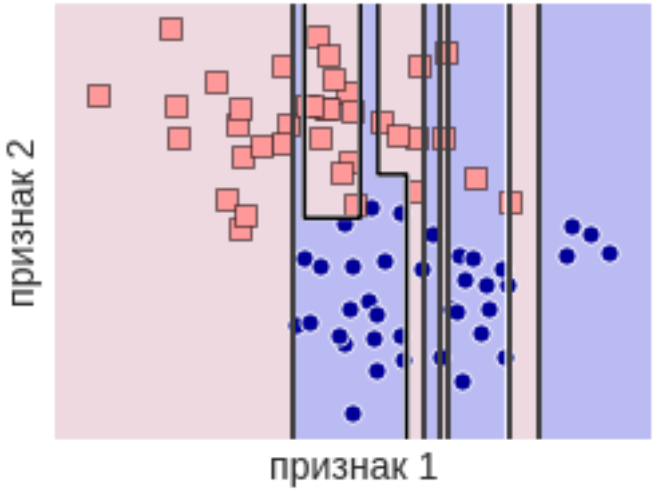
min_impurity_split – **порог «зашумлённости» для останова**

class_weight – **веса классов («balanced» или словарь, список словарей)**

«Случайный лес»

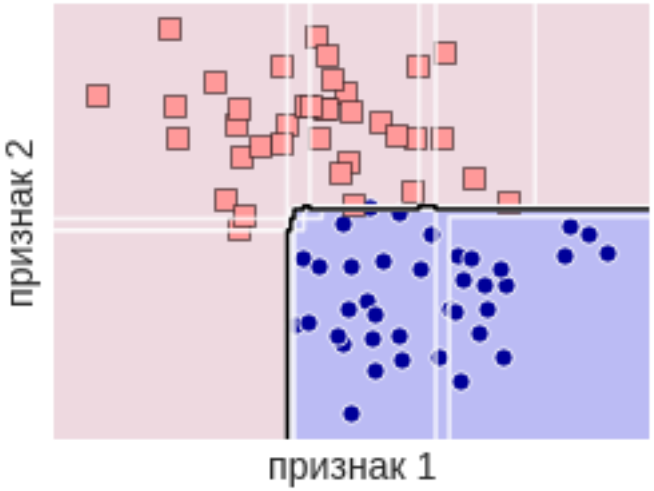
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf = RandomForestClassifier(n_estimators=1)
rf.fit(X_train, y_train)
```

n_estimators=1



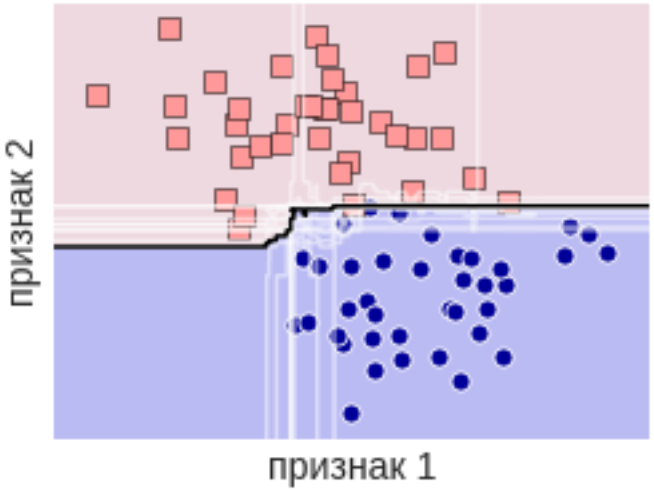
86%

n_estimators=5



84%

n_estimators=100



88%

«Случайный лес»

n_estimators – **число деревьев**

criterion

max_depth

min_samples_split

min_samples_leaf

max_features

max_leaf_nodes

min_impurity_decrease

min_impurity_split

bootstrap – **делать ли бутстреп**

oob_score – **вычислять ли OOB-ошибку**

n_jobs

random_state

verbose – **контроль процесса**

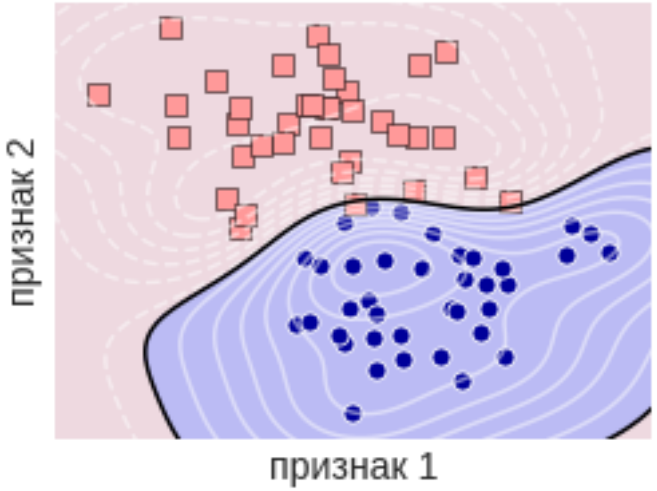
warm_start – **использовать ли существующий лес, чтобы его дополнить или учить заново**

class_weight

«Метод опорных векторов»

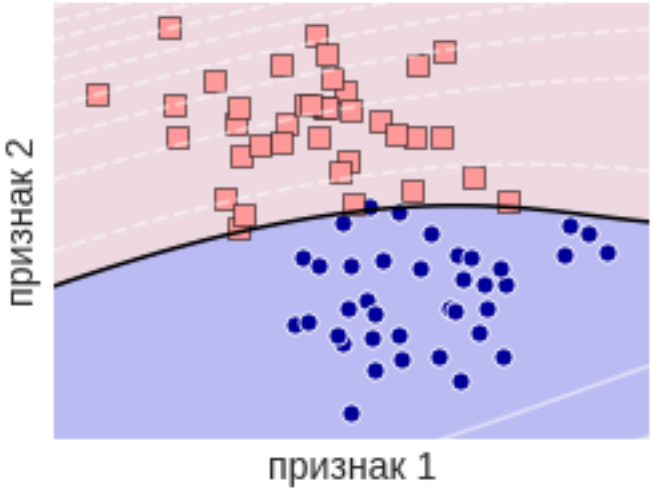
```
from sklearn.svm import SVC
svm = SVC(kernel='rbf')
svm.fit(X_train, y_train)
```

kernel='rbf'



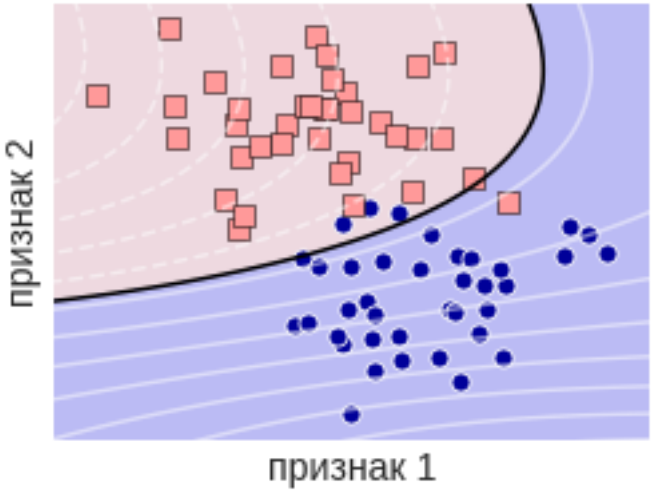
92%

kernel='poly'



88%

kernel='sigmoid'
gamma=0.05



80%

«Метод опорных векторов»

C – **парамер регуляризации**

kernel – **ядро («linear», «poly», «rbf», «sigmoid», «precomputed», функция)**

degree – **степень полинома для poly**

gamma – **коэффициент для «rbf», «poly», «sigmoid»**

coef0 – **коэффициент для «poly», «sigmoid»**

shrinking – **«shrinking heuristic»**

probability – **вычислять ли вероятность**

tol – **порог для остановки**

cache_size

class_weight

verbose

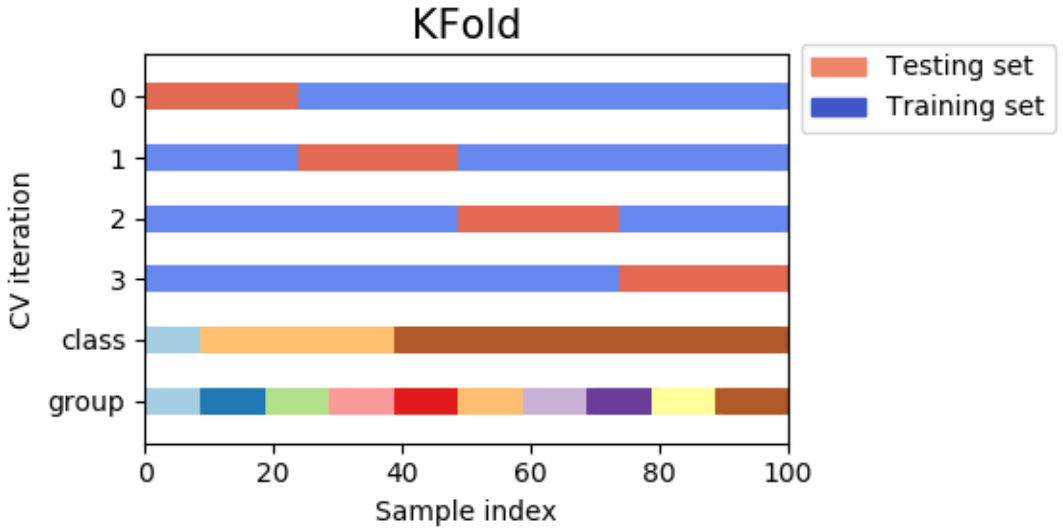
max_iter – **ограничение на число итераций**

decision_function_shape – **ovr (one-vs-rest), ovo (one-vs-one)**

Разбиения выборок: model_selection
(ex: cross_validation)

KFold: разбиение на фолды

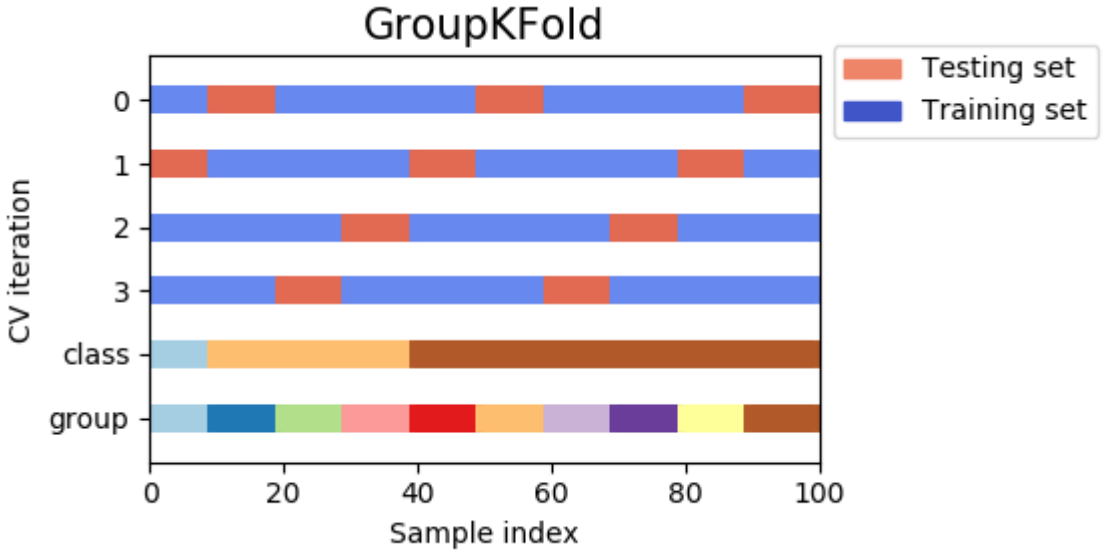
```
sklearn.model_selection.KFold(n_splits='warn',
                              shuffle=False,
                              random_state=None)
```




```
from sklearn.model_selection import KFold
kf = KFold(n_splits=2)
kf.get_n_splits(X)
print(kf)
for train_index, test_index in kf.split(X):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
    X_train, X_test = X[train_index], X[test_index]
            y_train, y_test = y[train_index], y[test_index]
```

GroupKFold: разбиение на фолды без разбиения групп

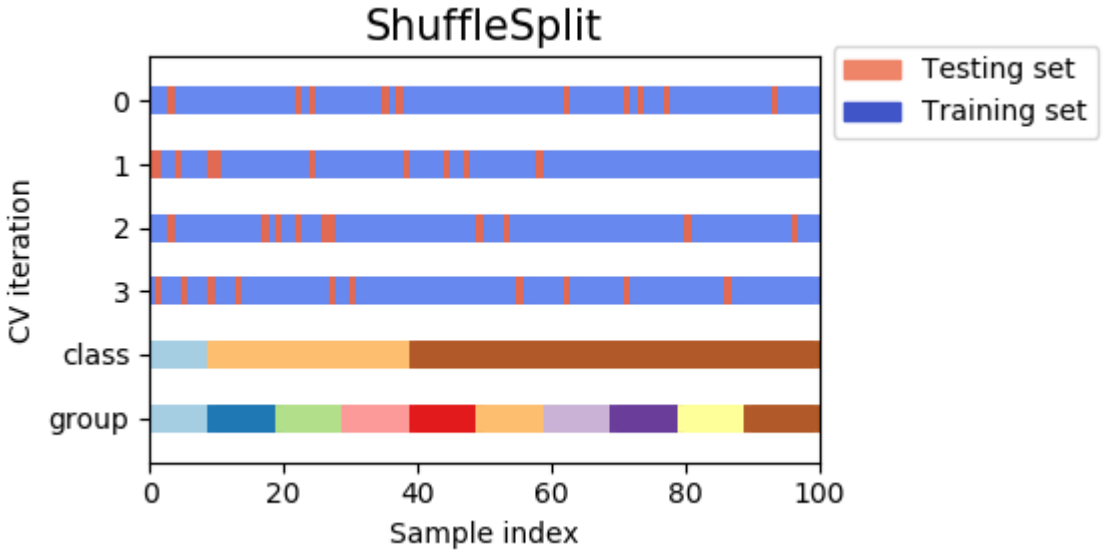
```
sklearn.model_selection.GroupKFold(n_splits='warn')
```




```
from sklearn.model_selection import GroupKFold
group_kfold = GroupKFold(n_splits=2)
group_kfold.get_n_splits(X, y, groups)
print(group_kfold)
i=0
for train_index, test_index in group_kfold.split(X, y, groups):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
    X_train, X_test = X[train_index], X[test_index]
    y_train, y_test = y[train_index], y[test_index]
    print(X_train, X_test, y_train, y_test)
```

ShuffleSplit: случайные разбиения

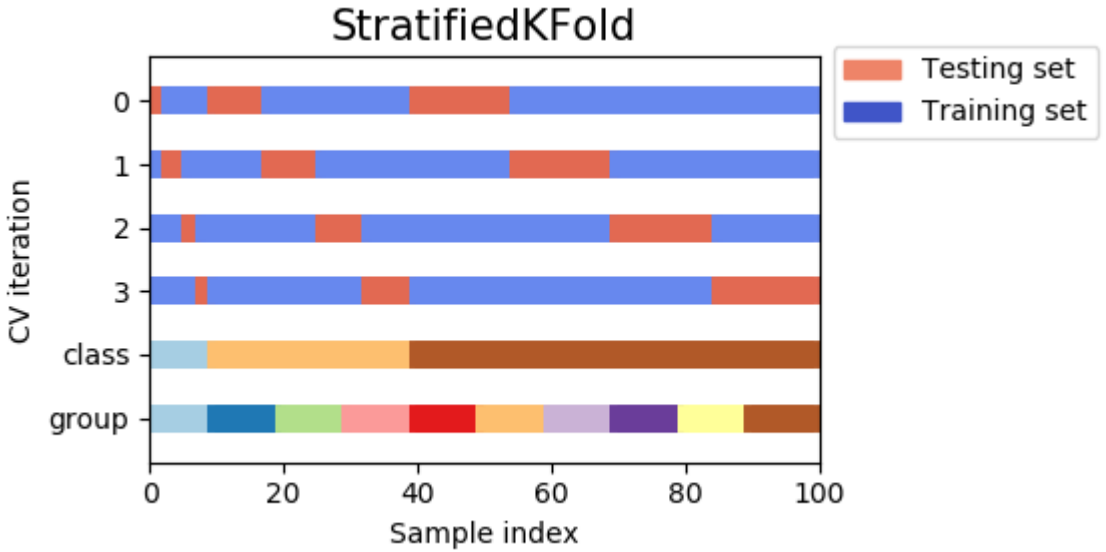
```
sklearn.model_selection.ShuffleSplit(n_splits=10, test_size='default',
                                      train_size=None, random_state=None)
```




```
from sklearn.model_selection import ShuffleSplit
rs = ShuffleSplit(n_splits=5, test_size=.25, random_state=0)
rs.get_n_splits(X)
print(rs)
ShuffleSplit(n_splits=5, random_state=0, test_size=0.25, train_size=None)
for train_index, test_index in rs.split(X):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
```

StratifiedKFold: сохраняет пропорцию классов

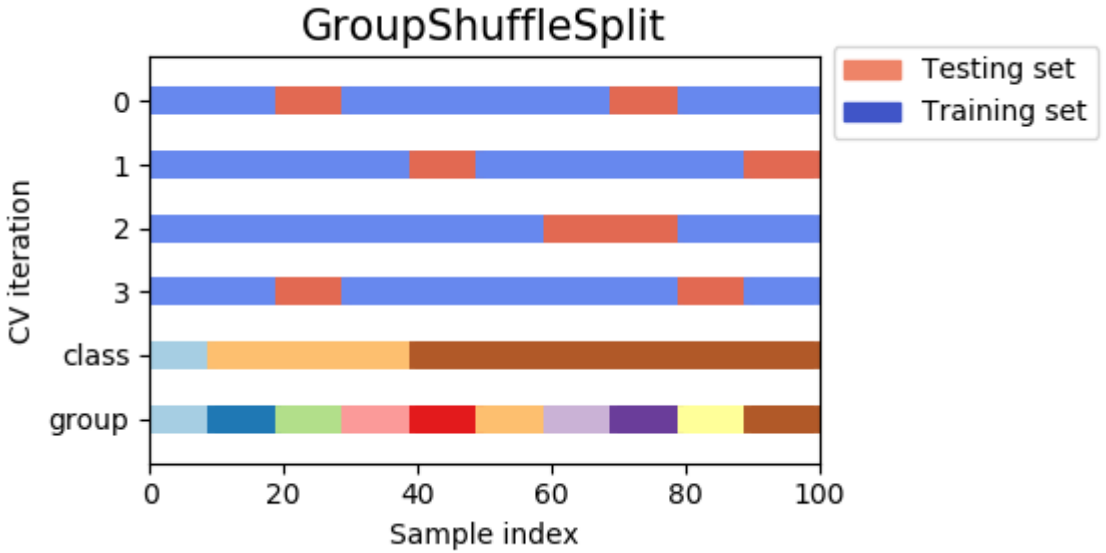
```
sklearn.model_selection.StratifiedKFold(n_splits='warn', shuffle=False,
                                        random_state=None)
```




```
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
skf = StratifiedKFold(n_splits=2)
skf.get_n_splits(X, y)
print(skf)
for train_index, test_index in skf.split(X, y):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
    X_train, X_test = X[train_index], X[test_index]
    y_train, y_test = y[train_index], y[test_index]
```

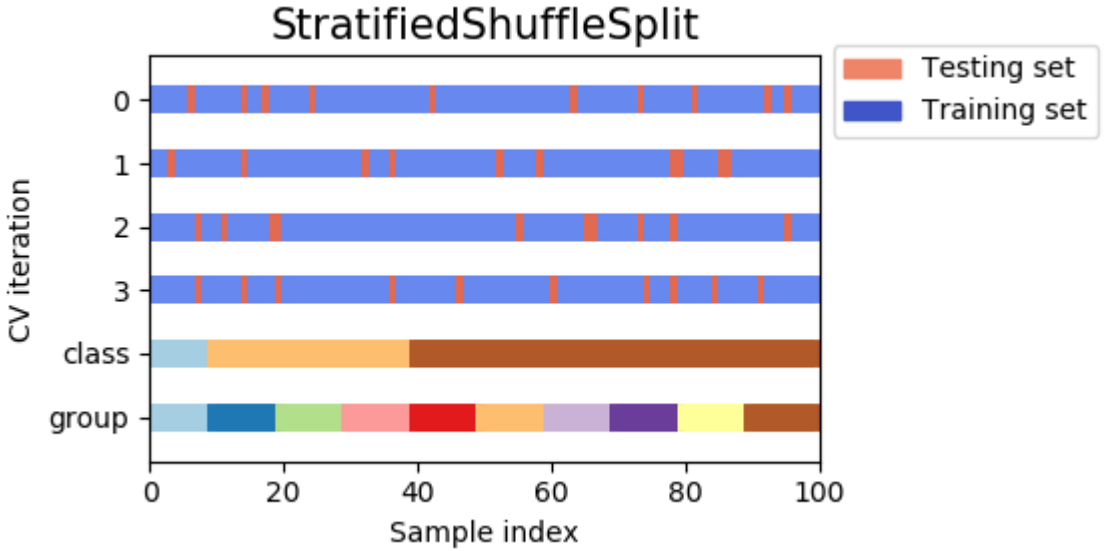
GroupShuffleSplit: случайные разбиения без разбиения групп

```
sklearn.model_selection.GroupShuffleSplit(n_splits=5, test_size='default',
        train_size=None, random_state=None)
```



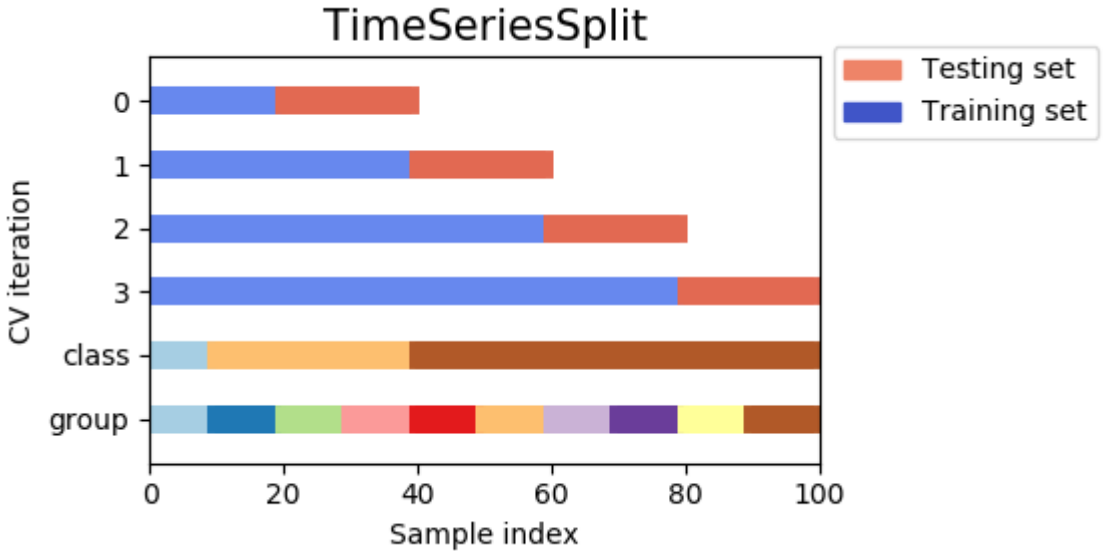
GroupShuffleSplit: случайные разбиения сохраняя пропорции классов

```
sklearn.model_selection.StratifiedShuffleSplit(n_splits=10,
  test_size='default', train_size=None, random_state=None)
```



TimeSeriesSplit: разбиения временных рядов

```
sklearn.model_selection.TimeSeriesSplit(n_splits='warn',
max_train_size=None)
```



LeaveOneOut: Контроль по одному

sklearn.model_selection.LeaveOneOut

LeaveOneGroupOut: Контроль по одной группе

```
from sklearn.model_selection import LeaveOneGroupOut
logo = LeaveOneGroupOut()
logo.get_n_splits(X, y, groups)
logo.get_n_splits(groups=groups)
print(logo)
for train_index, test_index in logo.split(X, y, groups):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
    X_train, X_test = X[train_index], X[test_index]
    y_train, y_test = y[train_index], y[test_index]
   print(X_train, X_test, y_train, y_test)
```

Какие бывают разбиения

```
from sklearn.model_selection import LeavePOut
# всевозможные тройки
cv = LeavePOut(3)

for train, test in cv.split(X):
    print('индексы теста = ' + str(test))
    print('классы теста = ' + str(y[test]))
```

```
индексы теста = [0 1 2]
классы теста = [1 1 2]
индексы теста = [0 1 3]
классы теста = [1 1 2]
индексы теста = [0 1 4]
...
```

```
from sklearn.model_selection import ShuffleSplit
# n случайных разбиений
cv = ShuffleSplit(n_splits=3, test_size=0.1,
train_size=None, random_state=None)

for train, test in cv.split(X):
    print('индексы теста = ' + str(test))
    print('классы теста = ' + str(y[test]))
```

```
индексы теста = [11  0]
классы теста = [3 1]
индексы теста = [2 4]
классы теста = [2 2]
индексы теста = [0 1]
классы теста = [1 1]
```

```
from sklearn.model_selection import PredefinedSplit
# заданные разбиения
g = np.array([1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 4, 4, 4])
cv = PredefinedSplit(g)

for train, test in cv.split(X, y, g):
    print('индексы теста = ' + str(test))
    print('классы теста = ' + str(y[test]))
    print('метки групп теста = ' + str(g[test]))
```

```
индексы теста = [0 2 4 6 8]
классы теста = [1 2 2 3 3]
метки групп теста = [1 1 1 1 1]
индексы теста = [1 3 5 7]
классы теста = [1 2 2 3]
метки групп теста = [2 2 2 2]
индексы теста = [ 9 10 11]
классы теста = [3 3 3]
метки групп теста = [4 4 4]
```

Ещё в sklearn.model_selection

train_test_split – от матрицы (пример был)

cross_val_score – оценка с помощью CV (см. ниже)

cross_val_predict – формирование cv-мета-признаков

Оценка модели (cross_val_score)

```
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from sklearn.model_selection import ShuffleSplit
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

logreg = LogisticRegression()
cv = ShuffleSplit(n_splits=3, test_size=0.1,
                  train_size=None, random_state=None)
cross_val_score(logreg, X, y, cv=cv)
```

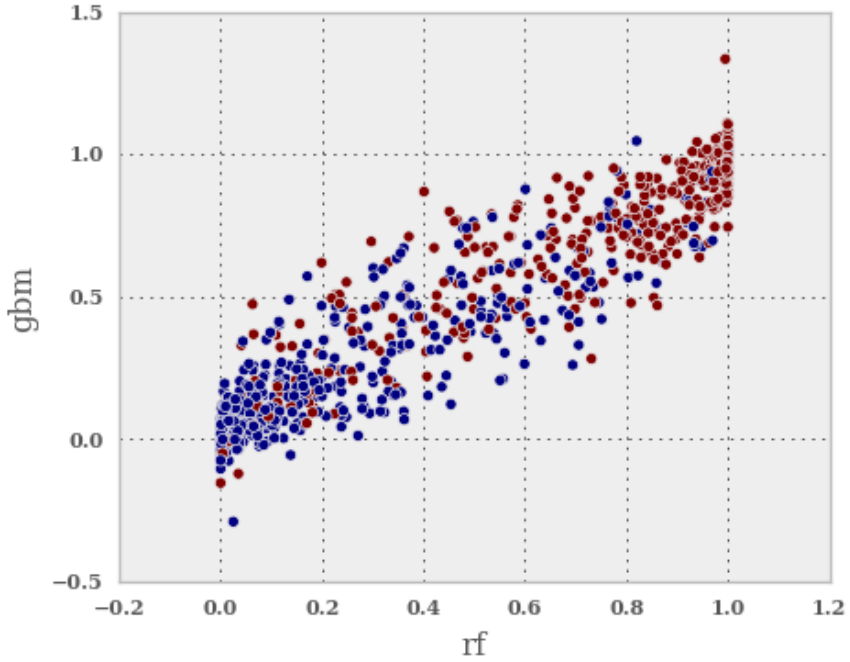
```
array([0.8, 0.8 ,
       1. ])
```

У этих функций много параметров…

Они (функции) «понимают» друг друга

Пока не указываем скорер – используется встроенный (в модель)

Формирование метапризнаков, cross_val_predict



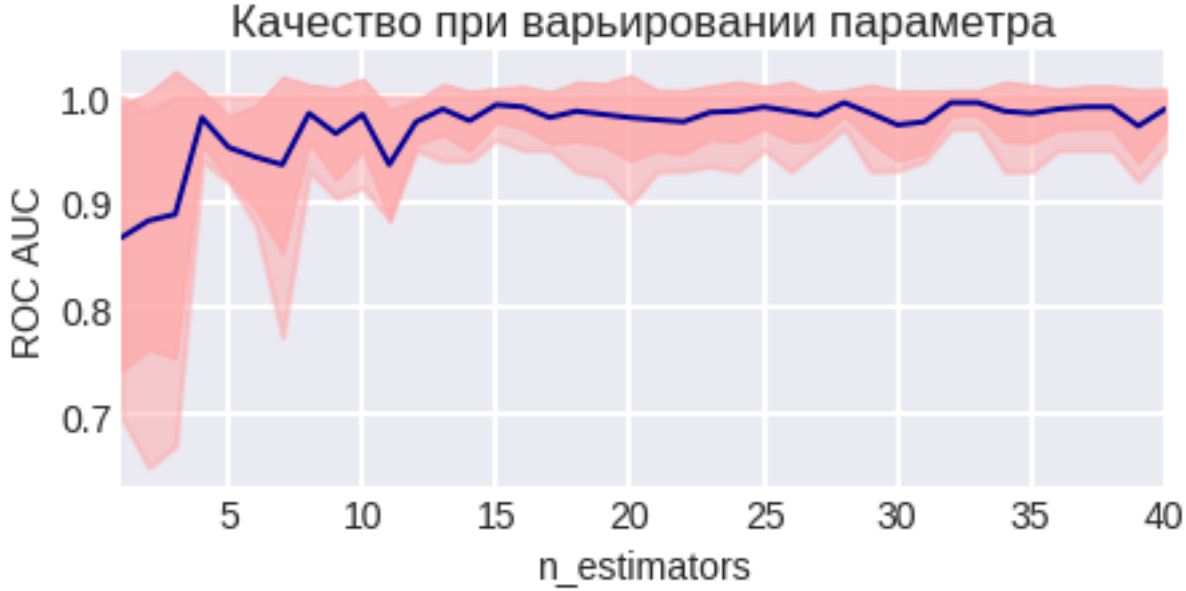

```
from sklearn.model_selection import cross_val_predict
from sklearn.model_selection import KFold
cv = KFold(n_splits=10, shuffle=True, random_state=1)
# ответы rf на скользящем контроле
a_rf = cross_val_predict(rf, X, y, cv=cv)
# ответы gbm на скользящем контроле
a_gbm = cross_val_predict(gbm, X, y, cv=cv)
plt.scatter(a_rf, a_gbm, c=y)
plt.xlabel('rf')
plt.ylabel('gbm')
```

Пример: качество при варьировании параметра, validation_curve

```
from sklearn.model_selection import validation_curve
from  sklearn.model_selection import KFold # cross_validation
from time import time

tm = time()
# cv-контроль
cv = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=2)
# модель
rf = RandomForestClassifier() # можно прописать параметры
# параметр
param_name = "max_features"
# его значения
pars = np.linspace(5, 100, 20).astype(int).tolist()
# сделать тест
train_errors, test_errors = validation_curve(rf, X, y,
                            param_name=param_name, param_range=pars,
                            cv=cv.split(X), scoring='roc_auc', n_jobs=-1)
print ('Время = ' + str(time() - tm))
```

Пример: качество при варьировании параметра, validation_curve

```
plt.plot(pars, test_errors.mean(axis=1), label="cv", lw=2)
plt.fill_between(pars, test_errors.min(axis=1), test_errors.max(axis=1),
                 alpha=0.2, color="darkorange", lw=2)
plt.fill_between(pars, test_errors.mean(axis=1) - test_errors.std(axis=1),
                 test_errors.mean(axis=1) + test_errors.std(axis=1),
                 alpha=0.1, color="darkblue", lw=1)
plt.legend(loc="best")
plt.ylabel('ROC AUC')
plt.xlabel(param_name)
plt.title(u'Качество при варьировании параметра')
```



Скореры в оценке модели (sklearn.metrics)

```
from sklearn.metrics.scorer import SCORERS
# какие скореры есть
print(SCORERS.keys())
# пишем свой скорер
def my_accuracy_scoring(est, X, y):
    return np.mean(est.predict(X) == y)

cross_val_score(knn, X, y, scoring=my_accuracy_scoring, cv=4)
array([ 0.95,  0.9 ,  1. , 0.95])

# другой способ
from sklearn.metrics import make_scorer
# ф-я сравнения
def cmp(a, y):
    return (np.mean(np.abs(a - y) < 0.1))

# скорер на её основе
scorer = make_scorer(cmp, greater_is_better=False,
                     needs_proba=False, needs_threshold=False)

# можно использовать так:
cross_val_score(rf, X, y, scoring=scorer, cv=2) # а не 'roc_auc'
```

Скореры в оценке модели (sklearn.metrics)

```
'f1',
 'f1_weighted',
 'f1_samples',
 'neg_mean_squared_error',
 'precision_weighted',
 'recall_samples',
 'recall_micro',
 'adjusted_rand_score',
 'recall_macro',
 'mean_absolute_error',
 'precision_macro',
 'neg_log_loss',
 'neg_mean_absolute_error',
 'f1_macro',
```

```
'recall_weighted',
 'accuracy',
'precision_samples',
 'median_absolute_error',
 'precision',
 'log_loss',
 'precision_micro',
 'average_precision',
 'roc_auc',
 'r2',
 'recall',
 'mean_squared_error',
 'f1_micro',
 'neg_median_absolute_error'
```

Есть много скореров

Можно написать свой

Качество (sklearn.metrics)

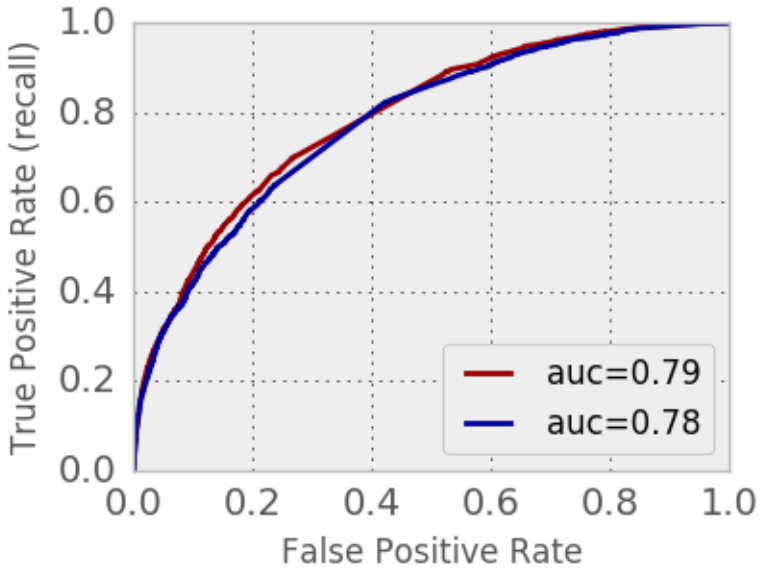
```
from sklearn.metrics import classification_report
```

```
print(classification_report(y, a)
```

```
             precision    recall  f1-score   support

        0.0       0.82      1.00      0.90      6694
        1.0       1.00      0.73      0.84      5306

avg / total       0.90      0.88      0.88     12000
```

Качество (sklearn.metrics)

```
plt.figure(figsize=(6,5))
plt.xlabel("False Positive Rate")
plt.ylabel("True Positive Rate (recall)")
fpr, tpr, _ = roc_curve(y, a)
fpr2, tpr2, _ = roc_curve(y, a2)
auc1 = roc_auc_score(y, a)
auc2 = roc_auc_score(y, a2)
plt.plot(fpr, tpr, label=("auc=%.2f" % auc1), linewidth=2,
color='#990000')
plt.plot(fpr2, tpr2, label=("auc=%.2f" % auc2), linewidth=2,
color='#000099')
plt.legend(loc="best")
```



Выбор параметров модели: learning_curve.validation_curve

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.svm import SVR
param_grid = {'C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10],
              'gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1]}
cv = KFold(n_splits=5, shuffle=True)
grid = GridSearchCV(SVR(), param_grid=param_grid, cv=cv, verbose=3)
grid.fit(X, y)
```

```
Fitting 5 folds for each of 20 candidates, totalling 100 fits
[CV] gamma=0.001, C=0.001 ............................................
[CV] ................... gamma=0.001, C=0.001, score=-0.076544 -   0.0s
[CV] gamma=0.001, C=0.001 ............................................
[CV] ................... gamma=0.001, C=0.001, score=-0.001319 -   0.0s
[CV] gamma=0.001, C=0.001 ............................................
...
```

```
print(grid.best_score_)
print(grid.best_params_)
print(grid.score(X_test, y_test))
```

```
0.958154154548
{'gamma': 1, 'C': 10}
0.963548256612
```

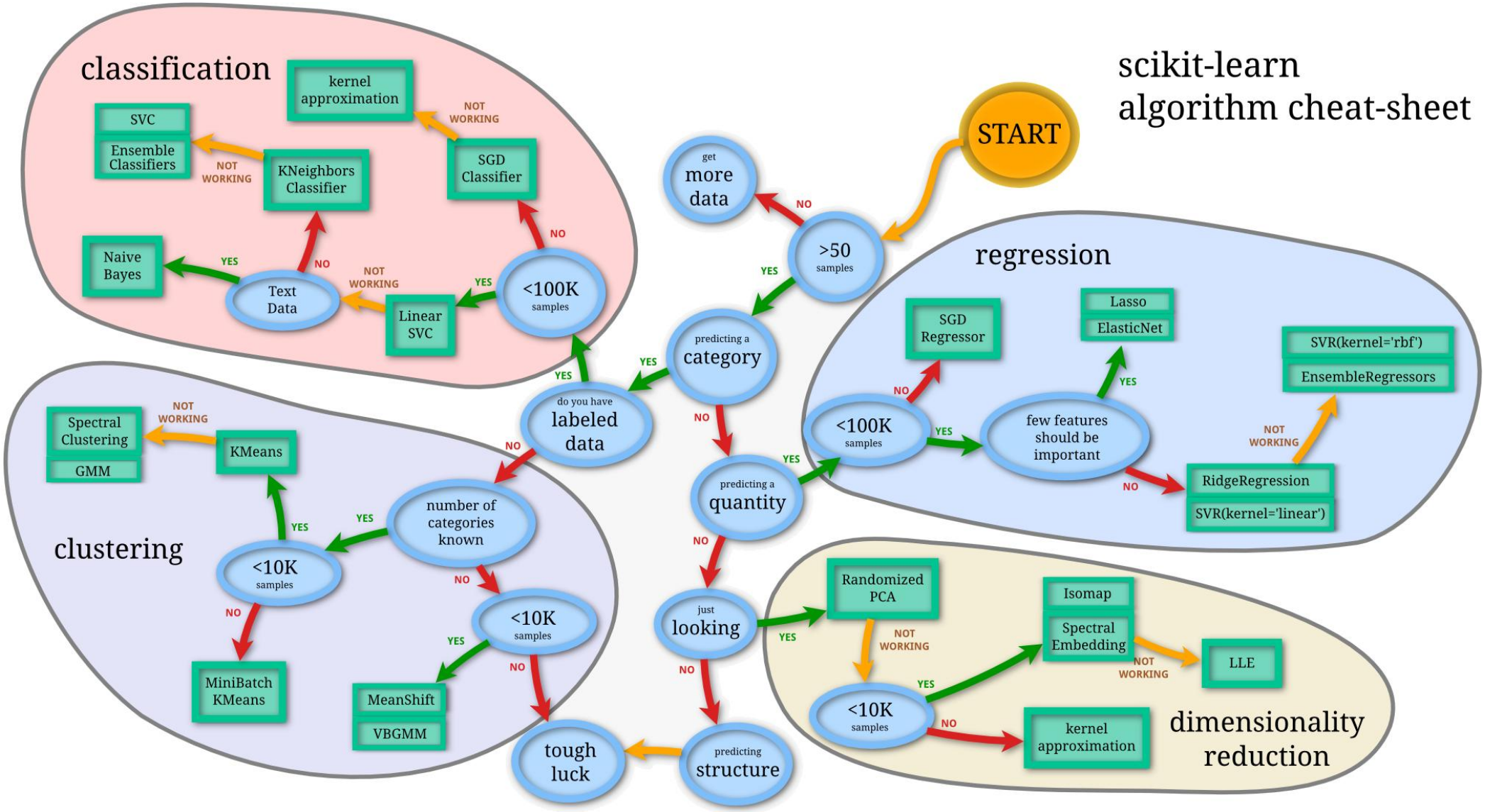
Последовательность операторов: pipeline

```
from sklearn.pipeline import make_pipeline
pipeline = make_pipeline(TfidfVectorizer(), LogisticRegression())
pipeline.fit(text_train, y_train)
pipeline.score(text_test, y_test)
0.5
```

Оптимизация параметров

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.pipeline import make_pipeline
from sklearn.feature_extraction.text import TfidfVectorizer

pipeline = make_pipeline(TfidfVectorizer(), LogisticRegression())

params = {'logisticregression__C': [.1, 1, 10, 100],
          "tfidfvectorizer__ngram_range": [(1, 1), (1, 2), (2, 2)]}
grid = GridSearchCV(pipeline, param_grid=params, cv=5)
grid.fit(X, y)
print(grid.best_params_)
grid.score(X, y)
```

Выбор алгоритма (модели)



Предобработка данных: preprocessing

Нормировка данных

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(X)
X_scaled = scaler.transform(X)
```

Перенумерация

```
f = ['a', 'bb', 20, 'bb' , 'a', 'a']
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
encoder = LabelEncoder()
encoder.fit(f)
encoder.transform(f)
```

```
array([1, 2, 0, 2, 1, 1], dtype=int64)
```

Предобработка данных: preprocessing

Характеристическая матрица

```
f = ['a', 'bb', 'c', 'bb', 'a', 'a']
from sklearn.preprocessing import LabelBinarizer
encoder = LabelBinarizer()
encoder.fit(f)
encoder.transform(f)

array([[1, 0, 0],
       [0, 1, 0],
       [0, 0, 1],
       [0, 1, 0],
       [1, 0, 0],
       [1, 0, 0]])
```

Предобработка данных: preprocessing

Характеристическая матрица для группы вещественных признаков

```
f = [[1, 2], [1, 1], [2, 2]]
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
encoder = OneHotEncoder()
encoder.fit(f)
encoder.transform(f).toarray()
array ([[ 1.,  0.,  0.,  1.],
        [ 1.,  0.,  1.,  0.],
        [ 0.,  1.,  0.,  1.]])
```

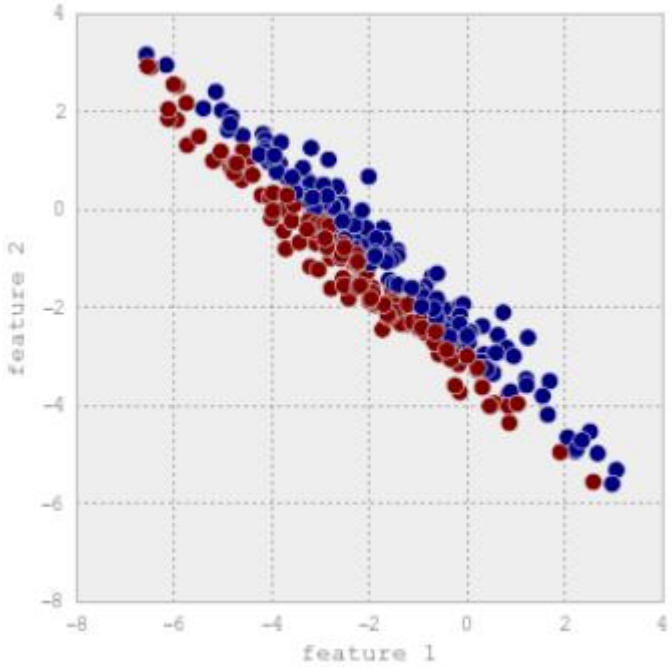
Полиномиальные признаки

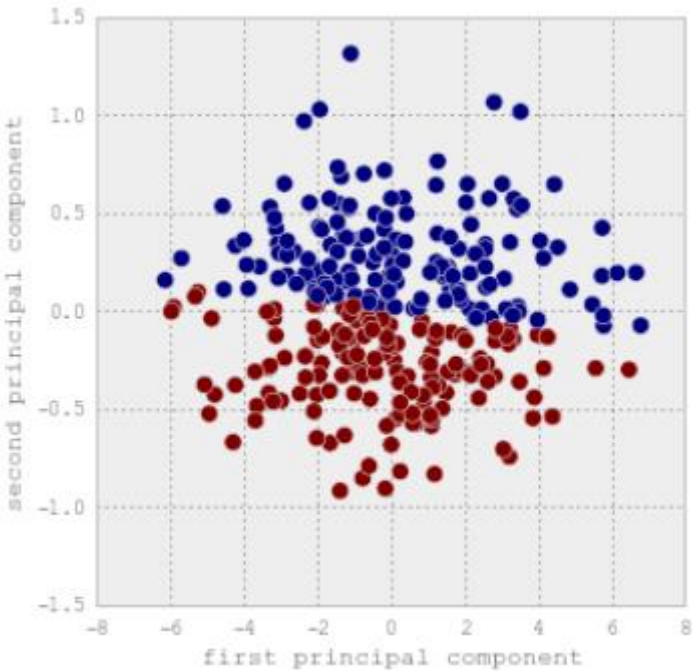
```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
pf = PolynomialFeatures(degree=2)
f = [[1, 0], [2, 1], [3, 2]]
pf.fit(f)
pf.transform(f)
array([[1, 1, 0, 1, 0, 0],
       [1, 2, 1, 4, 2, 1],
       [1, 3, 2, 9, 6, 4]])
```

Декомпозиции матриц: decomposition

Приведём лишь пример с SVD (есть ещё ICA, NMF и т.п.)

```
from sklearn.decomposition import PCA
pca = PCA()
pca.fit(X_blob)
X_pca = pca.transform(X_blob)
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], c=y, linewidths=0, s=70)
plt.xlabel("first principal component")
plt.ylabel("second principal component")
```

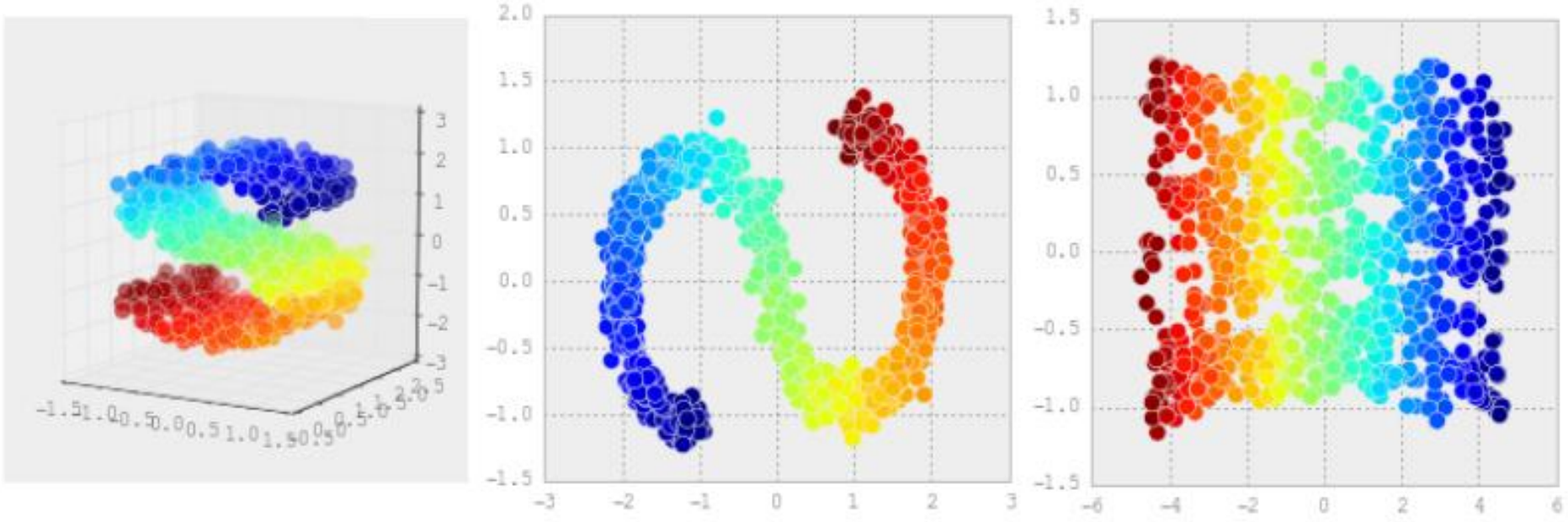




Сокращение размерности

```
from sklearn.datasets import make_s_curve
X, y = make_s_curve(n_samples=1000, noise=0.1)

from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
ax = plt.axes(projection='3d')
ax.scatter3D(X[:, 0], X[:, 1], X[:, 2], c=y, s=70)
ax.view_init(10, -60)

X_pca = PCA(n_components=2).fit_transform(X)
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], c=y, s=70)

from sklearn.manifold import Isomap
iso = Isomap(n_neighbors=15, n_components=2)
X_iso = iso.fit_transform(X)
plt.scatter(X_iso[:, 0], X_iso[:, 1], c=y, s=70)
```

Сокращение размерности



Работа с текстами

Как всегда – всё просто…

```
from sklearn.feature_extraction.text import TfidfVectorizer
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

vectorizer = TfidfVectorizer()
vectorizer.fit(text_train)

X_train = vectorizer.transform(text_train)
X_test = vectorizer.transform(text_test)

clf = LogisticRegression()
clf.fit(X_train, y_train)

clf.score(X_test, y_test)
```

Работа с текстами: чуть подробнее

```
X = ["Some say the world will end in fire,",
     "Some say in ice."]

from sklearn.feature_extraction.text import CountVectorizer
vectorizer = CountVectorizer()
vectorizer.fit(X)
vectorizer.vocabulary_
{'end': 0,
 'fire': 1,
 'ice': 2,
 'in': 3,
 'say': 4,
 'some': 5,
 'the': 6,
 'will': 7,
 'world': 8}

X_bag_of_words = vectorizer.transform(X) # sparse-матрица
X_bag_of_words.toarray()
array([[1, 1, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1],
       [0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0]], dtype=int64)
```

Работа с текстами: чуть подробнее

```
vectorizer.get_feature_names()
['end', 'fire', 'ice', 'in', 'say', 'some', 'the', 'will', 'world']

vectorizer.inverse_transform(X_bag_of_words)
[array(['end', 'fire', 'in', 'say', 'some', 'the', 'will', 'world'],
       dtype='<U5'), array(['ice', 'in', 'say', 'some'],
       dtype='<U5')]

from sklearn.feature_extraction.text import TfidfVectorizer
tfidf_vectorizer = TfidfVectorizer()  # другой "векторайзер"!
tfidf_vectorizer.fit(X)
TfidfVectorizer(analyzer='word', binary=False, decode_error='strict',
        dtype=<class 'numpy.int64'>, encoding='utf-8', input='content',
        lowercase=True, max_df=1.0, max_features=None, min_df=1,
        ngram_range=(1, 1), norm='l2', preprocessor=None, smooth_idf=True,
        stop_words=None, strip_accents=None, sublinear_tf=False,
        token_pattern='(?u)\\b\\w\\w+\\b', tokenizer=None, use_idf=True,
        vocabulary=None)

print(tfidf_vectorizer.transform(X).toarray())
[[ 0.39  0.39  0.    0.28  0.28  0.28  0.39  0.39  0.39]
 [ 0.    0.    0.63  0.45  0.45  0.45  0.    0.    0.  ]]
```

Работа с текстами: чуть подробнее

```
bigram_vectorizer = CountVectorizer(ngram_range=(1, 2))
# от какого до какого ранга

bigram_vectorizer.fit(X)
CountVectorizer(analyzer='word', binary=False, decode_error='strict',
        dtype=<class 'numpy.int64'>, encoding='utf-8', input='content',
        lowercase=True, max_df=1.0, max_features=None, min_df=1,
        ngram_range=(1, 2), preprocessor=None, stop_words=None,
        strip_accents=None, token_pattern='(?u)\\b\\w\\w+\\b',
        tokenizer=None, vocabulary=None)

bigram_vectorizer.get_feature_names()
['end',
 'end in',
...
'world will']

bigram_vectorizer.transform(X).toarray()
 array([[1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1],
        [0, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]],
dtype=int64)
```

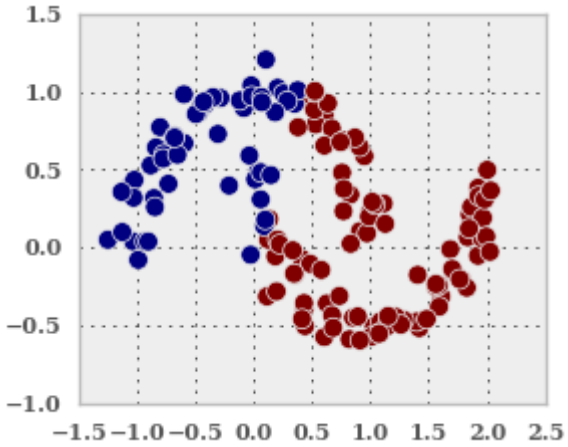
Модели для sparse-матриц

```
linear_model.Ridge()
linear_model.Lasso()
linear_model.ElasticNet()
linear_model.LinearRegression()
linear_model.Perceptron()
linear_model.PassiveAggressiveRegressor()
linear_model.PassiveAggressiveClassifier()
linear_model.SGDRegressor()
linear_model.SGDClassifier()
svm.SVR()
svm.NuSVR()
naive_bayes.MultinomialNB()
naive_bayes.BernoulliNB()
neighbors.KNeighborsRegressor()
```

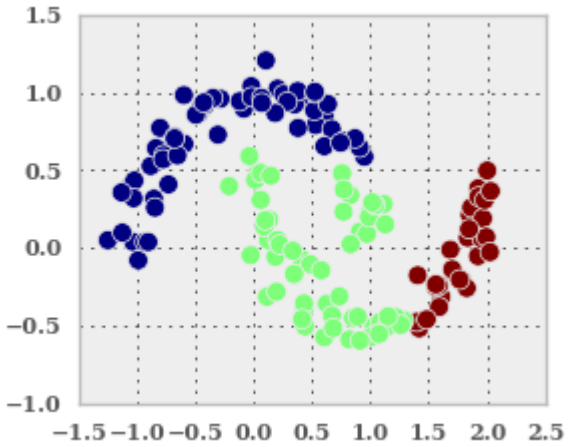
На вход можно подавать разреженную матрицу – всё работает (не во всех моделях быстро на больших матрицах).

Ещё пример – кластеризация

```
from sklearn.cluster import AffinityPropagation

af = AffinityPropagation(preference=-50).fit(X)
# cluster_centers_indices =
af.cluster_centers_indices_
labels = af.labels_
plt.figure(figsize=(3, 2.5))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=50)
```

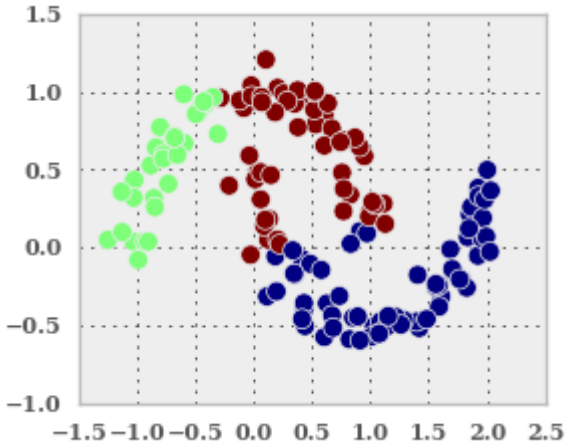



```
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering

model = AgglomerativeClustering(n_clusters=3,
affinity='euclidean')

model.fit(X)

labels = model.labels_

plt.figure(figsize=(3, 2.5))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=50)
```

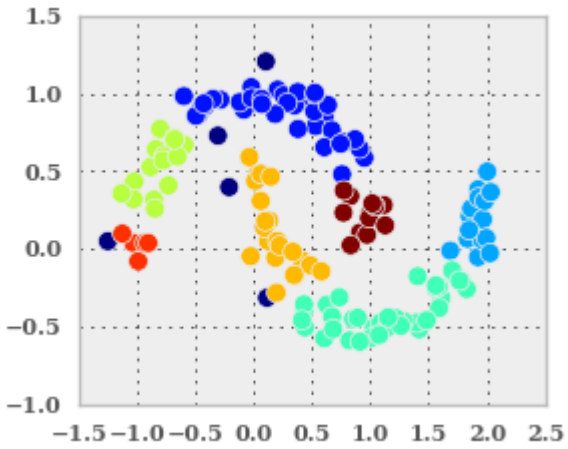


Ещё пример – кластеризация

```
from sklearn.cluster import Birch

model = Birch(threshold=0.5, branching_factor=50,
                        n_clusters=3, compute_labels=True)
model.fit(X)

labels = model.labels_

plt.figure(figsize=(3, 2.5))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=50)
```




```
from sklearn.cluster import DBSCAN
model = DBSCAN(eps=0.2, min_samples=5,
metric='euclidean',
                        algorithm='auto', leaf_size=10,
                                    p=None, n_jobs=-1)
model.fit(X)

labels = model.labels_

plt.figure(figsize=(3, 2.5))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=50)
```



Ссылки

В данной презентации много примеров взято из ноутбука

https://github.com/amueller/scipy_2015_sklearn_tutorial/tree/master/notebooks

Спасибо Андреасу Мюллеру!

См. API Reference

http://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html