

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ «Информатика и системы управления»

КАФЕДРА «Системы обработки информации и управления»

РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА К КУРСОВОМУ ПРОЕКТУ

HA TEMY:

Решение задачи машинного обучения				
Студент группы ИУ5-61Б (Группа)	(Подпись, дата)	Белкина.В. (И.О.Фамилия)		
Руководитель курсового проекта	(Подпись, дата)	Гапанюк Ю.Е. (И.О.Фамилия)		
Консультант	(Полпись, лата)	(И.О.Фамилия)		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

	УТВЕРЖ Заведующий ка	
	Заведующий ка	федрои (Индекс)
	«»_	(И.О.Фамилия 20 Г
3 А Д А	ние	
на выполнение ку	рсового проекта	
по дисциплине «Технологи	и машинного обучения»	
Студент группы ИУ5-61Б		
Белкина Екатерина (Фамилия, имя	Владимировна, отчество)	
Тема курсового проекта: "Бинарная классификаци 	ля"	
Направленность КП (учебный, исследовательски	ий, практический, произво	дственный, др.)
Источник тематики (кафедра, предприятие, НИР	?)	
График выполнения проекта: 25% к нед., 50	9% к нед., 75% к нед	ц., 100% к <u></u> нед.
Задание решение задачи машинного обучения на ост студентом единолично.	нове материалов дисциплины	ы. Выполняется
Оформление курсового проекта:		
Расчетно-пояснительная записка на35 лис Перечень графического (иллюстративного) мате		слайды и т.п.)
Дата выдачи задания «12 » февраля 2020 г.		
Руководитель курсового проекта	(Подпись, дата)	Гапанюк Ю.Е. (И.О.Фамилия)
Студент	(Подпись, дата)	Белкина Е.В. (И.О.Фамилия)

Примечание: Задание оформляется в двух экземплярах: один выдается студенту, второй

хранится на кафедре.

Содержание

Задание

- В данной курсовой работе необходимо предпринять следующие шаги:
- 1. Поиск и выбор набора данных для построения моделей машинного обучения. На основе выбранного набора данных студент должен построить модели машинного обучения для решения или задачи классификации, или задачи регрессии.
- 2. Проведение разведочного анализа данных. Построение графиков, необходимых для понимания структуры данных. Анализ и заполнение пропусков в данных.
- 3. Выбор признаков, подходящих для построения моделей. Кодирование категориальных признаков Масштабирование данных. Формирование вспомогательных признаков, улучшающих качество моделей.
- 4. Проведение корреляционного анализа данных. Формирование промежуточных выводов о возможности построения моделей машинного обучения.

В зависимости от набора данных, порядок выполнения пунктов 2, 3, 4 может быть изменен.

- 5. Выбор метрик для последующей оценки качества моделей. Необходимо выбрать не менее трех метрик и обосновать выбор.
- 6. Выбор наиболее подходящих моделей для решения задачи классификации или регрессии. Необходимо использовать не менее пяти моделей, две из которых должны быть ансамблевыми.
- 7. Формирование обучающей и тестовой выборок на основе исходного набора данных.
- 8. Построение базового решения (baseline) для выбранных моделей без подбора гиперпараметров. Производится обучение моделей на основе обучающей выборки и оценка качества моделей на основе тестовой выборки.
- 9. Подбор гиперпараметров для выбранных моделей. Рекомендуется использовать методы кросс-валидации. В зависимости от используемой библиотеки можно применять функцию GridSearchCV, использовать перебор параметров в цикле, или использовать другие методы.
- 10. Повторение пункта 8 для найденных оптимальных значений гиперпараметров. Сравнение качества полученных моделей с качеством baseline-моделей.
- 11. Формирование выводов о качестве построенных моделей на основе выбранных метрик. Результаты сравнения качества рекомендуется отобразить в виде графиков и сделать выводы в форме текстового описания. Рекомендуется постройение графиков обучения и валидации, влияния значений гиперпарметров на качество моделей и т.д.

Введение

Курсовая работа — самостоятельная часть учебной дисциплины «Технологии машинного обучения» — учебная и практическая исследовательская студенческая работа, направленная на решение комплексной задачи машинного обучения. Результатом курсовой работы является отчет, содержащий описания моделей, тексты программ и результаты экспериментов.

Курсовая работа опирается на знания, умения и владения, полученные студентом в рамках лекций и лабораторных работ по дисциплине.

В рамках данной курсовой работы необходимо применить навыки, полученные в течение курса «Технологии машинного обучения», и обосновать полученные результаты.

Основная часть

Постановка задачи

В данной курсовой работе ставится задача определения принадлежности звезды к классу пульсаров по различным параметрам с помощью методов машинного обучения: "Logistic Regression", "Support vector machine", "Decision tree", "Gradient boosting", "Random forest". С помощью различных метрик выбор метода, который наиболее эффективно и качественно определяет значение целевого признака.

Решение поставленной задачи

1. Поиск и выбор набора данных для построения моделей машинного обучения. На основе выбранного набора данных студент должен построить модели машинного обучения для решения или задачи классификации, или задачи регрессии

Описание выбранного датасета

Выбранный набор данных описывает выборку звёзд-кандидатов в пульсары, собранную во время исследования «The High Time Resolution Universe Survey».

Пульсары - это редкий тип нейтронных звёзд, которые производят радиоизлучение, обнаруживаемое здесь, на Земле. Они представляют значительный научный интерес для исследования пространства-времени, межзвездной среды и состояний материи.

Когда пульсары вращаются, их луч их излучения проносится по небу, и когда он пересекает линию видимости, образуется обнаруживаемая картина широкополосного радиоизлучения. При динамичном вращении пульсаров эта картина периодически повторяется. Таким образом, поиск пульсаров предполагает поиск периодических радиосигналов с помощью больших радиотелескопов.

Каждый пульсар производит уникальную картину излучения, которая слегка меняется с каждым вращением. Таким образом, потенциальное обнаружение сигнала, рассматриваемого как "кандидат", усредняется по многим вращениям пульсара, определяемым длиной наблюдения. В отсутствие дополнительной информации каждый кандидат потенциально мог бы описать реальный пульсар. Однако на практике почти все обнаружения вызваны радиочастотными помехами (RFI) и шумом, что затрудняет поиск законных сигналов.

Информация об атрибутах:

Каждый кандидат описывается 8 непрерывными переменными и одной переменной класса. Первые четыре являются простыми статистическими данными, полученными из интегрированного импульсного профиля (сложенного профиля). Это массив непрерывных переменных, описывающих разрешенную по долготе версию сигнала, которая была усреднена как по времени, так и по частоте . Остальные четыре переменные аналогично получены из кривой DM-SNR.

- Среднее значение интегрального профиля.
- Стандартное отклонение интегрированного профиля.
- Избыточный эксцесс интегрального профиля.
- Асимметрия интегрированного профиля.
- Среднее значение кривой DM-SNR.
- Стандартное отклонение кривой DM-SNR.
- Избыточный эксцесс кривой DM-SNR.
- Асимметрия кривой DM-SNR.
- Класс

Всего примеров 17 898.

- 1639 положительных примеров.
- 16 259 негативных примеров.

В рассматриваемом примере будем решать задачу классификации:

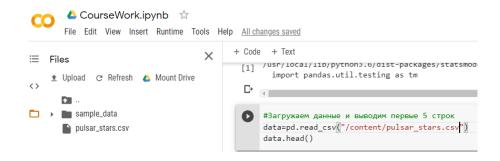
• Для решения задачи классификации в качестве целевого признака будем использовать "target_class" (Класс). Поскольку признак содержит только значения 0 и 1, то это задача бинарной классификации.

Импорт библиотек

```
import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
from sklearn.linear_model import LinearRegression, LogisticRegression
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score, f1_score, classification_report
from sklearn.metrics import confusion_matrix
from sklearn.metrics import plot_confusion_matrix
from sklearn.model selection import GridSearchCV
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, mean_squared_log_error, median_absolute_error, r2_score
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
from sklearn.svm import SVC, NuSVC, LinearSVC, OneClassSVM, SVR, NuSVR, LinearSVR
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, DecisionTreeRegressor, export_graphviz
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier, RandomForestRegressor
from sklearn.ensemble import ExtraTreesClassifier, ExtraTreesRegressor
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier, GradientBoostingRegressor
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")
```

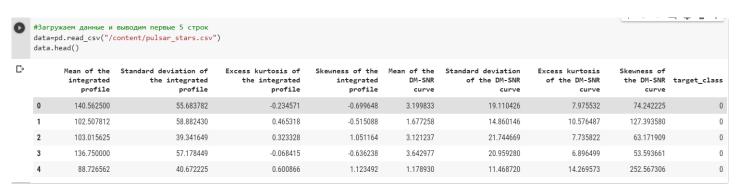
Загрузка данных.

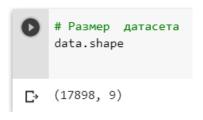
Загрузим файл датасета в помощью библиотеки Pandas.

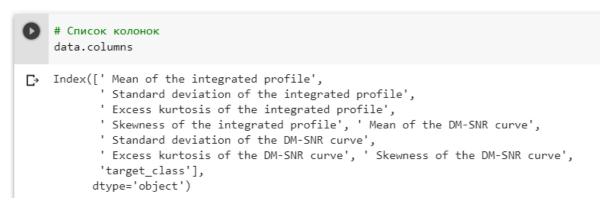


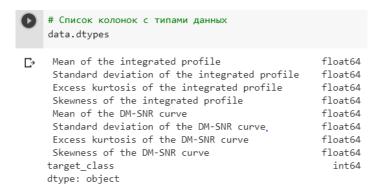
2. Проведение разведочного анализа данных. Построение графиков, необходимых для понимания структуры данных. Анализ и заполнение пропусков в данных.

Основные характеристики датасета

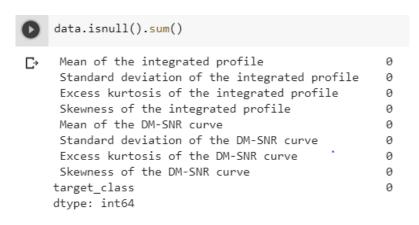






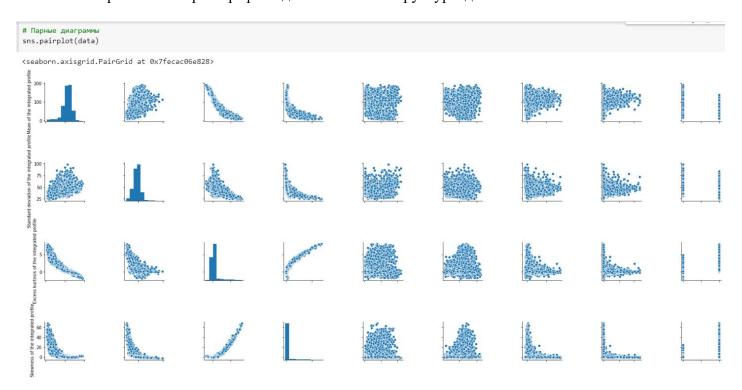


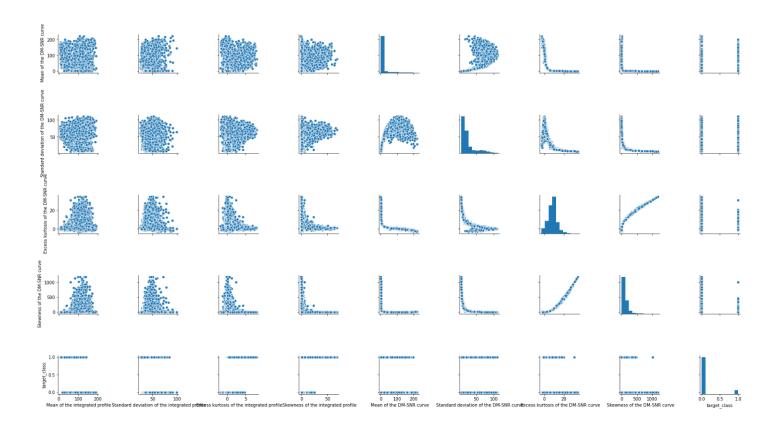
Посмотрим заполненность датасета. Возможно есть пропуски.

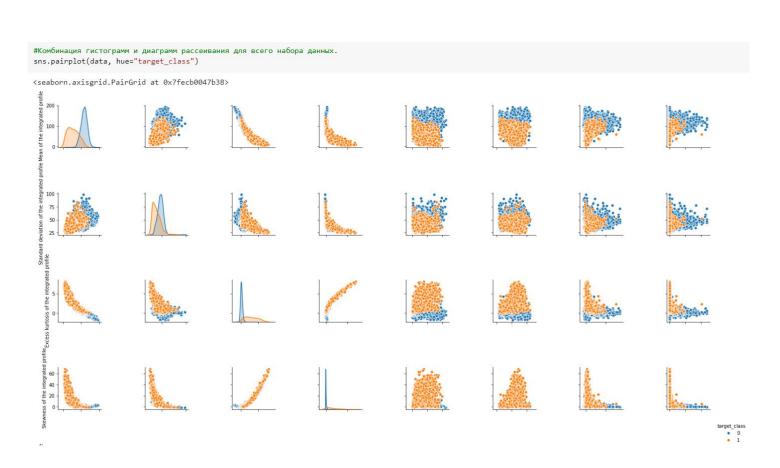


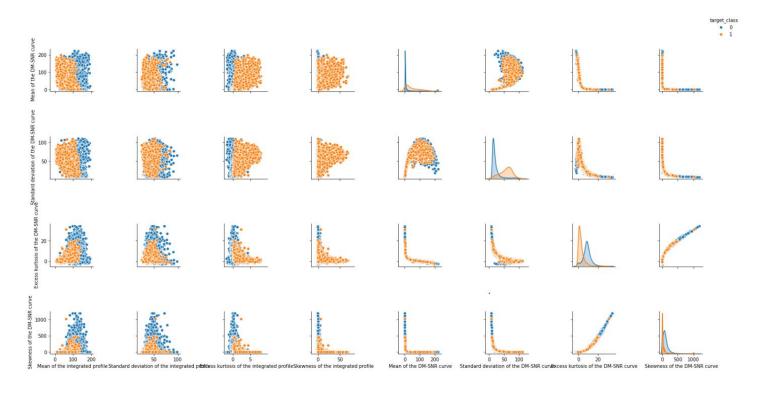
Можем видеть, что пропуски данных отсутствуют

Построим некоторые графики для понимания структуры данных.





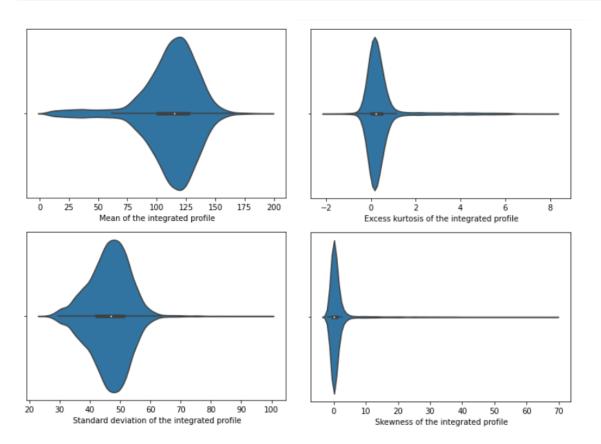


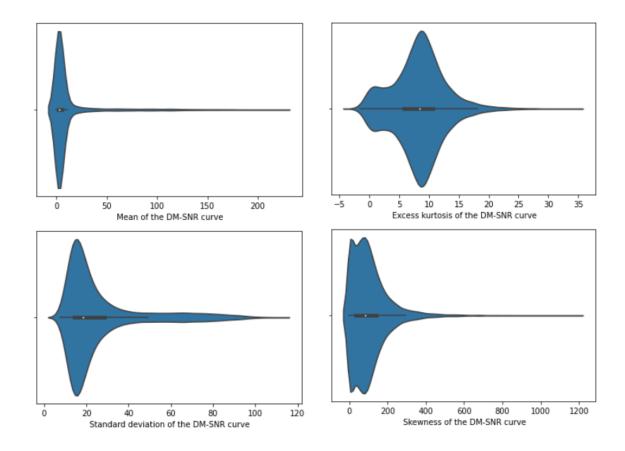


```
[15] # Убедимся, что целевой признак
     # для задачи бинарной классификации содержит только 0 и 1
     data['target_class'].unique()
 □ array([0, 1])
[16] # Оценим дисбаланс классов для целевого признака
     fig, ax = plt.subplots(figsize=(2,2))
     plt.hist(data['target_class'])
     plt.show()
 C→
      15000
      10000
       5000
                  0.5
[18] data['target_class'].value_counts()
D→ 0
          16259
           1639
     1
     Name: target_class, dtype: int64
    # посчитаем дисбаланс классов
     total = data.shape[0]
     class_0, class_1 = data['target_class'].value_counts()
     print('Класс 0 составляет {}%, а класс 1 составляет {}%.'
            .format(round(class\_0 \ / \ total, \ 4)*100, \ round(class\_1 \ / \ total, \ 4)*100))
Г→ Класс 0 составляет 90.84%, а класс 1 составляет 9.16%.
```

Можем наблюдать явно выраженный дисбаланс классов. Но он является приемлемым.

data.columns





3. Выбор признаков, подходящих для построения моделей. Кодирование категориальных признаков. Масштабирование данных. Формирование вспомогательных признаков, улучшающих качество моделей.

data.dtypes	
Mean of the integrated profile Standard deviation of the integrated profile Excess kurtosis of the integrated profile Skewness of the integrated profile Mean of the DM-SNR curve Standard deviation of the DM-SNR curve Excess kurtosis of the DM-SNR curve Skewness of the DM-SNR curve target_class	float64 float64 float64 float64 float64 float64 float64 int64
dtype: object	

Для построения моделей будем использовать все признаки.

Категориальные признаки отсутствуют, их кодирования не требуется. Исключением является признак target_class, но в представленном датасете он уже закодирован на основе подхода LabelEncoding.

Вспомогательные признаки для улучшения качества моделей строить не будем.

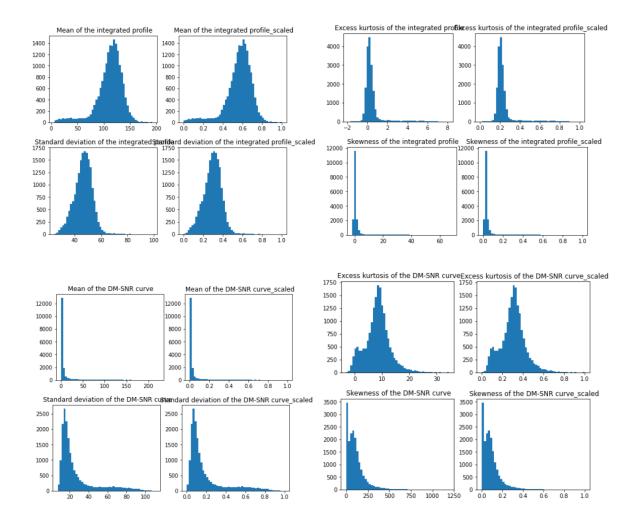
Выполним масштабирование данных.

```
[25] data.head()
 Г⇒
               Mean of the
                                                                                      Skewness of the
                               Standard deviation of
                                                             Excess kurtosis of
                                                                                                           Mean of the
                                                                                                                            Standard deviation
                                                                                                                                                      Excess kurtosis
                                       the integrated profile
                                                                  the integrated profile
                integrated
                                                                                             integrated
                                                                                                                 DM-SNR
                                                                                                                                  of the DM-SNR
                                                                                                                                                        of the DM-SNR
                                                                                                                                                                               the DM-SNR
                                                                                                                                                                                            target_class
                   profile
                                                                                                profile
                                                                                                                                                                  curve
                                                                                                                  curve
                                                                                                                                           curve
                                                                                                                                                                                    curve
                                                                         -0.234571
       0
                  140.562500
                                               55.683782
                                                                                                -0.699648
                                                                                                                3.199833
                                                                                                                                        19.110426
                                                                                                                                                                7.975532
                                                                                                                                                                                 74.242225
                                                                                                                                                                                                         0
                  102.507812
                                               58.882430
                                                                          0.465318
                                                                                                                                        14.860146
                                                                                                                                                               10.576487
                                                                                                                                                                                127.393580
                                                                                                                                                                                                          0
                                                                                                -0.515088
                                                                                                                 1.677258
                  103.015625
                                               39.341649
                                                                          0.323328
                                                                                                1.051164
                                                                                                                3.121237
                                                                                                                                        21.744669
                                                                                                                                                                7.735822
                                                                                                                                                                                 63.171909
                  136.750000
                                               57.178449
                                                                         -0.068415
                                                                                                                                        20.959280
       3
                                                                                                -0.636238
                                                                                                                3.642977
                                                                                                                                                                6.896499
                                                                                                                                                                                 53.593661
                  88 726562
                                               40.672225
                                                                          0.600866
                                                                                                1.123492
                                                                                                                 1.178930
                                                                                                                                        11.468720
                                                                                                                                                               14.269573
                                                                                                                                                                                252.567306
```

```
[31] data.head()
Г⇒
                          Standard
                                          Excess
                                                                             Standard
                                                                                           Excess
              Mean of
                                                      Skewness
                                                                                                     Skewness
                                                                                                                                                           Standard
                                                                                                                                                                               Excess
                                        kurtosis
of the
                                                                                         kurtosis
of the
                          deviation
                                                                            deviation
                                                                  of the
DM-SNR
                                                                                                                                                      deviation of
                                                                                                                                                                          kurtosis of
                            of the
                                                                                of the
                                                                                                                 target class
                                                                                                                                      integrated
                                                                                                                                                                                         the integrated
                                                                                                       DM-SNR
          integrated
                                                    integrated
                                                                                                                                                    the integrated
                                                                                                                                                                      the integrated
                        integrated
profile
                                      integrated
profile
                                                                                DM-SNR
                                                                                           DM-SNR
                                                                                                                                 profile_scaled
                                                                                                                                                                                         profile_scaled
              profile
                                                                                                                                                    profile_scaled
                                                                                                                                                                      profile_scaled
                                                        profile
                                                                                 curve
                                                                                            curve
           140 562500
                          55 683782
                                         -0 234571
                                                       -0.699648 3.199833
                                                                             19 110426
                                                                                          7 975532
                                                                                                     74 242225
                                                                                                                              0
                                                                                                                                          0.721342
                                                                                                                                                            0.417687
                                                                                                                                                                               0.165043
                                                                                                                                                                                                 0.015627
            102.507812
                           58.882430
                                          0.465318
                                                        -0.515088
                                                                  1.677258
                                                                              14.860146
                                                                                          10.576487
                                                                                                     127.393580
                                                                                                                              0
                                                                                                                                          0.517628
                                                                                                                                                            0.460908
                                                                                                                                                                               0.235415
                                                                                                                                                                                                 0.018268
            103.015625
                          39.341649
                                          0.323328
                                                        1.051164 3.121237
                                                                             21.744669
                                                                                           7.735822
                                                                                                                                          0.520346
                                                                                                                                                            0.196868
                                                                                                                                                                               0.221138
                                                                                                                                                                                                 0.040677
            136.750000
                           57.178449
                                         -0.068415
                                                       -0.636238 3.642977
                                                                                                     53.593661
                                                                                                                                          0.700933
                                                                                                                                                            0.437884
                                                                                                                                                                               0.181750
                                                                                                                                                                                                 0.016534
                                                                             20.959280
                                                                                          6.896499
                                                                                                                              0
            88.726562
                          40.672225
                                          0.600866
                                                       1.123492 1.178930
                                                                             11.468720 14.269573 252.567306
                                                                                                                              0
                                                                                                                                          0.443854
                                                                                                                                                            0.214847
                                                                                                                                                                               0.249044
                                                                                                                                                                                                 0.041712
```

```
[32] # Проверим, что масштабирование не повлияло на распределение данных for col in scale_cols:
        col_scaled = col + '_scaled'

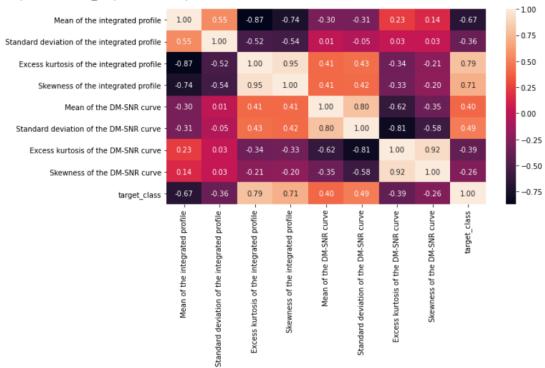
fig, ax = plt.subplots(1, 2, figsize=(8,3))
        ax[0].hist(data[col], 50)
        ax[1].hist(data[col_scaled], 50)
        ax[0].title.set_text(col)
        ax[1].title.set_text(col_scaled)
        plt.show()
```



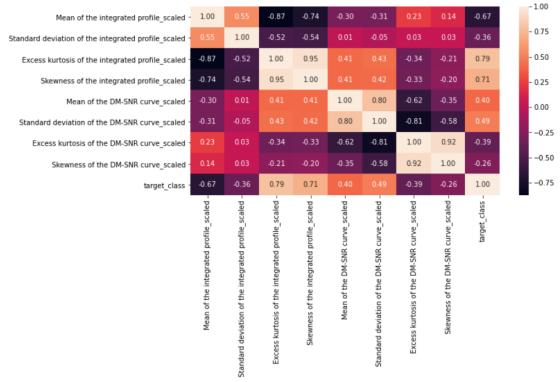
4. Проведение корреляционного анализа данных. Формирование промежуточных выводов о возможности построения моделей машинного обучения.

```
[33] corr_cols_1 = scale_cols + ['target_class']
      corr_cols_1
 [' Mean of the integrated profile',
        Standard deviation of the integrated profile',
         Excess kurtosis of the integrated profile',
       ' Skewness of the integrated profile',
       ' Mean of the DM-SNR curve',
        Standard deviation of the DM-SNR curve',
       ' Excess kurtosis of the DM-SNR curve',
       ' Skewness of the DM-SNR curve',
       'target_class']
[35] scale_cols_postfix = [x+'_scaled' for x in scale_cols]
      corr_cols_2 = scale_cols_postfix + ['target_class']
      corr_cols_2
 [' Mean of the integrated profile_scaled',
        Standard deviation of the integrated profile_scaled',
       ' Excess kurtosis of the integrated profile_scaled',
       ' Skewness of the integrated profile_scaled',
       ' Mean of the DM-SNR curve_scaled'
       ' Standard deviation of the DM-SNR curve_scaled',
' Excess kurtosis of the DM-SNR curve_scaled',
' Skewness of the DM-SNR curve_scaled',
       'target_class']
```

- [37] fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,5))
 sns.heatmap(data[corr_cols_1].corr(), annot=True, fmt='.2f')
- <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7feca7a23860>



- [39] fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,5))
 sns.heatmap(data[corr_cols_2].corr(), annot=True, fmt='.2f')



На основе корреляционной матрицы можно сделать следующие выводы:

- 1. Корреляционные матрицы для исходных и масштабированных данных совпадают.
- 2. Целевой признак классификации "target_class" наиболее сильно коррелирует с признаками:
 - «Excess kurtosis of the integrated profile» (Избыточный эксцесс интегрального профиля) 0.79
 - «Skewness of the integrated profile» (Асимметрия интегрированного профиля) - 0.71 «Standard deviation of the DM-SNR curve» (Стандартное отклонение кривой DM-SNR) 0.49.

Эти признаки обязательно следует оставить в модели классификации.

- 3. Признаки «Excess kurtosis of the DM-SNR curve» (Избыточный эксцесс кривой DM-SNR) и «Skewness of the DM-SNR curve» (Асимметрия кривой DM-SNR) имеют корреляцию, близкую по модулю к 1, поэтому оба признака не следуют включать в модели. Следовало бы исключить один из них, но учитывая слишком малую корреляцию их обоих с целевым признаком, можем сделать вывод о необходимости исключения каждого их этих признаков из модели.
- 4. Признаки «Mean of the integrated profile» (Среднее значение интегрального профиля) и «Standard deviation of the integrated profile» (Стандартное отклонение интегрированного профиля) слишком слабо коррелируют с целевым признаком, поэтому их следует исключить из модели, так как они могут ухудшить её качество.
- 5. Достаточно большие по модулю значения коэффициентов корреляции свидетельствуют о значимой корреляции между исходными признаками и целевым признаком. На основании корреляционной матрицы можно сделать вывод о том, что данные позволяют построить модель машинного обучения.
- 5. Выбор метрик для последующей оценки качества моделей.

В качестве метрик для решения задачи классификации будем использовать:

1. Метрика precision:

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

Доля верно предсказанных классификатором положительных объектов, из всех объектов, которые классификатор верно или неверно определил как положительные.

Используется функция precision_score.

2. <u>Метрика recall</u> (полнота):

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

Доля верно предсказанных классификатором положительных объектов, из всех действительно положительных объектов.

Используется функция recall_score.

3. Метрика F1-мера

Для того, чтобы объединить precision и recall в единую метрику используется F_{β} -мера, которая вычисляется как среднее гармоническое от precision и recall:

$$F_{\beta} = (1 + \beta^2) \cdot \frac{precision \cdot recall}{precision + recall}$$

где β определяет вес точности в метрике.

На практике чаще всего используют вариант F1-меры (которую часто называют F-мерой) при β =1:

$$F_1 = 2 \cdot \frac{precision \cdot recall}{precision + recall}$$

Для вычисления используется функция fl_score .

4. Метрика ROC AUC

Используется для оценки качества бинарной классификации. Основана на вычислении следующих характеристик:

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

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

True Positive Rate, откладывается по оси ординат. Совпадает с recall.

False Positive Rate, откладывается по оси абсцисс. Показывает какую долю из объектов отрицательного класса алгоритм предсказал неверно.

Чем сильнее отклоняется кривая от верхнего левого угла графика, тем хуже качество классификации.

18

В качестве количественной метрики используется площадь под кривой - ROC AUC (Area Under the Receiver Operating Characteristic Curve). Чем ниже проходит кривая тем меньше ее площадь и тем хуже качество классификатора.

Для получения ROC AUC используется функция roc_auc_score.

Сохранение и визуализация метрик

Разработаем класс, который позволит сохранять метрики качества построенных моделей и реализует визуализацию метрик качества.

```
[40] class MetricLogger:
         def __init__(self):
             self.df = pd.DataFrame(
                {'metric': pd.Series([], dtype='str'),
                 'alg': pd.Series([], dtype='str'),
                 'value': pd.Series([], dtype='float')})
         def add(self, metric, alg, value):
             Добавление значения
             # Удаление значения если оно уже было ранее добавлено
             self.df.drop(self.df[(self.df['metric']==metric)&(self.df['alg']==alg)].index, inplace = True)
             # Добавление нового значения
             temp = [{'metric':metric, 'alg':alg, 'value':value}]
             self.df = self.df.append(temp, ignore_index=True)
         def get_data_for_metric(self, metric, ascending=True):
             Формирование данных с фильтром по метрике
             temp_data = self.df[self.df['metric']==metric]
             temp_data_2 = temp_data.sort_values(by='value', ascending=ascending)
             return temp_data_2['alg'].values, temp_data_2['value'].values
         def plot(self, str_header, metric, ascending=True, figsize=(5, 5)):
             Вывод графика
             array_labels, array_metric = self.get_data_for_metric(metric, ascending)
             fig, ax1 = plt.subplots(figsize=figsize)
             pos = np.arange(len(array_metric))
             rects = ax1.barh(pos, array_metric,
                              align='center',
                              height=0.5,
                             tick_label=array_labels)
             ax1.set_title(str_header)
             for a,b in zip(pos, array_metric):
                plt.text(0.5, a-0.05, str(round(b,3)), color='white')
             plt.show()
```

6. Выбор наиболее подходящих моделей для решения задачи классификации или регрессии.

Для задачи классификации будем использовать следующие модели:

• Логистическая регрессия

Метод, используемый для решения задачи бинарной классификации. Метод выдает вероятность принадлежности объекта к нулевому/единичному классам. Используется класс *LogisticRegression*.

• Машина опорных векторов

Основная идея метода — перевод исходных векторов в пространство более высокой размерности и поиск разделяющей гиперплоскости с максимальным зазором в этом пространстве. Две параллельных гиперплоскости строятся по обеим сторонам гиперплоскости, разделяющей классы. Разделяющей гиперплоскостью будет гиперплоскость, максимизирующая расстояние до двух параллельных гиперплоскостей. Алгоритм работает в предположении, что чем больше разница или расстояние между этими параллельными гиперплоскостями, тем меньше будет средняя ошибка классификатора.

Для решения задачи классификации используем класс: *SVC* - основной классификатор на основе SVM. Поддерживает различные ядра.

• Решающее дерево

Для текущего выбранного признака (колонки) из N признаков построить все варианты ветвления по значениям (для категориальных признаков) или по диапазонам значений (для числовых признаков).

Если подвыборке соответствует единственное значение целевого признака, то в дерево добавляется терминальный лист, который соответствует предсказанному значению. Если в подвыборке больше одного значения целевого признака, то предыдущие пункты выполняются рекурсивно для подвыборки.

Для решения задачи классификации используется класс DecisionTreeClassifier.

• Случайный лес (ансамблевая)

Случайный лес можно рассматривать как алгоритмом бэггинга над решающими деревьями.

Но при этом каждое решающее дерево строится на случайно выбранном подмножестве признаков. Эта особенность называется "feature bagging" и основана на методе случайных подпространств.

Случайный лес для задача классификации реализуется в scikit-learn с помощью класса RandomForestClassifier.

Задание параметра n_jobs=-1 распараллеливает алгоритм на максимально возможное количество процессоров.

• Градиентный бустинг (ансамблевая)

В отличие от методов бэггинга и случайного леса, которые ориентированы прежде всего на минимизизацию дисперсии (Variance), методы бустинга ориентированы прежде всего на минимизацию смещения (Bias) и, отчасти, на минимизизацию дисперсии.

Исторически первым полноценным алгоритмом бустинга считается алгоритм AdaBoost.

AdaBoost реализуется в scikit-learn с помощью класса *AdaBoostClassifier* для задач классификации.

7. Формирование обучающей и тестовой выборок на основе исходного набора данных.

Имеем масштабированные данные:

```
[43] target = data['target_class']

data = data.drop('target_class', axis = 1)
```

0	data.columns
C	<pre>Index([' Mean of the integrated profile_scaled',</pre>

[62] data.head()									
C→		Mean of the integrated profile_scaled	Standard deviation of the integrated profile_scaled	Excess kurtosis of the integrated profile_scaled	Skewness of the integrated profile_scaled	Mean of the DM-SNR curve_scaled	Standard deviation of the DM-SNR curve_scaled	Excess kurtosis of the DM-SNR curve_scaled	Skewness of the DM-SNR curve_scaled
	0	0.721342	0.417687	0.165043	0.015627	0.013382	0.113681	0.294986	0.063890
	1	0.517628	0.460908	0.235415	0.018268	0.006560	0.072524	0.364015	0.108443
	2	0.520346	0.196868	0.221138	0.040677	0.013030	0.139188	0.288624	0.054610
	3	0.700933	0.437884	0.181750	0.016534	0.015368	0.131583	0.266348	0.046581
	4	0.443854	0.214847	0.249044	0.041712	0.004327	0.039684	0.462029	0.213369

На основе масштабированных данных выделим обучающую и тестовую выборки:

```
[65] # Признаки для задачи классификации
     task_clas_cols = [' Excess kurtosis of the integrated profile_scaled',
              Skewness of the integrated profile_scaled',
            ' Mean of the DM-SNR curve_scaled',
             ' Standard deviation of the DM-SNR curve_scaled',]
[66] # Выборки для задачи классификации
     clas_data = data[task_clas_cols]
[67] clas_data.head()
 ₽
                                                   Skewness of the Mean of the DM-SNR
                Excess kurtosis of the
                                                                                           Standard deviation of the
             integrated profile_scaled
                                                                           curve_scaled
                                                                                                 DM-SNR curve_scaled
                                                    profile_scaled
      0
                                0.165043
                                                           0.015627
                                                                                0.013382
                                                                                                              0.113681
                                                                                0.006560
      1
                                0.235415
                                                           0.018268
                                                                                                              0.072524
                                                           0.040677
                                                                                0.013030
                                                                                                              0.139188
      2
                                0.221138
                                0.181750
                                                           0.016534
                                                                                0.015368
                                                                                                              0.131583
      3
                                0.249044
                                                           0.041712
                                                                                0.004327
                                                                                                              0.039684
```

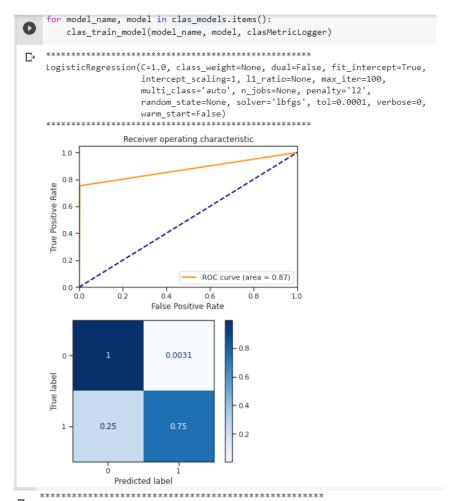
```
#деление на тестовую и обучающую выборку clas_X_train, clas_X_test, clas_Y_train, clas_Y_test = train_test_split( clas_data, target, test_size=0.2, random_state=1) clas_X_train.shape, clas_X_test.shape, clas_Y_train.shape, clas_Y_test.shape

((14318, 4), (3580, 4), (14318,), (3580,))
```

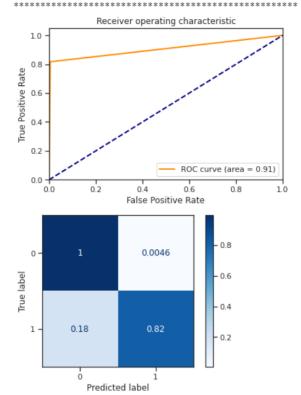
8. Построение базового решения (baseline) для выбранных моделей без подбора гиперпараметров. Производится обучение моделей на основе обучающей выборки и оценка качества моделей на основе тестовой выборки.

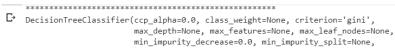
```
[73] def clas_train_model(model_name, model, clasMetricLogger):
        model.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
        Y_pred = model.predict(clas_X_test)
        precision = precision_score(clas_Y_test.values, Y_pred)
        recall = recall_score(clas_Y_test.values, Y_pred)
        f1 = f1_score(clas_Y_test.values, Y_pred)
        roc_auc = roc_auc_score(clas_Y_test.values, Y_pred)
        clasMetricLogger.add('precision', model_name, precision)
        clasMetricLogger.add('recall', model_name, recall)
        clasMetricLogger.add('f1', model_name, f1)
        clasMetricLogger.add('roc_auc', model_name, roc_auc)
        print(model)
        print('*
        draw_roc_curve(clas_Y_test.values, Y_pred)
        plot_confusion_matrix(model, clas_X_test, clas_Y_test.values,
                         display_labels=['0','1'],
                         cmap=plt.cm.Blues, normalize='true')
        plt.show()
```

```
[75] # Отрисовка ROC-кривой
     def draw_roc_curve(y_true, y_score, pos_label=1, average='micro'):
         fpr, tpr, thresholds = roc_curve(y_true, y_score,
                                          pos label=pos label)
         roc_auc_value = roc_auc_score(y_true, y_score, average=average)
         plt.figure()
         lw = 2
         plt.plot(fpr, tpr, color='darkorange',
                  lw=lw, label='ROC curve (area = %0.2f)' % roc_auc_value)
         plt.plot([0, 1], [0, 1], color='navy', lw=lw, linestyle='--')
         plt.xlim([0.0, 1.0])
         plt.ylim([0.0, 1.05])
         plt.xlabel('False Positive Rate')
         plt.ylabel('True Positive Rate')
         plt.title('Receiver operating characteristic')
         plt.legend(loc="lower right")
         plt.show()
```

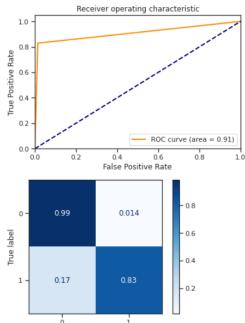


SVC(C=1.0, break_ties=False, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0, decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='rbf', max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True, tol=0.001, verbose=False)





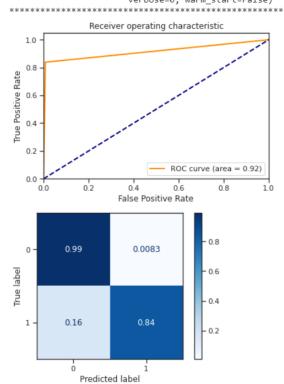
min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,



Predicted label

₽

RandomForestClassifier(bootstrap=True, ccp_alpha=0.0, class_weight=None, criterion='gini', max_depth=None, max_features='auto', max_leaf_nodes=None, max_samples=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, min_samples_leaf=1, min_samples_split=2, min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=100, n_jobs=None, oob_score=False, random_state=None, verbose=0, warm_start=False)



```
GradientBoostingClassifier(ccp_alpha=0.0, criterion='friedman_mse', init=None,
                              learning_rate=0.1, loss='deviance', max_depth=3,
                              max_features=None, max_leaf_nodes=None,
                              min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
                              min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,
                              min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=100,
                              n_iter_no_change=None, presort='deprecated',
                              random_state=None, subsample=1.0, tol=0.0001,
                              validation_fraction=0.1, verbose=0,
                              warm_start=False)
                 Receiver operating characteristic
   0.8
True Positive Rate
   0.6
   0.4
   0.2
                                   ROC curve (area = 0.91)
   0.0
                                   0.6
                                            0.8
            0.99
                          0.0095
True label
                                          0.4
            0.16
```

9. Подбор гиперпараметров для выбранных моделей. Рекомендуется использовать методы кросс-валидации. В зависимости от используемой библиотеки можно применять функцию GridSearchCV, использовать перебор параметров в цикле, или использовать другие методы.

Кросс-валидация

```
#Кроссвалидация
[87] scores_log = cross_val_score(LogisticRegression(),
                              clas_X_train, clas_Y_train, cv=2)
     # Значение метрики accuracy для 2 фолдов
     scores_log, np.mean(scores_log)
 C→ (array([0.96926945, 0.97024724]), 0.9697583461377287)
[88] scores_svc = cross_val_score(SVC(gamma='auto'),
                              clas_X_train, clas_Y_train, cv=2)
     # Значение метрики accuracy для 2 фолдов
     scores_svc, np.mean(scores_svc)
 C→ (array([0.9733203 , 0.97359966]), 0.9734599804441961)
[89] scores_tree = cross_val_score(DecisionTreeClassifier(),
                              clas_X_train, clas_Y_train, cv=2)
     # Значение метрики accuracy для 2 фолдов
     scores_tree, np.mean(scores_tree)
 (array([0.96773292, 0.96745355]), 0.967593239279229)
```

```
[90] scores_rand_tree = cross_val_score(RandomForestClassifier(), clas_X_train, clas_Y_train, cv=2)
# Значение метрики accuracy для 2 фолдов
scores_rand_tree, np.mean(scores_rand_tree)

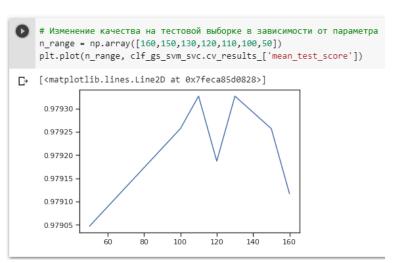
[→ (array([0.97946641, 0.97792988]), 0.9786981421986312)

[91] scores_boost = cross_val_score(GradientBoostingClassifier(), clas_X_train, clas_Y_train, cv=2)
# Значение метрики accuracy для 2 фолдов
scores_boost, np.mean(scores_boost)

[→ (array([0.97848862, 0.97471714]), 0.9766028774968571)
```

Подбор гиперпараметров:

```
[139] parameters = {'gamma':[160,150,130,120,110,100,50]}
                    clf_gs_svm_svc = GridSearchCV(SVC(), parameters, cv=5, scoring='accuracy')
                    clf_gs_svm_svc.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
     GridSearchCV(cv=5, error_score=nan,
                                                                   estimator=SVC(C=1.0, break_ties=False, cache_size=200,
                                                                                                                      class_weight=None, coef0=0.0,
                                                                                                                     decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='rbf', max_iter=-1,
                                                                                                                     \verb|probability=False|, random_state=None|, shrinking=True|,
                                                                                                                      tol=0.001, verbose=False),
                                                                   iid='deprecated', n_jobs=None,
                                                                   param_grid={'gamma': [160, 150, 130, 120, 110, 100, 50]},
                                                                   pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
                                                                   scoring='accuracy', verbose=0)
[140] # Лучшая модель
                     clf_gs_svm_svc.best_estimator_
      \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \end{ta
                                  decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma=110, kernel='rbf', max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
                                   tol=0.001, verbose=False)
[141] # Лучшее значение параметров
                     clf_gs_svm_svc.best_params_
     [→ {'gamma': 110}
```



```
[175] parameters = {'penalty':['l1', 'l2', 'elasticnet']}
      clf_gs_log = GridSearchCV(LogisticRegression(), parameters, cv=5, scoring='accuracy')
      clf_gs_log.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
 FitFailedWarning)
      /usr/local/lib/python3.6/dist-packages/sklearn/model_selection/_validation.py:536: FitFai ValueError: Solver lbfgs supports only 'l2' or 'none' penalties, got elasticnet penalty.
        FitFailedWarning)
      GridSearchCV(cv=5, error score=nan,
                   estimator=LogisticRegression(C=1.0, class_weight=None, dual=False,
                                                 fit_intercept=True,
                                                 intercept_scaling=1, l1_ratio=None,
                                                 max_iter=100, multi_class='auto',
                                                 n_jobs=None, penalty='12',
random_state=None, solver='lbfgs',
                                                 tol=0.0001, verbose=0,
                                                 warm_start=False),
                   iid='deprecated', n_jobs=None,
param_grid={'penalty': ['l1', 'l2', 'elasticnet']},
pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
                   scoring='accuracy', verbose=0)
[176] # Лучшая модель
      clf_gs_log.best_estimator_
 LogisticRegression(C=1.0, class_weight=None, dual=False, fit_intercept=True,
                          intercept_scaling=1, l1_ratio=None, max_iter=100,
                         multi_class='auto', n_jobs=None, penalty='12', random_state=None, solver='lbfgs', tol=0.0001, verbose=0,
                         warm_start=False)
     # Лучшее значение параметров
      clf_gs_log.best_params_
 □→ {'penalty': '12'}
[143] parameters = {'max_depth':[20,15,10,6,5,4,3], 'min_samples_split':[10,8,6,5,4,3,2]}
      clf_gs_decision_tree = GridSearchCV(DecisionTreeClassifier(), parameters, cv=5, scoring='accuracy')
      clf_gs_decision_tree.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
 GridSearchCV(cv=5, error_score=nan,
                   estimator=DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=0.0, class_weight=None,
                                                       criterion='gini', max_depth=None,
                                                       max_features=None,
                                                       max_leaf_nodes=None,
                                                       min\_impurity\_decrease=0.0,
                                                       min_impurity_split=None,
min_samples_leaf=1,
                                                       min_samples_split=2,
                                                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                                                       presort='deprecated',
                                                       random_state=None,
                                                       splitter='best'),
                   iid='deprecated', n\_jobs=None,
                   [144] # Лучшая модель
      clf_gs_decision_tree.best_estimator_
 DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=0.0, class_weight=None, criterion='gini',
                              max_depth=4, max_features=None, max_leaf_nodes=None,
                              min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
                              min_samples_leaf=1, min_samples_split=10,
                              min_weight_fraction_leaf=0.0, presort='deprecated',
                              random_state=None, splitter='best')
     # Лучшее значение параметров
     clf_gs_decision_tree.best_params_
 {'max_depth': 4, 'min_samples_split': 10}
```

```
[146] parameters_random_forest = {'n_estimators':[1, 3, 5, 6, 7, 8, 10],
                                                 'max_depth':[1, 3, 5, 6, 7, 8, 10],
                                                'random_state':[0, 2, 4, 6, 8, 10, 15]}
        best_random_forest = GridSearchCV(RandomForestClassifier(), parameters_random_forest, cv=5, scoring='accuracy')
        best_random_forest.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
  GridSearchCV(cv=5, error score=nan,
                          estimator=RandomForestClassifier(bootstrap=True, ccp_alpha=0.0,
                                                                        class_weight=None,
criterion='gini', max_depth=None,
                                                                        max_features='auto',
                                                                        max_leaf_nodes=None,
                                                                         max_samples=None,
                                                                        min_impurity_decrease=0.0,
min_impurity_split=None,
                                                                        min_samples_leaf=1,
min_samples_split=2,
                                                                        min_weight_fraction_leaf=0.0,
n_estimators=100, n_jobs=None,
                                                                        oob_score=False,
                                                                        random state=None, verbose=0,
                                                                         warm_start=False),
                          iid='deprecated', n_jobs=None,
                          pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
                          scoring='accuracy', verbose=0)
[147] # Лучшая модель
        best_random_forest.best_estimator_
  RandomForestClassifier(bootstrap=True, ccp_alpha=0.0, class_weight=None, criterion='gini', max_depth=6, max_features='auto',
                                        max_leaf_nodes=None, max_samples=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
                                        min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,
min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=10,
                                        n_jobs=None, oob_score=False, random_state=0, verbose=0, warm_start=False)
  best_random_forest.best_params_

¬→ {'max_depth': 6, 'n_estimators': 10, 'random_state': 0}

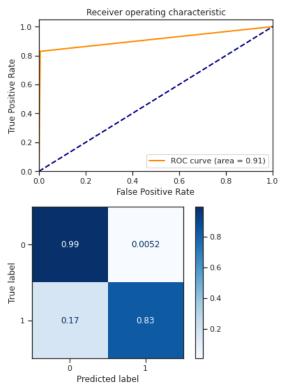
[187] parameters_gradient_boosting = {'n_estimators':[3, 5, 7, 10, 15, 20],
       'max_depth':[3, 5, 7, 9, 10, 15]}
best_gradient_boosting = GridSearchCV(GradientBoostingClassifier(), parameters_gradient_boosting, cv=5, scoring='accuracy')
       best_gradient_boosting.fit(clas_X_train, clas_Y_train)
 GridSearchCV(cv=5, error_score=nan, estimator=GradientBoostingClassifier(ccp_alpha=0.0,
                                                                      criterion='friedman mse'.
                                                                      init=None, learning_rate=0.1,
loss='deviance', max_depth=3,
                                                                      max features=None.
                                                                      max_leaf_nodes=None,
min_impurity_decrease=0.0,
                                                                      min_impurity_split=None,
min_samples_leaf=1,
min_samples_split=2,
                                                                      min_weight_fraction_leaf=0.0,
n_estimators=100,
n_iter_no_change=None,
presort='deprecated',
                                                                      random_state=None,
subsample=1.0, tol=0.0001,
                                                                      validation_fraction=0.1,
verbose=0, warm_start=False),
                       scoring='accuracy', verbose=0)
[188] # Лучшая модель
       best_gradient_boosting.best_estimator_
 GradientBoostingClassifier(ccp_alpha=0.0, criterion='friedman_mse', init=None, learning_rate=0.1, loss='deviance', max_depth=5, max_features=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, min_samples_leaf=1, min_samples_split=2, min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=15, n_iter_no_change=None, presort='deprecated', random_state=None, subsample=1.0, tol=0.0001, validation_fraction=0.1, verbose=0, warm_start=false)
[189] best_gradient_boosting.best_params_
  [ {'max_depth': 5, 'n_estimators': 15}
```

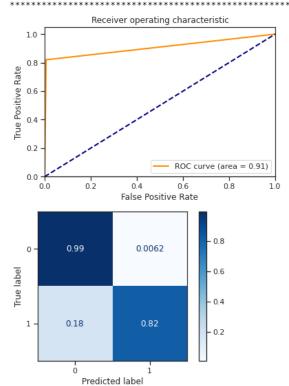
10. Повторение пункта 8 для найденных оптимальных значений гиперпараметров. Сравнение качества полученных моделей с качеством baseline-моделей.

```
# Новые модели с подобранными гиперпараматерами
        clas models grid = {'LogR':clf gs log.best estimator,
                             'SVC':clf_gs_svm_svc.best_estimator_,
                             'Tree':clf_gs_decision_tree.best_estimator_,
                             'RF':best_random_forest.best_estimator_,
                             'GB':best_gradient_boosting.best_estimator_}
    for model_name, model in clas_models_grid.items():
        clas_train_model(model_name, model, clasMetricLogger)
C→
    LogisticRegression(C=1.0, class_weight=None, dual=False, fit_intercept=True,
                        intercept_scaling=1, l1_ratio=None, max_iter=100,
                        multi_class='auto', n_jobs=None, penalty='12',
random_state=None, solver='lbfgs', tol=0.0001, verbose=0,
                        warm_start=False)
                    Receiver operating characteristic
       1.0
       0.8
     True Positive Rate
       0.4
       0.2
                                     ROC curve (area = 0.87)
                   0.2
                            0.4
                                     0.6
                                              0.8
          0.0
                                                       1.0
                          False Positive Rate
                                            0.8
                             0.0031
       0 .
     True label
                                            0.6
                                            0.4
               0.25
       1 ·
                                            0.2
```

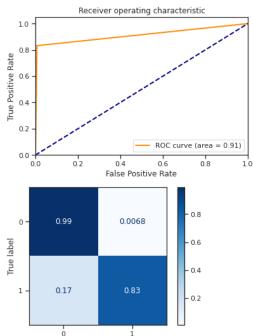
Predicted label

SVC(C=1.0, break_ties=False, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0,
 decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma=110, kernel='rbf',
 max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
 tol=0.001, verbose=False)





n_jobs=None, oob_score=False, random_state=0, verbose=0, warm_start=False) ************



Predicted label ₽ GradientBoostingClassifier(ccp_alpha=0.0, criterion='friedman_mse', init=None, learning_rate=0.1, loss='deviance', max_depth=5, max_features=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, min_samples_leaf=1, min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_samples_split=2, min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=15, n_iter_no_change=None, presort='deprecated', random_state=None, subsample=1.0, tol=0.0001, validation_fraction=0.1, verbose=0,

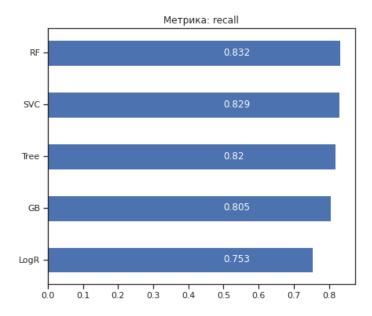
Receiver operating characteristic 1.0 0.8 True Positive Rate 0.6 0.4 0.2 ROC curve (area = 0.90) 0.0 0.2 0.4 0.6 0.0 False Positive Rate 0.8 0.99 0.0052 0 -0.6 True label 0.4 1 0.2 0.2

Predicted label

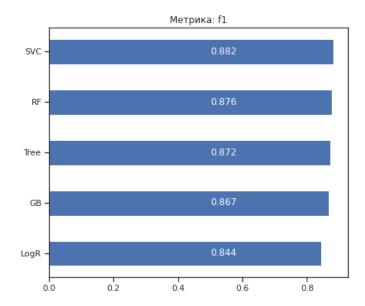
11. Формирование выводов о качестве построенных моделей на основе выбранных метрик. Результаты сравнения качества рекомендуется отобразить в виде графиков и сделать выводы в форме текстового описания.



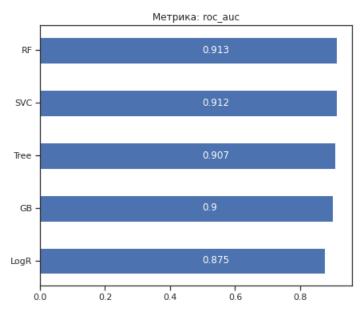
Лучшая модель по метрике precision: Логическая регрессия



Лучшая модель по метрике recall: Случайный лес



Лучшая модель по метрике f1: Метод опорных векторов



Лучшая модель по метрике ROC AUC: Случайный лес

<u>Вывод</u>: на основании двух метрик из четырех используемых, лучшей оказалась модель случайного леса.

Заключение

Из всех рассмотренных алгоритмов: "Logistic Regression", "Support vector machine", "Decision tree", "Gradient boosting", "Random forest" для модели классификации звезды на принадлежность к классу пульсаров наиболее эффективным оказался алгоритм случайного леса, т.е. "Random forest". Как известно Random forest борется с переобучением модели, следовательно можно сделать вывод о том, что датасет является довольно разрозненным, поэтому другие методы могли привести к возникновению проблемы переобучения, а "Random forest" успешно обошёл эту проблему.

Список литературы

- 1. Репозиторий курса "Технологии машинного обучения", бакалавриат, 6 семестр. Лекции по теории машинного обучения. Ю.Е. Гапанюк [Электронный ресурс]. Электрон. дан. URL: https://github.com/ugapanyuk/ml_course_2020/wiki/COURSE_TMO (дата обращения: 31.05.2020)
- 2. Predicting a Pulsar Star [Электронный ресурс]. Электрон. дан. URL: https://www.kaggle.com/pavanraj159/predicting-a-pulsar-star (дата обращения: 31.05.2020)
- 3. Машинное обучение (часть 1). А.М.Миронов [Электронный ресурс]. Электрон. дан. URL: http://www.intsys.msu.ru/staff/mironov/machine learning vol1.pdf (дата обращения:
 - 31.05.2020) Scikit learn[Электронный ресурс]. – Электрон. дан. - URL: https://scikit-
- 4. Scikit learn[Электронный ресурс]. Электрон. дан. URL: https://scikit-learn.org/stable/index.html (дата обращения: 31.05.2020)