Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini

October 6, 2023

1 Preparazione

```
[]: # importo tutti i pacchetti necessari al progetto
     from google.colab import drive
     import numpy as np
     import seaborn as sns
     import matplotlib.pyplot as plt
     import pandas as pd
     import copy
     import missingno as msno
     from tqdm.notebook import tqdm
     import random
     import sklearn.utils
     # importo modelli
     from sklearn.linear_model import LogisticRegression
     from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
     from sklearn.ensemble import (RandomForestClassifier,
                                   IsolationForest)
     # metriche e preprocessing
     from sklearn.impute import KNNImputer
     from sklearn.metrics import (precision_score,
                                  accuracy_score,
                                  confusion_matrix)
     from sklearn.model_selection import (train_test_split,
                                          GridSearchCV,
                                          RandomizedSearchCV,
                                          cross_validate,
                                          ParameterGrid,
                                          StratifiedKFold,
                                          cross_val_score)
     from sklearn.utils import resample
     from sklearn.preprocessing import StandardScaler
     from scipy.stats import ttest_ind
```

```
# imposto random seed
     np.random.seed(17)
     random.seed(17)
     sklearn.utils.check_random_state(17)
[]: RandomState(MT19937) at 0x78A67AEDAE40
[]: # ottengo la colormap e i colori per i grafici
     colors = sns.color_palette("Set3", 12)
     colors
[]: [(0.5529411764705883, 0.8274509803921568, 0.7803921568627451),
      (1.0, 1.0, 0.7019607843137254),
      (0.7450980392156863, 0.7294117647058823, 0.8549019607843137),
      (0.984313725490196, 0.5019607843137255, 0.4470588235294118),
      (0.5019607843137255, 0.6941176470588235, 0.8274509803921568),
      (0.9921568627450981, 0.7058823529411765, 0.3843137254901961),
      (0.7019607843137254, 0.8705882352941177, 0.4117647058823529),
      (0.9882352941176471, 0.803921568627451, 0.8980392156862745),
      (0.8509803921568627, 0.8509803921568627, 0.8509803921568627),
      (0.7372549019607844, 0.5019607843137255, 0.7411764705882353),
      (0.8, 0.9215686274509803, 0.7725490196078432),
      (1.0, 0.9294117647058824, 0.43529411764705883)]
[]: # imposto l'opzione display.float_format per evitare le annotazioni scientifiche
     pd.set_option('display.float_format', '{:.3f}'.format)
     # gestisco le annotazioni scientifiche anche nei grafici
     plt.rcParams['axes.formatter.use_mathtext'] = False
     plt.rcParams['axes.formatter.limits'] = (-6, 6)
[]: # permetto l'accesso a gdrive da colab
     print("Permettere al blocco note di accedere a Google Drive per poter importare,
      →il dataset:")
     drive.mount('/content/drive')
    Permettere al blocco note di accedere a Google Drive per poter importare il
    dataset:
    Drive already mounted at /content/drive; to attempt to forcibly remount, call
    drive.mount("/content/drive", force_remount=True).
[]: # importo il dataset da google drive
     file_id = '1tl7kvwbW-KYf67kMeo6IOCxN-JPHIYxW'
     link = f'https://drive.google.com/uc?id={file_id}'
     df = pd.read_csv(link)
```

import warnings

[]: df []: Hardness ph Solids Chloramines Sulfate Conductivity 204.890 20791.319 0 NaN 7.300 368.516 564.309 1 3.716 129.423 18630.058 6.635 NaN 592.885 2 8.099 224.236 19909.542 9.276 NaN 418.606 3 8.317 214.373 22018.417 8.059 363.267 356.886 4 9.092 181.102 17978.986 6.547 310.136 398.411 3271 4.668 193.682 47580.992 7.167 359.949 526.424 3272 7.809 193.553 17329.802 8.061 NaN 392.450 3273 9.420 175.763 33155.578 7.350 NaN 432.045 3274 5.127 230.604 11983.869 6.303 NaN402.883 3275 7.875 195.102 17404.177 7.509 NaN 327.460 Organic_carbon Trihalomethanes Turbidity Potability 0 10.380 86.991 2.963 0 15.180 4.501 0 1 56.329 2 3.056 0 16.869 66.420 3 100.342 4.629 0 18.437 4 11.558 31.998 4.075 0 •••

66.688

69.845

77.488

78.698

NaN

4.436

2.798

3.299

4.709

2.309

1

1

1

1

1

[3276 rows x 10 columns]

3271

3272

3273

3274

3275

2 Exploratory data analysis

13.894

19.903

11.039

11.169

16.140

2.1 Analisi Esplorativa

Faccio una breve analisi esplorativa del dataset per capire con cosa ho a che fare ed impostare correttamente il lavoro.

2.1.1 Documentazione dati

ppm: parts per million g/L: microgram per litre mg/L: milligram per litre Column description: 1. ph: pH of 1. water (0 to 14). 2. Hardness: Capacity of water to precipitate soap in mg/L. 3. Solids: Total dissolved solids in ppm. 4. Chloramines: Amount of Chloramines in ppm. 5. Sulfate: Amount of Sulfates dissolved in mg/L. 6. Conductivity: Electrical conductivity of water in S/cm. 7. Organic_carbon: Amount of organic carbon in ppm. 8. Trihalomethanes: Amount of Trihalomethanes in g/L. 9. Turbidity: Measure of light emiting property of water in NTU. 10. Potability: Indicates if water is safe for human consumption.

Potable -1 and

Not potable -0

Approfondisco il significato dei dati a disposizione: (abbreviazioni: WHO = World Heatlth Organizatio, MSI = Ministero della Salute Italiano)

• ph rappresenta la misura della concentrazione di ioni di idrogeno (H+) presenti in una soluzione acquosa, varia da 0 (soluzione fortemente acida) a 14 (soluzione fortemente basica). ph 7 indica una soluzione neutra. Il ph dell'acqua potabile dovrebbe restare in un range tra i 6.5 e 8.5.

(fonte: pH in Drinking-water, WHO 2007)

- Hardness rappresenta la durezza dell'acqua, ovvero la quantità di sali di magnesio e/o calcio disciolti in acqua. La durezza non incide significativamente sulla potabilità dell'acqua. (fonte: Hardness in Drinking-water, WHO 2010).
- Solids rappresenta il numero totali di solidi disciolti nella soluzione (TDS) misurato in parti per milione (ppm). Il valore di TDS non dovrebbe incidere sulla potabilità dell'acqua anche se un valore sotto i 1000 ppm (1000 mg/L) è generalmente preferito. (fonte: Total dissolved solids in Drinking-water, WHO 2003).
- Chloramines rappresenta il numero totale di cloramine presenti nell'acqua misurate in ppm. Le cloramine si formano dalla reazione tra il cloro e l'ammoniaca presenti nell'acqua. Sono spesso utilizzate come disinfettante dell'acqua potabile per prevenire la proliferazione di batteri, virus e altri microrganismi nocivi.

 Le linee guida della WHO indicano valori di cloramine sotto a 3mg/L per l'acqua potabile.
- Sulfate rappresenta il numero di sali contenenti l'ione solfato (SO4^2-) presenti in acqua. Hanno effetto sul gusto dell'acqua (valori superiori a 205 mg/L) e sulla salute dell''essere umano (effetti lassativi con valori attorno ai 1000 mg/L). Per questi motivi le linee guida della WHO indicano come limite per l'acqua potabile 500 mg/L di sulfati.

(fonte: Sulfate in Drinking-water, WHO 2004)

(fonte: Monochloramine in Drinking-water, WHO 2004)

• Conductivity indica la capacità dell'acqua di condurre l'elettricità. Viene misurato in microsiemens per centimetro (S/cm) ed è una misura indiretta della quantità di ioni disciolti presenti nell'acqua, che determina la sua capacità di condurre corrente elettrica. Tendenzialmente minore è il valore di conducibilità e maggiore è la sua potabilità. Il limite della conducibilità per l'acqua potabile varia in base alla regolamentazione di ogni Paese, in Italia il limite è di 2500 (S/cm).

(fonte: Conduttivita, MSI 2016)

• Organic_carbon indica la concentrazione di carbonio organico disciolto nell'acqua misurato in ppm. Questo parametro fornisce informazioni sulla presenza di sostanze organiche disciolte. In Italia il limite massimo per legge di carbonio organico in acqua destinata al consumo umano è di 10 mg/L che corrispondono a 10 ppm. Questo valore puù cambiare leggermente nei diversi Stati.

(fonte: Carbonio organico totale, MSI 2016)

• Trihalomethanes (THM) sono un gruppo di composti chimici formati dalla reazione tra il cloro utilizzato per la disinfezione dell'acqua e la materia organica presente nell'acqua, come ad esempio residui vegetali o prodotti di degradazione organica. I THM includono composti come il cloroformio, il bromodichlorometano, il bromoformio e il dibromoclorometano. La

WHO ha stabilito un valore massimo di 200 g/L ma l'Unione Europea e di conseguenza l'Italia hanno adottato misure più stringenti abbassando il limite trialometanoli nell'acqua potabile a 30 g/L.

(fonte: Trihalomethanes in Drinking-water, WHO 2004; Trialometani, MSI 2016)

• Turbidity è una misura della quantità di particelle sospese nell'acqua che influisce sulla sua trasparenza o chiarezza. Viene misurata in unità di Nephelometric Turbidity Units (NTU). Minore è la torbidità e maggiore è la potabilità dell'acqua. La WHO indica come 5 NTU il limite consigliato per considerabile sicura l'acqua.

(fonte: Water quality and health - review of turbidity, WHO 2017)

```
[]: # guardo le dimensioni del dataset df.shape
```

[]: (3276, 10)

```
[]: # guardo alcuni campioni di esempio df.sample(5)
```

```
[]:
               Hardness
                             Solids
                                     Chloramines
                                                  Sulfate
                                                           Conductivity \
     1471 7.584
                  217.283 36343.407
                                           8.533
                                                  375.964
                                                                393.878
                  184.751 28499.107
                                                  330.720
                                                                381.502
     861
           NaN
                                           6.550
     248 6.582
                  272.983 37169.444
                                           8.115 416.083
                                                                351.477
     1346 5.589
                  171.333 17732.241
                                           5.589
                                                  343.042
                                                                466.445
     2539 7.284
                  197.602 23112.504
                                           9.503 332.332
                                                                449.362
```

	Organic_carbon	Trihalomethanes	Turbidity	Potability
1471	17.442	77.722	3.642	0
861	11.044	62.015	3.403	0
248	15.129	79.261	4.202	0
1346	13.828	59.376	4.374	0
2539	14.459	70.000	3.572	0

```
[]: # panoramica generale del df df.info()
```

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 3276 entries, 0 to 3275
Data columns (total 10 columns):

#	Column	Non-Null Count	Dtype
0	ph	2785 non-null	float64
1	Hardness	3276 non-null	float64
2	Solids	3276 non-null	float64
3	Chloramines	3276 non-null	float64
4	Sulfate	2495 non-null	float64
5	Conductivity	3276 non-null	float64
6	Organic carbon	3276 non-null	float64

7 Trihalomethanes 3114 non-null float64 8 Turbidity 3276 non-null float64 9 Potability 3276 non-null int64

 ${\tt dtypes: float64(9), int64(1)}$

memory usage: 256.1 KB

[]: df.describe()

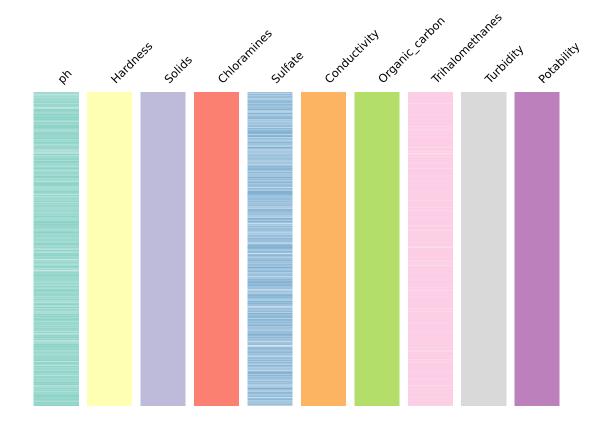
[]:		ph	Hardness	Solids	Chloramines	Sulfate	Conductivity	\
	count	2785.000	3276.000	3276.000	3276.000	2495.000	3276.000	
	mean	7.081	196.369	22014.093	7.122	333.776	426.205	
	std	1.594	32.880	8768.571	1.583	41.417	80.824	
	min	0.000	47.432	320.943	0.352	129.000	181.484	
	25%	6.093	176.851	15666.690	6.127	307.699	365.734	
	50%	7.037	196.968	20927.834	7.130	333.074	421.885	
	75%	8.062	216.667	27332.762	8.115	359.950	481.792	
	max	14.000	323.124	61227.196	13.127	481.031	753.343	
		Organic_	carbon Ti	cihalometha	nes Turbidit	ty Potabi	lity	

	Organic_carbon	Trihalomethanes	Turbidity	Potability
count	3276.000	3114.000	3276.000	3276.000
mean	14.285	66.396	3.967	0.390
std	3.308	16.175	0.780	0.488
min	2.200	0.738	1.450	0.000
25%	12.066	55.845	3.440	0.000
50%	14.218	66.622	3.955	0.000
75%	16.558	77.337	4.500	1.000
max	28.300	124.000	6.739	1.000

[]: ph 2785 Hardness 3276 Solids 3276 Chloramines 3276 Sulfate 2495 Conductivity 3276 Organic_carbon 3276 Trihalomethanes 3114 Turbidity 3276 Potability 2 dtype: int64

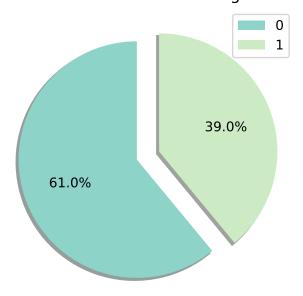
[]: # controllo valori nulli df.isna().sum()

```
[]: ph
                        491
    Hardness
                          0
     Solids
                          0
     Chloramines
                          0
    Sulfate
                        781
     Conductivity
                          0
     Organic_carbon
                          0
    Trihalomethanes
                        162
     Turbidity
                          0
                          0
     Potability
     dtype: int64
[]: # percentuale valori nulli
     df_na_perc = (df.isna().sum() /
                   df.shape[0] *
                   100)
     df_na_perc
[]: ph
                       14.988
    Hardness
                        0.000
     Solids
                        0.000
     Chloramines
                        0.000
     Sulfate
                       23.840
     Conductivity
                        0.000
     Organic_carbon
                        0.000
    Trihalomethanes
                        4.945
     Turbidity
                        0.000
    Potability
                        0.000
     dtype: float64
[]: # rappresento graficamente i valori mancanti
     fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 6), ncols=len(df.columns))
     for i, col in enumerate(df.columns):
         msno.matrix(df[col].to_frame(),
                     color=colors[i],
                     ax=ax[i],
                     fontsize=12,
                     sparkline=False)
         ax[i].set_yticks([]) # rimuovo etichette asse y
     plt.show()
```



```
[]: # osservo il bilanciamento delle classi
     class_count = df["Potability"].value_counts()
     print(class_count)
    0
         1998
    1
         1278
    Name: Potability, dtype: int64
[]: # creo il grafico a torta
     plt.figure(figsize=(4, 4))
     plt.pie(
         class_count,
         colors=(colors[0], colors[10]),
         autopct="%1.1f%%",
         startangle=90,
         shadow=True,
         explode=[0.1,0.1]
     plt.title("bilanciamento classi target")
     plt.legend([0,1], )
     plt.show()
```

bilanciamento classi target



2.1.2 Conclusioni analisi esplorativa:

- il dataset è composta da 3276 campioni e da 10 colonne (9 features ed un target)
- La label è categorica binaria e rappresenta se l'acqua è potabile o meno (dalla documentazione: 0 = non potabile, 1 = potabile)
- La label è numerica (int64)
- le classi 0 ed 1 della label non sono bilanciate. Sono presenti più campioni con Potability = 0 (1998 61%) ovvero non potabile, rispetto che a 1 (1278 39%), ovvero acqua potabile.
- le 9 features rappresentano vari valori misurati nell'acqua che possono incidere sulla potabilità
- tutte le features sono numeriche (float64) e sono continue
- sono presenti valori mancanti nelle features: ph, Sulfate e Trihalomethanes. Rispettivamente il 15%, il 23% ed il 5% dei campioni totali.
- le features non sono nè scalate nè centrate.
- Si notano valori della feature "Solids" molto più alti di quelli attesi (soglia consigliata per acqua potabile da WHO = 1000 ppm, valore medio Solids = 22000 ppm). Inoltre, valori così alti di TDS sono generalmente correlati ad un aumento della conducibilità dell'acqua (alto numero di sali disciolti), ma i valori di conducibilità sono relativamente normali.
 - Probabilmente questo fenomeno è causato da un errore nell'unità di misura che dovrebbe risolversi con la normalizzazione dei dati.

2.2 Fasi di lavoro

In base alle considerazioni sopra elencate procedo alle seguenti operazioni per eseguire l'analisi: - divisione del dataset in training e test set. (questo mi permette di avere una porzione di dati su cui valutare il modello alla fine dell'ottimizzazione e di poter capire se è in grado di generalizzare correttamente su nuovi dati. Eseguo la divisione come prima cosa per non rischiare

di corrompere i dati originali con le varie trasformazioni che andrò ad eseguire) - Identificazione base line model. (Identifico un modello come baseline in modo da poterlo addestrare sui dati ancora grezi ed avere un riferimento nelle operazioni di preprocessing.) - bilanciamento dataset (bilancio le classi del target (potabile - non potabile) in modo che il modello impari a distinguere in ugual modo le due classi e non ci sia preferenza su quella più rappresentata) - identificazione e gestione dei valori nulli o mancanti. (i valori nulli potrebbero dare problemi a diversi modelli (anche durante l'identificazione degli outliers), vado quindi a gestirli eliminandoli o sostituendoli.) - identificazione e gestione degli outliers. (gestisco la presenza di valori anomali nei dati. Identifico sia outliers univariati che multivariati) - standardizzazione features (rendo uniformi le dimensioni dei dati delle diverse features in modo che abbiano un impatto sul modello proporzionato alla variazione e non alla dimensione.)

- **correlazioni** (rappresento una matrice di correlazione tra le diverse features e tra le features ed il target per identificare correlazioni lineari e possibili problemi di multicollinearità)
- feature selection (analizzo l'importanza di ogni features nel portare informazioni utili alla previsione del target e nel caso elimino alcune features che potrebbero aumentare il rumore dei dati.)

2.3 Split set

Vado a splittare il dataset in dataset_train e dataset_test. Divido il dataset con una proporzione tra train e test di 80 a 20 (80% dei campioni nel training set ed il 20 nel test set) in modo da avere abbastanza campioni del training set per poter addestrare il modello ed allo stasso tempo avere un sottoinsieme di campioni sufficientemente grande per il test set in modo che sia rappresentativo dell'intero dataset.

Imposto un random state fisso e mescolo il dataset prima di eseguire lo split.

Eseguo una divisione stratificata sul target in modo da mantenere la stessa proporzione tra campioni "potabile" e "non potabile". Questo mi permette di avere la sicurezza di mantenere un adeguato numero di campioni di entrambe le classi nei due nuovi dataset.

```
[]: # divido il dataset in train e test set

df_train, df_test = train_test_split(
          df,
          test_size=0.2,
          random_state=17,
          shuffle=True,
          stratify=df["Potability"])
```

```
bilanciamento classi Potability in df_train:
0   0.610
1   0.390
```

Name: Potability, dtype: float64

```
[]: # controllo rapporto dimensionale train test
    train_size_perc = round((df_train.shape[0] / df.shape[0]),2)
    test_size_perc = round((df_test.shape[0] / df.shape[0]),2)

print(f"dimensione df_train rispetto a df = {train_size_perc}")
print(f"dimensione df_test rispetto a df = {test_size_perc}")
```

```
dimensione df_train rispetto a df = 0.8
dimensione df_test rispetto a df = 0.2
```

Il bilanciamento delle classi si è mantenuto, 61/39.

Il rapporto dimensionale tra train e test set è di 8/2.

2.4 Base line model

Setto un modello di classificazione come baseline model, in questo caso scelgo un modello Logistic Regression in quanto è relativamente semplice e veloce da implementare ed addestrare.

Successivamente lo andrò ad addestrare sui dati ancora grezzi per avere un riferimento durante le modifiche di preprocessing.

Imposto max_iter=1000 (default=100) per essere sicuro che il modello arrivi a convergenza. Setto un random state fisso in modo da rendere ripetibili i risultati.

Imposto multi_class= "ovr" in quanto il dataset in questione ha un target categorico binario.

2.5 Bilanciamento Dataset

Procedo ora ad una fase di oversampling della classe meno rappresentata in modo da ottenere training set bilanciato (con il 50% dei campioni con Potability = 0 ed il 50% dei campioni con Potability = 1).

Questo permetterà di ottimizzare l'apprendimento dei modelli senza sovrastimare una delle due classi.

```
[]: # conto campioni non potabili in df_train
campioni_non_pota = df_train.loc[
    df_train["Potability"] == 0,
        "Potability"
].count()
print("campioni acqua non potabile: ", campioni_non_pota)
```

campioni acqua non potabile: 1598

```
[]: # conto campioni potabili in df_train
campioni_pota = df_train.loc[
    df_train["Potability"] == 1,
        "Potability"
].count()
print("campioni acqua potabile: ", campioni_pota)
```

campioni acqua potabile: 1022

Uso la funzione resample di sklearn per bilanciare il dataset. La funzione mi permette di eseguire il bootstrap del dataset, ovvero di ottenere n campioni casuali presi con sostituzione. Prendo i campioni della classe meno rappresentata (Potability=1) e li ricampiono con sostituzione in modo da pareggiare il numero di campioni appertenete alle due classi.

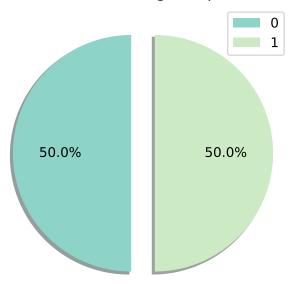
```
[]: # verifico il bilanciamento delle classi
    class_count_aug = df_train_aug["Potability"].value_counts()
    print(class_count_aug)
```

```
0 1598
1 1598
Name: Potability, dtype: int64
```

```
[]: # creo il grafico a torta del bilanciamento
plt.figure(figsize=(4, 4))
plt.pie(
    class_count_aug,
    colors=(colors[0], colors[10]),
    autopct="%1.1f%%",
    startangle=90,
    shadow=True,
    explode=[0.1,0.1]
```

```
plt.title("bilanciamento classi target dopo il resample")
plt.legend([0,1], )
plt.show()
```

bilanciamento classi target dopo il resample



```
[]: # separo X da y

X_train = df_train_aug.drop(columns="Potability")
y_train = df_train_aug["Potability"]

X_test = df_test.drop(columns="Potability")
y_test = df_test["Potability"]
```

2.6 Valori mancanti

Vado a gestire i valori mancanti presenti nel dataset.

Procedo all'imputazione dei valori mancanti mediante l'utilizzo del modello KNNImputer che permette di sostituire i valori mancanti con un valori idonei in base alle features dei campioni più simili.

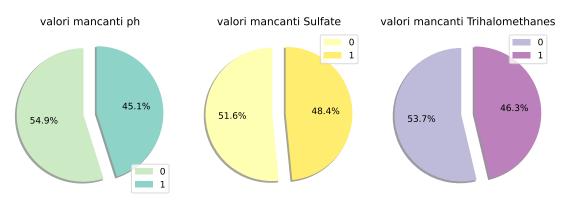
Verifico il bilanciamento dei valori mancanti tra le classi della label

```
for i, col in enumerate(["ph", "Sulfate", "Trihalomethanes"]):
    # calcolo totale dei valori mancanti per le due classi
    missing_valous_pota = df_train_aug.loc[df_train_aug["Potability"]==1][col].

sisna().sum().sum()

    missing_valous_nonpota = df_train_aug.
 Garding and ["Potability"] ==0] [col].isna().sum().sum()
    # stampo a schermo
    print(f"{col}: valori mancanti potabile: {missing_valous_pota}")
    print(f"{col}: valori mancanti non potabile: {missing valous nonpota}")
    ax[i].pie(
        [missing_valous_nonpota, missing_valous_pota],
        colors=plot_colors[i],
        autopct="%1.1f%%",
        startangle=90,
        shadow=True,
        explode=[0.1,0.1]
    ax[i].set_title(f"valori mancanti {col}")
    ax[i].legend([0,1])
plt.tight_layout()
plt.show()
```

ph: valori mancanti potabile: 208
ph: valori mancanti non potabile: 253
Sulfate: valori mancanti potabile: 352
Sulfate: valori mancanti non potabile: 375
Trihalomethanes: valori mancanti potabile: 69
Trihalomethanes: valori mancanti non potabile: 80



Sembra essere presente un leggero sbilanciamento dei valori mancanti probabilmente dovuto alla componente di caso durante la fase di oversampling.

Lo sbilanciamento non è molto marcato e non sembra essere rilevante ai fini dell'analisi.

Procedo all'imputazione con KNNImputer.

Ottimizzo gli iperparametri di KNNImputer andando a valutare l'apprendimento del baseline model.

Per ogni combinazione di parametri di KNNImputer creo una versione diversa di X_train su cui addestro il baseline model e calcolo l'accuratezza e la precisione.

Vado poi a mantenere la versione di X_train che ha ottenuto i migliori punteggi.

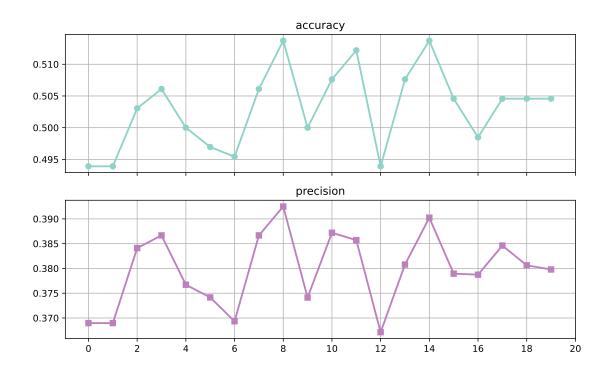
```
[]: # imputazione con KNNImputer
     # creo liste in cui salvare df modificati
     X_train_imp = []
     X test_imp = []
     # creo griglia degli iperparametri da validare
     param_grid = {
         'n_neighbors': np.arange(1,21,2),
         'weights': ['uniform', 'distance']
     }
     # creo tutte le possibili combinazioni di iperparametri
     param_combinations = ParameterGrid(param_grid)
     # creo le diverse versioni di df
     for i, params in tqdm(enumerate(param_combinations),
                           total=len(param_combinations)):
         # addestro su X_train
         imputer = KNNImputer(**params).fit(X_train)
         # trasformo X_train
         X_train_imp += [
             pd.DataFrame(imputer.transform(X_train),
                          columns=X_train.columns).reset_index(drop=True)
         # trasformo X_test (info solo da X_train)
         X test imp += [
             pd.DataFrame(imputer.transform(X_test),
                          columns=X test.columns).reset index(drop=True)
                          1
```

0%| | 0/20 [00:00<?, ?it/s]

```
[]:  # addestro i modelli sulle diverse versioni di X_train
     baseline_imp_acc = []
     baseline_imp_prec = []
     for i in tqdm(range(len(X_train_imp)),
                   total=len(X_train_imp)):
         baseline_model.fit(X_train_imp[i], y_train)
         y_pred = baseline_model.predict(X_test_imp[i])
         baseline_imp_acc += [accuracy_score(y_test, y_pred)]
         baseline_imp_prec += [precision_score(y_test, y_pred)]
      0%1
                   | 0/20 [00:00<?, ?it/s]
[]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,6), sharex=True, nrows=2)
     ax[0].plot(baseline_imp_acc,
                color=colors[0],
                linewidth=2,
                marker="o")
     ax[1].plot(baseline_imp_prec,
                color=colors[9],
                linewidth=2,
                marker="s")
     # imposto grafici
```

ax[0].set_xticks(range(0,21,2))
ax[0].set_title("accuracy")
ax[1].set_title("precision")

ax[0].grid()
ax[1].grid()



Il migliore risultato si è avuto al tentativo numero 8, con accuratezza di circa 0.515 e precisione di circa 0.394.

```
[]: # stampo migliori parametri
     print(f"I parametri di KNNImputer migliori sono: \n {param_combinations[8]}")
    I parametri di KNNImputer migliori sono:
     {'weights': 'uniform', 'n_neighbors': 9}
[]: # salvo i migliori dataset
     X_train_imputed = X_train_imp[8]
    X_test_imputed = X_test_imp[8]
[]: # verifico l'assenza di valori mancanti
     X_train_imputed.isna().sum()
[]: ph
                        0
    Hardness
                        0
     Solids
                        0
     Chloramines
                        0
     Sulfate
                        0
     Conductivity
    Organic_carbon
    Trihalomethanes
                        0
```

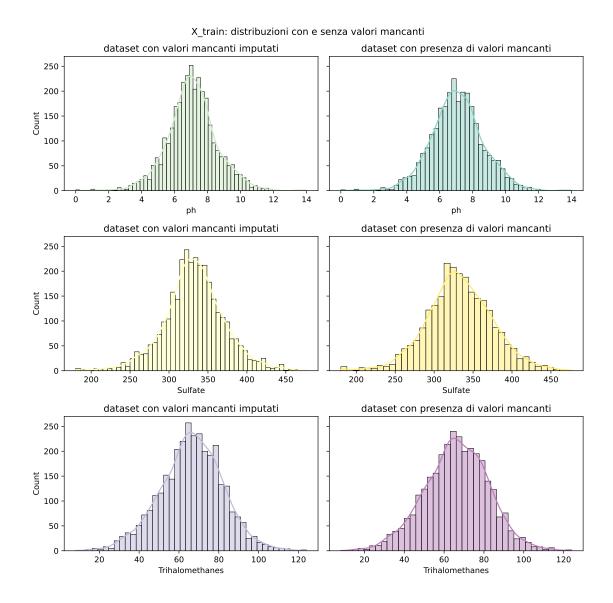
Turbidity

0

dtype: int64

Per essere sicuro che l'imputazione non habbia modificato eccessivamente li informazioni presenti nel dataset, plotto le distribuzioni delle features imputate con e senza imputazioni e le metto a confronto.

```
[]: # confronto distribuzione dati con e senza valori mancanti
     fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,10), ncols=2, nrows=3, sharey=True)
     plt.suptitle("X_train: distribuzioni con e senza valori mancanti")
     features=["ph", "Sulfate", "Trihalomethanes"]
     for i, feature in enumerate(features):
         sns.histplot(data=X_train_imputed[feature],
                     kde=True,
                     ax=ax[i][0],
                     color=plot_colors[i][0])
         ax[i][0].set_title("dataset con valori mancanti imputati")
         sns.histplot(data=X_train[feature],
                     kde=True,
                     ax=ax[i][1],
                     color=plot_colors[i][1])
         ax[i][1].set_title("dataset con presenza di valori mancanti")
    plt.tight_layout()
```



Le features con valori imputati hanno mantenuto una distribuzione dei dati molto simile rispetto a prima dell'imputazione, con una forma a campana centrata.

Dopo l'imputazione la forma della campana risulta leggermente più appuntita ma non viene modificata in modo significativo.

Questo indica che l'imputazione con KNNImputer ha avuto successo, andando a sostituire i valori mancanti con valori coerenti con il dataset.

2.7 Outliers

Eseguo due analisi differenti per gli outliers: univariata con tecnica dell' IQR ed analisi multivariata con modello IsolationForest.

Confronto poi i risultati con il baseline model e mantengo il risultato migliore

2.7.1 Analisi univariata

607

11.752

Controllo le features singolarmente generando grafici della distribuzione e boxplot. Vado poi ad identificare i possibili outliers con la tecnica del IQR (InterQuartile Range).

Unisco X_train_imputed e y_train per lavorare piu agevolmente sui dati in base alla loro classe del label

```
[]: # unisco X_train_imputed e y_train
     df_train_imp = pd.concat(
         [X_train_imputed, y_train],
         axis=1
         ).reset_index(drop=True)
[]: df_train_imp.sample(5)
[]:
                             Solids
                                      Chloramines
             ph Hardness
                                                   Sulfate
                                                            Conductivity \
                  180.402 12878.176
                                            6.424
     2318 6.964
                                                   314.162
                                                                  358.516
     331 8.394
                  187.643 10603.098
                                            7.840 352.836
                                                                  376.241
     3138 5.745
                  208.070 19457.639
                                            6.694
                                                   343.375
                                                                  362.062
     2112 8.077
                  125.303 23931.283
                                            8.773
                                                   317.693
                                                                  398.329
     607 9.131
                  226.404 19968.678
                                            5.724
                                                   386.700
                                                                  440.543
           Organic_carbon
                           Trihalomethanes
                                            Turbidity Potability
     2318
                   16.330
                                     66.303
                                                 4.490
                                                                  1
     331
                   13.375
                                     58.950
                                                 2.834
                                                                  0
     3138
                   15.604
                                     82.318
                                                 3.534
                                                                  1
     2112
                   15.280
                                     62.668
                                                                  1
                                                 4.280
```

Distribuzione Creo i grafici delle distribuzioni delle feature in modo da poter avere una visione complessiva dei dati.

5.288

0

58.874

```
[]: # imposto figura
fig, axs = plt.subplots(
    figsize=(12, 9),
    nrows=3,
    ncols=3
)
axs = axs.ravel()

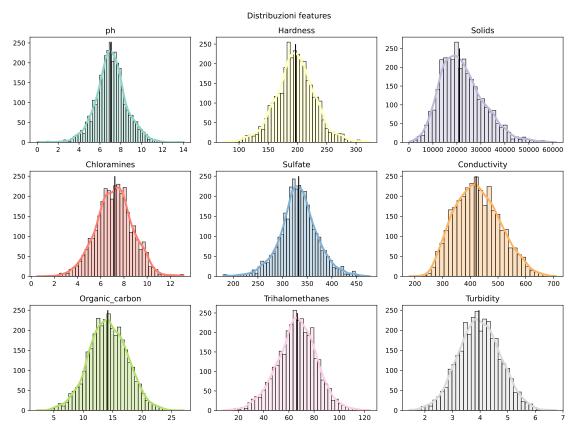
# imposto gli histplot
for i, col in enumerate(df_train_imp.columns[:-1]):
    sns.histplot(
        df_train_imp,
        x=df_train_imp[col],
        color=colors[i],
        ax=axs[i],
```

```
kde=True,
    line_kws={"linewidth": 3},
    alpha=0.4
)

# traccio mediana
axs[i].vlines(
    df_train_imp[col].median(),
    ymin=0,
    ymax=250,
    color="k")

# imposto titolo e labels
axs[i].set_title(col)
axs[i].set_xlabel("")
axs[i].set_ylabel("")
plt.suptitle("Distribuzioni features")

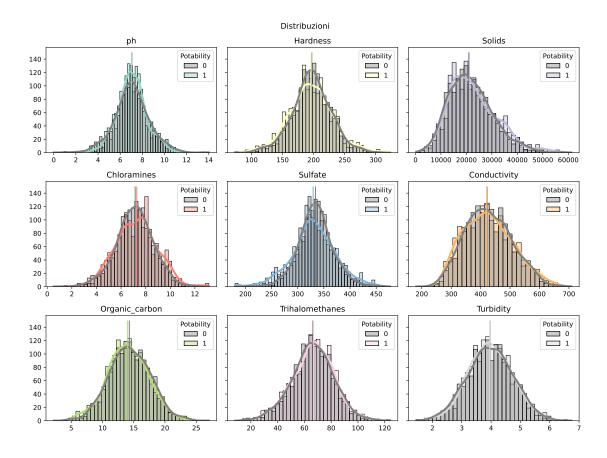
plt.tight_layout()
```



Rappresento anche le distribuzioni delle features divise per le classi della label in modo da poter

cogliere possibili differenze.

```
[]: # imposto figura
     fig, axs = plt.subplots(
        figsize=(12, 9),
         nrows=3,
         ncols=3,
         sharey=True
     axs = axs.ravel()
     # imposto gli histplot
     for i, col in enumerate(df_train_imp.columns[0:-1]):
         sns.histplot(
             df_train_imp,
             x=df_train_imp[col],
             hue="Potability",
             palette=("gray",colors[i]),
             ax=axs[i],
             kde=True,
             line_kws={"linewidth": 3},
             alpha=0.4
         # traccio mediana O
         axs[i].vlines(
             df_train_imp[col].loc[df_train_imp["Potability"]==0].median(),
             ymin=0,
             ymax=150,
             color="gray")
         # traccio mediana 1
         axs[i].vlines(
             df_train_imp[col].loc[df_train_imp["Potability"]==1].median(),
             ymin=0,
             ymax=150,
             color=colors[i])
         # imposto titolo e labels
         axs[i].set_title(col)
         axs[i].set_xlabel("")
         axs[i].set_ylabel("")
     plt.suptitle("Distribuzioni")
    plt.tight_layout()
```



L'andamento delle distribuzioni di tutte le features sembra essere centrato e con andamento a campana simmetrica. L'unica feature che ha una distribuzione con andamento leggermente asimmetrico è "Solids" che ha la coda di destra più lunga.

Boxplot Creo un boxplot per ogni feature in modo da osservare mediana, primo e tezo quartile ed outliers nei dati.

```
[]: # imposto figura
fig, axs = plt.subplots(
    figsize=(12, 6),
    nrows=3,
    ncols=3,
    sharey=True
)
axs = axs.ravel()

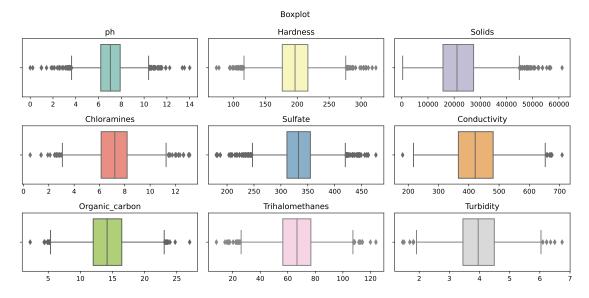
# imposto gli histplot
for i, col in enumerate(df_train_imp.columns[0:-1]):
    sns.boxplot(
        df_train_imp,
        x=df_train_imp[col],
```

```
orient="h",
    color=colors[i],
    ax=axs[i]
)

# imposto titolo e labels
    axs[i].set_title(col)
    axs[i].set_xlabel("")
    axs[i].set_ylabel("")

plt.suptitle("Boxplot")

plt.tight_layout()
```

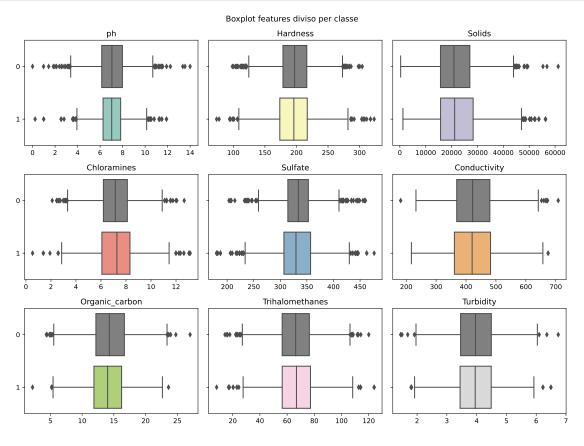


Divido i boxplot in base alle classi della label in modo da identificare possibili differenze tra i dati inerenti all'acqua potabile e quelli inerenti all'acqua non potabile.

```
data=df_train_imp,
    y="Potability",
    x=col,
    orient="h",
    palette=("gray",colors[i]),
    ax=axs[i]
)

axs[i].set_title(col)
    axs[i].set_xlabel("")
    axs[i].set_ylabel("")

# imposto titolo e layout
plt.suptitle(
    "Boxplot features diviso per classe",
    horizontalalignment="center"
)
plt.tight_layout()
```



I grafici mostrano la presenza di numerosi outliers per entrambe le classi della label. calcolo il numero di outliers per ogni colonna

```
[]: # creo un dizionario in cui salvare qli indici degli outliers
     outliers_dict = {
         'ph': [],
         'Hardness': [],
         'Solids': [],
         'Chloramines': [],
         'Sulfate': [],
         'Conductivity': [],
         'Organic_carbon': [],
         'Trihalomethanes': [],
         'Turbidity': []
     # creo variabile di appoggio per salvare il numero totale di outliers
     tot_outliers = 0
     # creo un set di appoggio per salvare gli indici con outliers e non avere⊔
      \rightarrow duplicati
     outliers set = set({})
     # itero sulle classi del label
     for label in [0, 1]:
         # itero sulle colonne
         for column in df_train_imp.columns[:-1]:
             # calcolo i margini per gli outliers
             q1 = df_train_imp.loc[df["Potability"] == label, column].quantile(0.25)
             q3 = df_train_imp.loc[df["Potability"] == label, column].quantile(0.75)
             iqr = q3 - q1
             lower_tail = q1 - 1.5 * iqr
             upper_tail = q3 + 1.5 * iqr
             # identifico gli outlirs
             outliers = df_train_imp[(df_train_imp["Potability"] == label) &
                            ((df_train_imp[column] > upper_tail) |
                             (df_train_imp[column] < lower_tail))].index.tolist()</pre>
             #aggiungo gli indici al dict
             outliers_dict[column].extend(outliers)
             outliers_set.update(outliers)
```

```
[]: # stampo a schermo numero outliers
for i, key in enumerate(outliers_dict.keys()):
    print(f"{key:16} {len(outliers_dict[key])}")
    tot_outliers += len(outliers_dict[key])
print()
print(f"TOT outliers = {tot_outliers}")
```

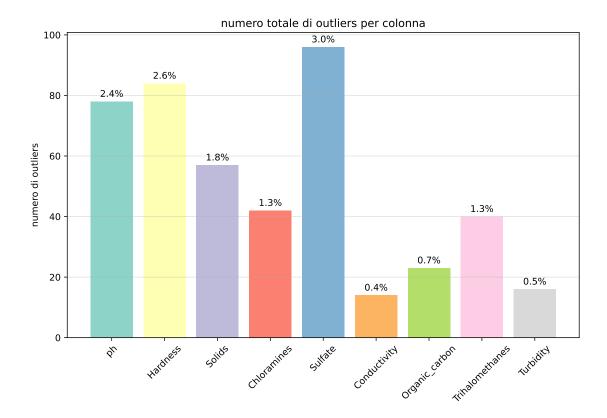
```
print(f"numero di campioni con almeno un outlier: {len(outliers set)}")
                           78
     ph
                           84
     Hardness
     Solids
                           57
     Chloramines
                           42
     Sulfate
                           96
     Conductivity
                           14
     Organic_carbon
                           23
     Trihalomethanes 40
     Turbidity
                           16
     TOT outliers =
                           450
     numero di campioni con almeno un outlier: 395
     calcolo percentuale outliers
[]: # calcolo il numero totale di campioni per ogni colonna
      num_samples = df_train_imp.shape[0]
      # calcolo il numero di outliers per ogni colonna
      outliers count = []
      for column, outliers in outliers_dict.items():
           outliers_count.append(len(outliers))
      # calcolo la percentuale di outliers per ogni colonna
      outliers_percentage = (np.array(outliers_count) /
                                    num_samples * 100)
      # calcolo percentuale sul totale dei dati
      tot_dati = df_train_imp.shape[0] * (df_train_imp.shape[1]-1)
      tot_outliers_perc = (tot_outliers /
                                   tot_dati *
                                   100)
      samples_with_outliers_perc = (len(outliers_set) /
                                             df_train_imp.shape[0] *
                                             100)
      # stampo a schermo
      for i, key in enumerate(outliers_dict.keys()):
           print(f"{key:16} {outliers_percentage[i]:.2f}%")
      print()
      print(f"percentuale outliers sui dati totali = {tot_outliers_perc:.2f}%")
      print(f"percentuale campioni con outliers = {samples_with_outliers_perc:.

<pre
                           2.44%
     ph
     Hardness
                           2.63%
```

```
1.78%
Solids
Chloramines
                 1.31%
                 3.00%
Sulfate
Conductivity
                0.44%
Organic carbon
                 0.72%
Trihalomethanes 1.25%
Turbidity
                 0.50%
percentuale outliers sui dati totali = 1.56%
percentuale campioni con outliers =
                                       12.36%
```

Rappresento graficamente gli outliers trovati

```
[]: # creo l'indice per le barre
     ind = np.arange(len(outliers_dict.keys()))
     # creo il grafico a barre
     fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 6))
     bars = ax.bar(ind,
                   outliers_count,
                   color=colors)
     ax.grid(axis="y",
             alpha=0.4)
     # aggiungo l'annotazione per la percentuale di outliers
     for i, bar in enumerate(bars):
         height = bar.get_height()
         ax.annotate(f'{outliers_percentage[i]:.1f}%',
                     xy=(bar.get_x() + bar.get_width() / 2,
                         height),
                     xytext=(0, 3),
                     textcoords="offset points",
                     ha='center',
                     va='bottom')
     \# imposto i nomi delle colonne come etichette sull'asse x
     ax.set_xticks(ind)
     ax.set_xticklabels(outliers_dict.keys(),
                        rotation=45,
                        ha='center')
     # aggiungo etichette agli assi e titolo del grafico
     ax.set_ylabel('numero di outliers')
     ax.set_title('numero totale di outliers per colonna')
     # mostro il grafico
     plt.show()
```



L'analisi univariata degli outliers basata su IQR ha portato all'identificazione di 450 outliers (1.56% dei dati totali).

I campioni con almeno un outlier sono 395 (12.36% dei campioni totali).

df_train_out_uni.drop(index=list(outliers_set), inplace=True)

La feature con più outliers è "Sulfate" con un totale di 96 outliers (3.0% della colonna).

La feature con meno outliers è "Conductivity" con un totale di 14 outliers (0.4% della colonna).

Vado ad eliminare gli outliers identificati nel dataset

```
[]: # creo una copia del dataset df_train_nonull per gli outliers univariati
    df_train_out_uni = df_train_imp.copy()
[]: # elimino i campioni con outliers
```

la differenza di campioni tra df_train_nonull e df_train_out_uni è di: 395 campioni

```
[]: # divido il dataset df_train in X_train, y_train
X_train_out_uni = df_train_out_uni.drop(columns="Potability")
y_train_out_uni = df_train_out_uni["Potability"]
```

```
[]: # addestro baseline model
baseline_model.fit(X_train_out_uni, y_train_out_uni)

# predico y_test
y_pred_out_uni = baseline_model.predict(X_test_imputed)

# calcolo metriche
accuracy_out_uni = accuracy_score(y_test, y_pred_out_uni)
precision_out_uni = precision_score(y_test, y_pred_out_uni)

# stampo a schermo
print(f"accuratezza: {accuracy_out_uni:.3f}")
print(f"precisione: {precision_out_uni:.3f}")
```

accuratezza: 0.500 precisione: 0.370

i punteggi di accuracy e precision sono peggiorati rispetto all'addestramento con ouliers. Provo un altra tecnica di individuazione degli outliers.

2.7.2 Analisi multivariata

procedo all'identificazione degli outliers utilizzando una seconda tecnica di ricerca degli outliers: IsolationForest. Questo modello analizza i campioni del dataset confrontandoli ed individuando quelli che hanno una certa diversità rispetto agli altri.

I parametri principali del modello sono: - "contamination" che influenza il numero di outliers che il modello identifica. - "n_estimators" che specifica il numero di alberi della foresta - "max_samples" che specifica il numero di campioni su cui addestrare ogni albero

Per ottenere il risultato migliore, eseguo una ricerca dei parametri migliori andando ad addestrare il modello IsolationForest sul dataset provando diverse combinazini di parametri. Per ogni addestramento ricavo una versione del dataset con diversi outliers eliminati. Addestro infine il baseline model su tutte queste versioni del dataset per ricavare quale ottiene il punteggio migliore.

```
0.10,
        0.15,
        0.20.
        "auto"
        ],
    "n_estimators": [
        10,
        30,
        100,
        300,
        1000
        ],
    "max_samples": [
        "auto",
        0.2,
        0.4,
        0.6,
        0.8
        ]
}
# creo tutte le possibili combinazioni di iperparametri
param_combinations = ParameterGrid(param_grid)
# creo le diverse versioni di df
for i, params in tqdm(enumerate(param_combinations),
                      total=len(param_combinations)):
    \# addestro su X_train_imputed
    iso = IsolationForest(random_state=17, **params).fit(X_train_imputed.
 →values, y_train)
    # ricavo gli outliers
    multi_out_train += [iso.predict(X_train_imputed.values)]
    # creo nuovo df senza outliers (1=inliers, -1=outliers)
    X_train_out_multi += [X_train_imputed[multi_out_train[i]==1]]
    y_train_out_multi += [y_train[multi_out_train[i]==1]]
 0%|
              | 0/125 [00:00<?, ?it/s]
```

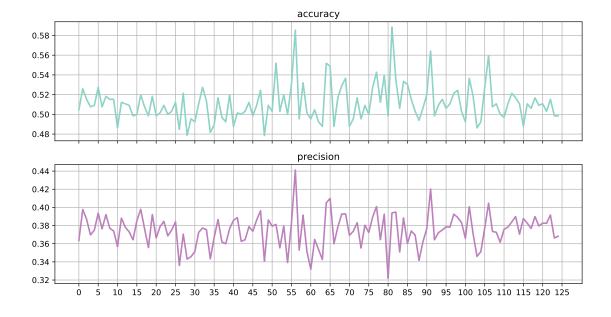
```
# addestro baseline model
baseline_model.fit(X_train_out_multi[i], y_train_out_multi[i])

# predico y_test
y_pred_out_multi = baseline_model.predict(X_test_imputed)

# calcolo metriche
acc_out_multi += [accuracy_score(y_test, y_pred_out_multi)]
prec_out_multi += [precision_score(y_test, y_pred_out_multi)]
```

0%| | 0/125 [00:00<?, ?it/s]

```
[]: # creo grafico dei risultati
     fig, ax = plt.subplots(figsize=(12,6), sharex=True, nrows=2)
     # accuratezza
     ax[0].plot(acc_out_multi,
                color=colors[0],
                linewidth=2)
     #precisione
     ax[1].plot(prec_out_multi,
                color=colors[9],
                linewidth=2)
     # imposto grafici
     ax[0].set_xticks(range(0,126,5))
     ax[0].set_title("accuracy")
     ax[1].set_title("precision")
     ax[0].grid()
     ax[1].grid()
```



Sembra che la combinazione migliore di parametri per IsolationForest sia la numero 56, con accuratezza di circa 0.585 e precisione sopra a 0.44.

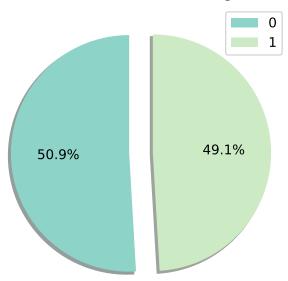
```
[]: # stampo a schermo risultati
     print(f"tentativo migliore: n.56")
     print(f"accuratezza: {acc_out_multi[56]:.3f}")
print(f"precisione: {prec_out_multi[56]:.3f}")
     print("")
     print(f"la combinazione di parametri migliori per Isolation forest è:")
     print(param_combinations[56])
    tentativo migliore: n.56
    accuratezza:
                         0.585
    precisione:
                         0.441
    la combinazione di parametri migliori per Isolation forest è:
    {'n_estimators': 30, 'max_samples': 0.2, 'contamination': 0.15}
[]: # conto il numero di outliers eliminati
     n_out = len(multi_out_train[56][multi_out_train[56]==-1])
     print(f"numero outliers identificati ed eliminati: {n_out}")
    numero outliers identificati ed eliminati: 480
[]: # salvo i dati senza outliers (no out)
     X_train_nout = X_train_out_multi[56].reset_index(drop=True)
     y_train_nout = y_train_out_multi[56].reset_index(drop=True)
     # per comodità rinomino anche il test con stessa dicitura
     X_test_nout = X_test_imputed.reset_index(drop=True)
     y_test_nout = y_test.reset_index(drop=True)
[]: # verifico il bilanciamento delle classi dopo l'eliminazione degli outliers
     class_count_nout = y_train_nout.value_counts()
     print(class_count_nout)
     # creo il grafico a torta
     plt.figure(figsize=(4, 4))
     plt.pie(
         class_count_nout,
         colors=(colors[0], colors[10]),
         autopct="%1.1f%%",
         startangle=90,
         shadow=True,
         explode=[0.1,0.1]
```

```
plt.title("bilanciamento classi target")
plt.legend([0,1], )
plt.show()
```

0 13831 1333

Name: Potability, dtype: int64

bilanciamento classi target



L'analisi multivariata degli outliers con IsolationForest ha portato risultati migliori rispetto all'analisi univariata con tecnica dell'IQR.

Dopo leliminazione dei valori anomali il dataset è rimasto abbastanza bilanciato con uno scostamento dal bilanciamento perfeto 50/50 di meno dell'1% (50.9% e 49.1%).

Mantengo quindi come dataset df_train_nout come train set.

2.8 Standardizzazione

Procedo a standardizzare i dati.

Utilizzo per questo processo StandardScaler che permette la trasformazione dei dati in modo che abbiano una media zero e una deviazione standard unitaria.

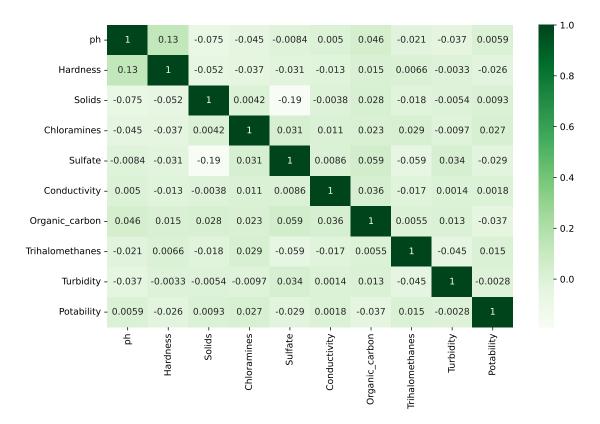
```
[]: # definisco lo scaler
scaler = StandardScaler().fit(X_train_nout)
```

```
# scalo i dati di train
X_train_scaled = pd.DataFrame(
    scaler.transform(X_train_nout),
    columns=X_train_nout.columns
    ).reset_index(drop=True)

# scalo i dati di test (con info solo da X_train)
X_test_scaled = pd.DataFrame(
    scaler.transform(X_test_nout),
    columns=X_test_nout.columns
    ).reset_index(drop=True)
```

2.9 Correlazioni

[]: <Axes: >



La matrice di correlazione mostra che le correlazioni lineari tra le features sono molto deboli (tutti i valori sono molto vicino a 0). Questo indica che i diversi parametri dell'acqua misurati non si influenzano in modo lineare l'uno con l'altro, ma ciò non esclude possibili correlazioni non lineari. Questo implica che modelli lineari probabilmente non riusciranno a prevedere in modo adeguato il target.

2.10 Selezione features

Per identificare se la media delle feature nei campioni con label = 0 è significativamente differente dalla media nei campioni con label = 1 utilizzo il t-test di Student per confrontare le medie dei due gruppi. (non il chi quadrato in quanto è adatto a solo variabili categoriche)

Ipotesi del Test: - Ipotesi nulla (H0): Non ci sono differenze statisticamente significative tra le medie dei due gruppi. - Ipotesi alternativa (H1): Esistono differenze statisticamente significative tra le medie dei due gruppi.

Il t-test per campioni indipendenti viene utilizzato per confrontare le medie delle feature tra i gruppi label 0 e label 1. Questo permette di identificare le feature con differenze statisticamente significative tra i due gruppi. Inoltre, l'analisi delle feature potrebbe aiutarmi a selezionare quelle che influenzano maggiormente la previsione del target.

```
[]: # Separa le feature continue dal DataFrame e la variabile di classe (label) features = df_train_scaled.drop('Potability', axis=1)
```

Organic_carbon : 0.055
Sulfate : 0.132
Chloramines : 0.155
Hardness : 0.177
Trihalomethanes: 0.446
Solids : 0.630
ph : 0.757
Turbidity : 0.885
Conductivity : 0.925

In questo caso i valori di p sono relativamente alti (tutti sopra lo standard dello 0.05), ciò significa che c'è un rischio relativamente alto che le differenze dei due gruppi siano dovute al caso e non a differenze reali dei due gruppi.

Si nota comunque una differenza abbastanza netta tra i valori p
 delle prime 4 features (p < 0.18) e le restanti (p > 0.44). Seleziono quindi queste features come le più rilevanti: - Organic_carbon - Sulfate - Chloramines - Hardness

Creo due dataset diversi, uno con tutte le features ed uno con le sole 4 più rilevanti.

Successivamente andrò ad addestrare diversi modelli su questi due dataset per ottenere il modello migliore.

```
[]: # creo i dataset per l'analisi, con tutte le features e con solo le 4 migliori

# dati con tutte le features
X_train_1 = df_train_scaled.drop("Potability", axis=1)
X_test_1 = df_test_scaled.drop("Potability", axis=1)

# dati con solo 4 features
X_train_2 = X_train_1[["Organic_carbon", "Sulfate", "Chloramines", "Hardness"]]
X_test_2 = X_test_1[["Organic_carbon", "Sulfate", "Chloramines", "Hardness"]]
```

```
# label comune ad entrambi i dataset
y_train = df_train_scaled["Potability"]
y_test = df_test_scaled["Potability"]
```

3 Metrica di valutazione

Vado ad esaminare le diverse metriche di valutazione utilizzabili in questo contesto per poter scegliere la metrica più adeguata.

Abbreviazioni:

TP = True Positive. TN = True Negative. FP = False Positive. FN = False Negative.

Accuracy (Accuratezza):

L'accuratezza misura la frazione di previsioni corrette rispetto al totale delle previsioni. È la metrica più comune ma può essere fuorviante se le classi sono sbilanciate e non da indicazioni sul tipo di errore commesso dal modello.

Formula: (TP + TN) / (TP + TN + FP + FN).

Precision (Precision):

La precisione rappresenta la frazione di previsioni positive corrette rispetto al totale delle previsioni positive fatte dal modello. È importante quando è rilevante non avere troppi errori falsi positivi. Formula: TP / (TP + FP).

Recall (Richiamo o Sensibilità):

Il recall misura la frazione di veri positivi individuati dal modello rispetto al totale dei veri positivi presenti nel dataset. È importante quando il costo degli errori falsi negativi è alto.

Formula: TP / (TP + FN).

Specificità:

La specificità rappresenta la capacità di un modello di identificare correttamente i casi negativi rispetto al totale dei casi negativi presenti nel dataset. In altre parole, misura quanto bene il modello è in grado di riconoscere correttamente i veri negativi. E' particolarmente importante in situazioni in cui identificare correttamente i casi negativi è di grande rilevanza.

Formula: TN / (TN + FP).

F1-Score:

L'F1-score è la media armonica di precisione e recall. È utile quando si vuole trovare un equilibrio tra precisione e recall.

Formula: 2 * (Precision * Recall) / (Precision + Recall).

AUC-ROC (Area Under the ROC Curve):

La curva ROC (Receiver Operating Characteristic Curve) è un grafico che rappresenta il tasso di veri positivi (sensibilità) rispetto al tasso di falsi positivi (1-specificità) al variare della soglia di classificazione. L'AUC-ROC è l'area sotto la curva ROC e fornisce una misura aggregata della capacità di separazione del modello tra le classi. Valori più vicini a 1 indicano un modello migliore.

AUC-PR (Area Under the Precision-Recall Curve):

L'AUC-PR è l'area sotto la curva precision-recall. È particolarmente utile quando si hanno classi sbilanciate e ci si concentra sui veri positivi. Valori più alti indicano un modello migliore.

Log Loss (Logarithmic Loss):

La log loss misura la discrepana tra le probabilità previste dal modello e le etichette reali. Per questo motivo, a differenza ad esempio di accuracy, penalizza maggiormente gli "errori gravi" e da più peso ai campioni che con più probabilità appartengono ad una determinata classe.

Confusion Matrix (Matrice di Confusione):

La matrice di confusione, non è una vera e propria metrica, me è una tabella che mostra il numero di previsioni corrette e errori suddivisi per classe. È utile per comprendere in dettaglio le prestazioni del modello in quanto permette di visualizzare simultaneamente falsi positivi, falsi negativi, veri positivi e veri negativi.

Nell'analisi in questione verrà utilizzata prevalente l'accuratezza come metrica di valutazione dei modelli.

4 Definizione modelli

I modelli che paragono in questo progetto sono 3: - Logistic Regression - Random Forest Classifier - K-Nearest Neighbors

Seguo due differenti strade: 1. Utilizzo di tutte le features 2. Utilizzo solo le features selezionate con il t test (con valori di p minori)

4.1 Strada 1 (tutte le features)

4.1.1 Spot check

verifico velocemente quale tipologia di modello ha le migliori prestazioni su questo dataset

Lo spot check segue le stesse fasi per tutti e tre i modelli:

Per prima cosa imposto la divisione in kfold con stratifiedkfold in modo da avere la sicurezza che gli split mantengano le classi bilanciate.

Successivamente definisco il modello ed imposto alcuni iperparametri se necessario.

Infine calcolo il punteggio di accuratezza con la funzione cross_val_score.

Logistic Regression In questo caso imposto alcuni parametri fondamentali del modello:

- aumento a 1000 il numero di max iter per aver la sicurezza che il modello arrivi a convergenza,
- imposto il random_state per avere ripetibilità nella previsione,
- imposto multi class uguale a "ovr" in quanto il dataset ha un target binario.

```
LR_model,
    X_train_1,
    y_train,
    cv=folds,
    scoring="accuracy"
    )
# stampo i risultati
print(f"accuracy = {LR_results_1.mean():.3f}")
```

accuracy = 0.522

K-Nearest Neighbors Eseguo uno spot check anche per il modello K-nearest neighbors (KNN).

accuracy = 0.653

Random Forest Classifier Eseguo lo spot check sul modello Rsandom Forest Classifier (RFC).

accuracy = 0.828

4.1.2 Tuning parametri

Mantengo i due modelli che hanno ottenuto i punteggi migliori nello spot check, ovvero KNN e RFC, e ottimizzo i loro iperparametri utilizzando la cross validation e la grid search.

Per ottenere risultati più relaistici e che possano ottenere prestazioni adeguate anche con nuovi dati mai visti, applico la regola del un errore standard (One Stanrd Error Rule) secondo cui, invece di mantenere la combinazione di parametri che ha ottenuto il miglior punteggio, si mantiene il modello che ha ottenuto il punteggio migliore meno una volta l'errore standard. Questo procedimento dovrebbe consentire al modello di non fare overfitting sui dati di train.

L'errore standard viene calcolato come la deviazione standard diviso la radice quadrata dei fold di addestramento.

KNN tuning

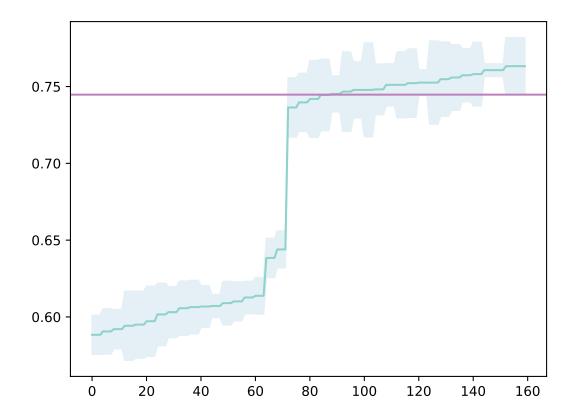
Punteggio migliore: 0.763

```
[]: # definisco i parametri da ottimizzare
     KNN params = {
       'n neighbors': np.arange(1,51,5), # numero di vicini da considerare
       'weights': ['distance', 'uniform'], # tipo di pesatura
       'p': [1,2], # 1 per distanza di Manhattan, 2 per distanza euclidea
       'algorithm':['brute', 'kd_tree', 'ball_tree', 'auto', ]
     }
     # imposto la ricerca dei parametri
     KNN_grid_search_1 = GridSearchCV(
         scoring="accuracy",
         estimator=KNN_model,
         param_grid=KNN_params,
         cv=folds,
         n_jobs=-1,
         refit=True,
         verbose=1)
     # addestro il modello
     KNN_grid_search_1.fit(X_train_1, y_train)
     # stampo i migliori parametri e il punteggio migliore
     print("Migliori parametri:", KNN_grid_search_1.best_params_)
     print(f"Punteggio migliore: {KNN_grid_search_1.best_score_:.3f}")
    Fitting 5 folds for each of 160 candidates, totalling 800 fits
    Migliori parametri: { 'algorithm': 'brute', 'n_neighbors': 1, 'p': 1, 'weights':
    'distance'}
```

```
[]: # calcolo punteggi e parametri
    best score = KNN grid search 1.best score
    best_index = KNN_grid_search_1.best_index_
```

```
er_std = KNN_grid_search_1.cv_results_['std_test_score'][best_index] / np.
      ⇒sqrt(5)
     OSER_score = best_score - er_std
     OSER_index = np.argmin(np.abs(KNN_grid_search_1.cv_results_['mean_test_score']_
      → OSER_score))
     OSER_params = KNN_grid_search_1.cv_results_["params"][OSER_index]
     print(f"acc. migliore:
                             {best_score:.3f}")
     print(f"Errore Standard: {er_std:.3f}")
     print(f"OSER score:
                             {OSER score:.3f}")
                              {OSER_index}")
     print(f"OSER index:
                             {OSER params}")
     print(f"OSER params:
                     0.763
    acc. migliore:
    Errore Standard: 0.008
    OSER score:
                     0.755
    OSER index:
    OSER params:
                     {'algorithm': 'brute', 'n_neighbors': 41, 'p': 1, 'weights':
    'distance'}
[]: # plotto l'anadamento dei risultati
     sorted_index_acc = np.argsort(KNN_grid_search_1.cv_results_['mean_test_score'])
     acc array = KNN grid search 1.cv results ['mean test score'] [sorted index acc]
     std_array = KNN_grid_search_1.cv_results_['std_test_score'][sorted_index_acc]
     OSER_acc = (acc_array - std_array)[-1]
     cv_attempts = list(range(0, len(acc_array)))
     plt.plot(acc_array, color=colors[0])
     plt.fill_between(cv_attempts,
                      acc_array-std_array,
                      acc_array+std_array,
                      alpha=0.2,
                      color=colors[4])
     plt.axhline(OSER_acc,
                 color=colors[9])
```

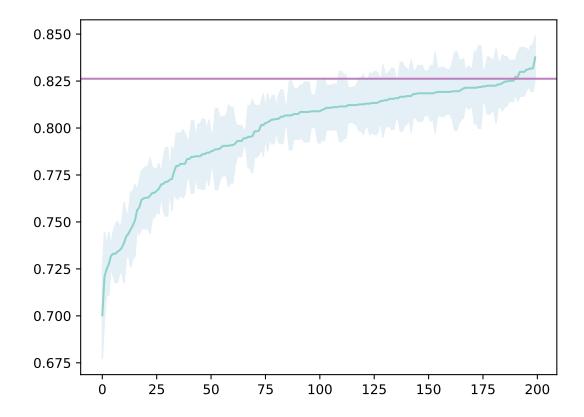
[]: <matplotlib.lines.Line2D at 0x78a678446080>



RFC tuning Visto che RandomForestClassifier ha diversi parametri da validare e con diversi valori possibili, eseguo prima una RandomSearch in modo da eseguire un numero prestabilito di tentativi utilizzando combinazioni casuali di parametri. Questo mi permette di individuare uno spazio di parametri più ristretto su cui poi eseguire una GridSearch esaustiva e trovare così i parametri ottimali.

```
param_distributions=RFC_params,
        n_iter=200, # numero di combinazioni casuali da provare
        cv=folds,
        n_jobs=-1,
        refit=True,
        verbose=1)
    RFC_random_search_1.fit(X_train_1, y_train)
     # stampo i migliori parametri e il punteggio migliore
    print("Migliori parametri:", RFC_random_search_1.best_params_)
    print(f"Punteggio migliore: {RFC_random_search_1.best_score_:.3f}")
    Fitting 5 folds for each of 200 candidates, totalling 1000 fits
    Migliori parametri: {'n_estimators': 150, 'max_samples': 1.0, 'max_features':
    0.2, 'max_depth': 50}
    Punteggio migliore: 0.838
[ ]: best_score = RFC_random_search_1.best_score_
    best_index = RFC_random_search_1.best_index_
    er_std = RFC_random_search_1.cv_results_['std_test_score'][best_index] / np.
      \rightarrowsqrt(5)
    OSER_score = best_score - er_std
    OSER_index = np.argmin(np.abs(RFC_random_search_1.
     ⇔cv_results_['mean_test_score'] - OSER_score))
    OSER_params = RFC_random_search_1.cv_results_["params"][OSER_index]
    print(f"acc. migliore:
                             {best_score:.3f}")
    print(f"Errore Standard: {er_std:.3f}")
                          {OSER_score:.3f}")
    print(f"OSER score:
    print(f"OSER index:
                             {OSER index}")
                            {OSER_params}")
    print(f"OSER params:
    acc. migliore:
                     0.838
    Errore Standard: 0.005
    OSER score:
                     0.833
    OSER index:
                     {'n_estimators': 110, 'max_samples': 1.0, 'max_features': 0.2,
    OSER params:
    'max depth': 50}
[]: # plotto l'anadamento dei risultati
    sorted_index_acc = np.argsort(RFC_random_search_1.
     acc array = RFC random search 1.cv results ['mean test score'][sorted index acc]
    std_array = RFC_random_search_1.cv_results_['std_test_score'][sorted_index_acc]
    OSER acc = (acc array - std array)[-1]
    cv_attempts = list(range(0, len(acc_array)))
```

[]: <matplotlib.lines.Line2D at 0x78a679aec490>



Il modello Random Forest ha ottenuto risultati di accuratezza migliori rispetto a KNN: 0.833 contro 0.755.

4.2 Strada 2 (con 4 features)

4.2.1 Spot check

verifico velocemente quale tipologia di modello ha le migliori prestazioni su questo dataset

Le fasi dello spot check sono le stesse che ho eseguito precedentemente, ma kfold ed i modelli sono gia stati impostati quindi procedo direttamente al calcolo dell'accuratezza con cross validation.

Logistic Regression In questo caso imposto alcuni parametri fondamentali del modello:

- aumento a 1000 il numero di max_iter per aver la sicurezza che il modello arrivi a convergenza,
- imposto il random_state per avere ripetibilità nella previsione,
- imposto multi_class uguale a "ovr" in quanto il dataset ha un target binario.

accuracy = 0.538

K-Nearest Neighbors Eseguo uno spot check anche per il modello K-nearest neighbors (KNN).

accuracy = 0.605

Random Forest Classifier Eseguo lo spot check sul modello Random Forest Classifier (RFC).

accuracy = 0.791

4.2.2 Tuning parametri

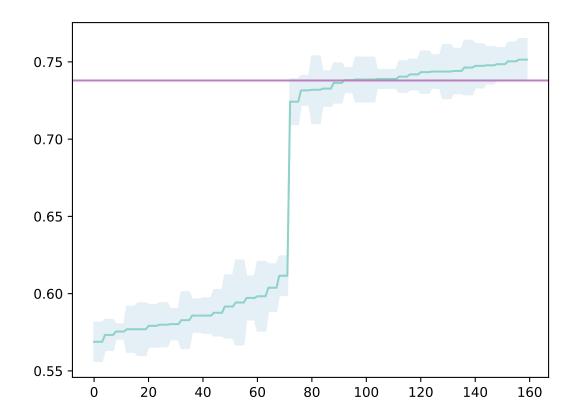
Mantengo i due modelli che hanno ottenuto i punteggi migliori nello spot check, ovvero KNN e RFC, e ottimizzo i loro iperparametri utilizzando la cross validation e la grid search.

KNN tuning

```
[]: # imposto la ricerca casuale
     KNN_grid_search_2 = GridSearchCV(
         scoring="accuracy",
         estimator=KNN_model,
         param_grid=KNN_params,
         cv=folds,
         n_jobs=-1,
         refit=True,
         verbose=1)
     # addestro il modello
     KNN_grid_search_2.fit(X_train_2, y_train)
     # stampo i migliori parametri e il punteggio migliore
     print("Migliori parametri:", KNN_grid_search_2.best_params_)
     print(f"Punteggio migliore: {KNN_grid_search_2.best_score_:.3f}")
    Fitting 5 folds for each of 160 candidates, totalling 800 fits
    Migliori parametri: {'algorithm': 'brute', 'n_neighbors': 46, 'p': 1, 'weights':
    'distance'}
    Punteggio migliore: 0.751
[ ]: best_score = KNN_grid_search_2.best_score_
     best_index = KNN_grid_search_2.best_index_
     er_std = KNN_grid_search_2.cv_results_['std_test_score'][best_index] / np.
      \rightarrowsqrt(5)
     OSER score = best score - er std
     OSER_index = np.argmin(np.abs(KNN_grid_search_2.cv_results_['mean_test_score']_
     →- OSER score))
     OSER_params = KNN_grid_search_2.cv_results_["params"][OSER_index]
     print(f"acc. migliore:
                              {best_score:.3f}")
     print(f"Errore Standard: {er std:.3f}")
     print(f"OSER score:
                              {OSER score:.3f}")
                              {OSER index}")
     print(f"OSER index:
     print(f"OSER params:
                              {OSER_params}")
    acc. migliore:
                     0.751
    Errore Standard: 0.006
    OSER score:
                     0.745
    OSER index:
                     24
    OSER params:
                     {'algorithm': 'brute', 'n_neighbors': 31, 'p': 1, 'weights':
```

'distance'}

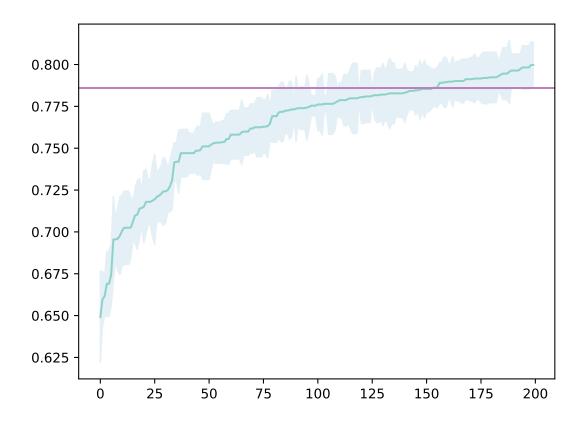
[]: <matplotlib.lines.Line2D at 0x78a67f66a950>



RFC tuning Anche in questo caso eseguo prima una RandomSearch e poi successivamente una GridSearch attorno ai migliori parametri trovati.

```
[]: # imposto la ricerca casuale
     RFC_random_search_2 = RandomizedSearchCV(
         scoring="accuracy",
         estimator=RFC_model,
         param_distributions=RFC_params,
         n_iter=200, # numero di combinazioni casuali da provare
         cv=folds,
         n_{jobs=-1},
         refit=True,
         verbose=1)
     RFC_random_search_2.fit(X_train_2, y_train)
     # stampo i migliori parametri e il punteggio migliore
     print("Migliori parametri:", RFC_random_search_2.best_params_)
     print(f"Punteggio migliore: {RFC_random_search_2.best_score_:.3f}")
    Fitting 5 folds for each of 200 candidates, totalling 1000 fits
    Migliori parametri: {'n_estimators': 70, 'max_samples': 1.0, 'max_features':
    0.2, 'max_depth': 50}
    Punteggio migliore: 0.800
[ ]: best_score = RFC_random_search_2.best_score_
     best_index = RFC_random_search_2.best_index_
     er_std = RFC_random_search_2.cv_results_['std_test_score'][best_index] / np.
      \rightarrowsqrt(5)
     OSER_score = best_score - er_std
     OSER_index = np.argmin(np.abs(RFC_random_search_2.
      ⇔cv_results_['mean_test_score'] - OSER_score))
     OSER_params = RFC_random_search_2.cv_results_["params"][OSER_index]
                            {best_score:.3f}")
     print(f"acc. migliore:
     print(f"Errore Standard: {er std:.3f}")
     print(f"OSER score:
                             {OSER_score:.3f}")
     print(f"OSER index:
                             {OSER index}")
                            {OSER_params}")
     print(f"OSER params:
    acc. migliore:
                     0.800
    Errore Standard: 0.006
    OSER score:
                     0.794
    OSER index:
    OSER params:
                     {'n_estimators': 90, 'max_samples': 1.0, 'max_features': 0.4,
    'max_depth': 30}
[]: # plotto l'anadamento dei risultati
     sorted_index_acc = np.argsort(RFC_random_search_2.
      ⇔cv_results_['mean_test_score'])
```

[]: <matplotlib.lines.Line2D at 0x78a67e4ebaf0>



Anche in questo caso RFC ha ottenuto punteggi di accuracy migliori rispetto a KNN. 0.745 di KNN contro i 0.794 di RFC.

5 Addestramento finale

Per entrambe le strade RFC si è dimostrato il modello migliore. Testo entrambi i modelli sul test set per identificare il migliore tra i due.

[]: RandomForestClassifier(max_depth=30, max_features=0.2, max_samples=0.6, n_estimators=130)

```
[]: # predico il test e calcolo metriche
    y_pred_1 = RFC_final_1.predict(X_test_1)
    acc_1 = accuracy_score(y_test, y_pred_1)
    prec_1 = precision_score(y_test, y_pred_1)
    c_matrix_1 = confusion_matrix(y_test, y_pred_1)

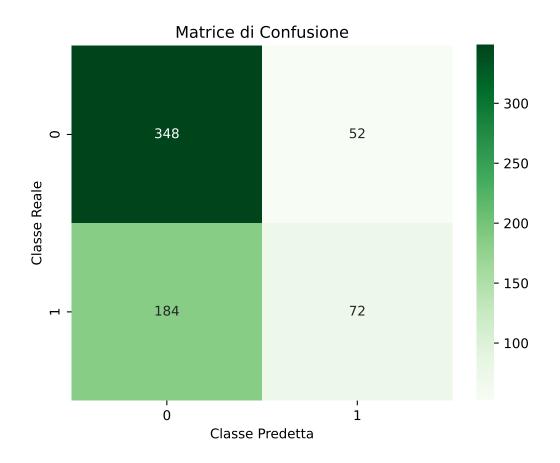
print(f"accuratezza 1: {acc_1:.3f}")
    print(f"precisione 1: {prec_1:.3f}")

# rappresento matrice di confusione
    sns.heatmap(c_matrix_1, annot=True, fmt='d', cmap="Greens")

# aggiungo titoli e etichette degli assi
    plt.title('Matrice di Confusione')
    plt.xlabel('Classe Predetta')
    plt.ylabel('Classe Reale')

plt.show()
```

accuratezza 1: 0.640 precisione 1: 0.581



[]: RandomForestClassifier(max_depth=70, max_features=0.4, max_samples=1.0, n_estimators=50)

```
[]: # faccio previsione sul test e calcolo metriche
y_pred_2 = RFC_final_2.predict(X_test_2)
acc_2 = accuracy_score(y_test, y_pred_2)
prec_2 = precision_score(y_test, y_pred_2)
c_matrix_2 = confusion_matrix(y_test, y_pred_2)
print(f"accuratezza 2: {acc_2:.3f}")
```

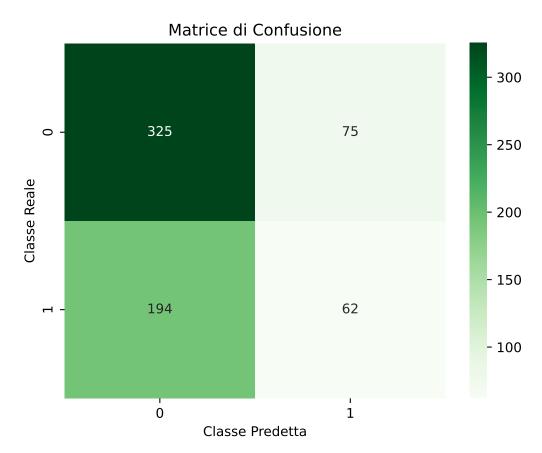
```
print(f"precisione 2: {prec_2:.3f}")

# rappresento matrice di confusione
sns.heatmap(c_matrix_2, annot=True, fmt='d', cmap="Greens")

# aggiungo titoli e etichette degli assi
plt.title('Matrice di Confusione')
plt.xlabel('Classe Predetta')
plt.ylabel('Classe Reale')

plt.show()
```

accuratezza 2: 0.590 precisione 2: 0.453



6 Conclusioni

I risultati mostrano che il modello RFC_final_1 addestrato su tutte le features ha ottenuto un risultato leggermente migliore rispetto al modello addestrato solamente sulle quattro features più rilevanti (RFC_final_2).

RFC final 1 ha ottenuto un punteggio sul test set di accuracy pari a 0.636 e precision pari a 0.57.

Si notà inoltre che entrambi i modelli hanno ottenuto un punteggio significativamente inferiore nel test set piuttosto che durante l'addestramento. Questo probabilmente indica che, nonostante la cross validation, i modelli si sono adattati eccessivamente ai dati di train non riuscendo a generalizzare su nuovi dati: OVERFITTING.

Le previsioni ottenute mostrano un notevole sbilanciamento verso la classe 0. Ciò indica che il modello tende a predire con maggiore probabilità che l'acqua non sia potabile. Questa caratteristica è vantaggiosa per il dataset in questione poiché, dato il maggior numero di falsi negativi rispetto ai falsi positivi, è meno probabile che il modello identifichi erroneamente come potabile un campione d'acqua che in realtà non lo è. Questo è essenziale per garantire la sicurezza della salute. Tuttavia, la precisione rimane relativamente bassa, pari al 0.57, indicando che c'è una probabilità del 43% che un campione classificato come potabile non lo sia effettivamente.

Ipotizzo che la causa della bassa performance del modello sia causata principalmente dalla natura dei dati: dalla bassa correlazione tra le features ed il target, dalla bassa dimensionalità e dal rumore.

Converto in pdf

```
[]: | apt-get install texlive texlive-xetex texlive-latex-extra pandoc | pip install pypandoc
```

```
[]: from google.colab import drive drive.mount('/content/drive')
```

```
[5]: !cp "drive/My Drive/Colab Notebooks/Progetto Finale Data Science di Tommaso⊔

⇔Ciampolini.ipynb" ./
!jupyter nbconvert --to PDF "Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini.

⇔ipynb"
```

[NbConvertApp] Converting notebook Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini.ipynb to PDF

[NbConvertApp] Support files will be in Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini_files/

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini files

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini files

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini_files

 $\label{lem:convertApp} \end{substitute} \begin{substitute}{ll} Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini_files \\ \end{substitute}$

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini files

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini files

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso Ciampolini_files

[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso

```
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
```

```
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Making directory ./Progetto Finale Data Science di Tommaso
Ciampolini_files
[NbConvertApp] Writing 205288 bytes to notebook.tex
[NbConvertApp] Building PDF
Traceback (most recent call last):
 File "/usr/local/bin/jupyter-nbconvert", line 8, in <module>
    sys.exit(main())
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/jupyter_core/application.py",
line 282, in launch_instance
    super().launch_instance(argv=argv, **kwargs)
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-
packages/traitlets/config/application.py", line 992, in launch_instance
    app.start()
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/nbconvertapp.py", line
423, in start
    self.convert_notebooks()
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/nbconvertapp.py", line
597, in convert_notebooks
    self.convert_single_notebook(notebook_filename)
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/nbconvertapp.py", line
560, in convert_single_notebook
    output, resources = self.export single notebook(
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/nbconvertapp.py", line
488, in export_single_notebook
    output, resources = self.exporter.from_filename(
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-
packages/nbconvert/exporters/exporter.py", line 189, in from filename
    return self.from_file(f, resources=resources, **kw)
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-
packages/nbconvert/exporters/exporter.py", line 206, in from_file
    return self.from_notebook_node(
 File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/exporters/pdf.py",
line 194, in from_notebook_node
```

self.run_latex(tex_file)

File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/exporters/pdf.py", line 164, in run_latex

return self.run_command(

File "/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/nbconvert/exporters/pdf.py", line 111, in run_command

raise OSError(

OSError: xelatex not found on PATH, if you have not installed xelatex you may need to do so. Find further instructions at

https://nbconvert.readthedocs.io/en/latest/install.html#installing-tex.