Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Отчёт по лабораторной работе №3 по курсу «Технологии машинного обучения».

«Подготовка обучающей и тестовой выборки, кросс-валидация и подбор гиперпараметров на примере метода ближайших соседей».

Выполнил:
Анцифров Н. С.
студент группы ИУ5-61Б

Проверил:
Гапанюк Ю.Е.

Подпись и дата:

Подпись и дата:

Москва, 2022 г.

1. Задание лабораторной работы

- Выбрать набор данных (датасет) для решения задачи классификации или регрессии.
- С использованием метода train_test_split разделить выборку на обучающую и тестовую.
- Обучить модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оценить качество модели с помощью подходящих для задачи метрик.
- Произвести подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и/или RandomizedSearchCV и кросс-валидации, оценить качество оптимальной модели. Желательно использование нескольких стратегий кросс-валидации.
- Сравнить метрики качества исходной и оптимальной моделей.

2. Ячейки Jupyter-ноутбука

2.1. Выбор и загрузка данных

В качестве датасета будем использовать набор данных, содержащий данные о различных стёклах. Данный набор доступен по адресу: https://www.kaggle.com/datasets/uciml/glass

Набор данных имеет следующие атрибуты:

- RI - Refractive Index - коэффициент преломления
- Na - Sodium - Содержание натрия (массовый процент в соответствующем оксиде)
- Mg - Magnesium - Содержание магния
- Al - Aluminum - Содержание алюминия
- Si - Silicon - Содержание кремния
- K - Potassium - Содержание калия
- Ca - Calcium - Содержание кальция
- Ba - Barium - Содеражние бария
- Fe - Iron - Содержание железа
- Type - Type of glass - тип стекла (1, 2 - стекла для зданий, 3, 4 - стекла для автомобилей, 5 - стеклотара, 6 - tableware - бытовые стекла, 7 - стекла для ламп; 4 отсутствует в данном наборе данных)

2.1.1. Импорт библиотек

Импортируем библиотеки с помощью команды import:

[1]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")
```

2.1.2. Загрузка данных

Загрузим набор данных:

[2]:
```
data = pd.read_csv('glass.csv')
```

2.2. Первичный анализ и обрабока данных

Выведем первые 5 строк датасета:

[3]:
```
data.head()
```

[3]:

	RI	Na	Mg	Al	Si	K	Ca	Ba	Fe	Type
0	1.52101	13.64	4.49	1.10	71.78	0.06	8.75	0.0	0.0	1
1	1.51761	13.89	3.60	1.36	72.73	0.48	7.83	0.0	0.0	1
2	1.51618	13.53	3.55	1.54	72.99	0.39	7.78	0.0	0.0	1
3	1.51766	13.21	3.69	1.29	72.61	0.57	8.22	0.0	0.0	1
4	1.51742	13.27	3.62	1.24	73.08	0.55	8.07	0.0	0.0	1

Определим размер датасета и целевого признака (Type):

[4]:
```
data.shape, data.Type.shape
```

[4]:
```
((214, 10), (214,))
```

2.2.1. Разделение данных

Разделим данные на столбец с целевым признаком и данные с другими столбцами:

[5]:
```
X = data.drop("Type", axis=1)
y = data["Type"]
```

[6]:
```
print(X.head(), "\n")
print(y.head())
```

```
        RI     Na    Mg    Al     Si     K    Ca   Ba   Fe
0  1.52101  13.64  4.49  1.10  71.78  0.06  8.75  0.0  0.0
1  1.51761  13.89  3.60  1.36  72.73  0.48  7.83  0.0  0.0
2  1.51618  13.53  3.55  1.54  72.99  0.39  7.78  0.0  0.0
3  1.51766  13.21  3.69  1.29  72.61  0.57  8.22  0.0  0.0
4  1.51742  13.27  3.62  1.24  73.08  0.55  8.07  0.0  0.0

0    1
1    1
2    1
3    1
4    1
Name: Type, dtype: int64
```

[7]:
```
print(X.shape)
print(y.shape)
```

```
(214, 9)
(214,)
```

2.2.2. Разделение выборки на обучающую и тестовую

Будем решать задачу классификации - отношения записи к определенному типу стекла.
Разделим выборку с помощью функции train_test_split:

[8]:
```
from sklearn.model_selection import train_test_split
```

[9]:
```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=1)
```

Размеры обучающей выборки и тестовой выборки:

[10]:
```
X_train.shape, y_train.shape
```

[10]:
```
((160, 9), (160,))
```

[11]:
```
X_test.shape, y_test.shape
```

[11]:
```
((54, 9), (54,))
```

В выборках остались все типы стекол, доступные в изначальном датасете (4 отсутствует в исходном):

[12]:
```
np.unique(y_train)
```

[12]:
```
array([1, 2, 3, 5, 6, 7], dtype=int64)
```

[13]:
```
np.unique(y_test)
```

[13]:
```
array([1, 2, 3, 5, 6, 7], dtype=int64)
```

Проверим распределение типов стекол:

[14]:
```
from typing import Dict, Tuple
```

[15]:
```
def type_proportions(array: np.ndarray) -> Dict[int, Tuple[int, float]]:
    labels, counts = np.unique(array, return_counts=True)
    counts_perc = counts/array.size
    res = dict()
    for label, count2 in zip(labels, zip(counts, counts_perc)):
        res[label] = count2
    return res

def print_type_proportions(array: np.ndarray):
    proportions = type_proportions(array)
    if len(proportions)>0:
        print('Тип \t Количество \t Процент встречаемости')
    for i in proportions:
        val, val_perc = proportions[i]
        val_perc_100 = round(val_perc * 100, 2)
        print('{} \t {} \t \t {}%'.format(i, val, val_perc_100))
```

[16]:
```
print_type_proportions(data.Type)
```

```
Тип      Количество      Процент встречаемости
1        70              32.71%
2        76              35.51%
3        17              7.94%
5        13              6.07%
6        9               4.21%
7        29              13.55%
```

[17]:
```
print_type_proportions(y_train)
```

```
Тип      Количество      Процент встречаемости
1        47              29.38%
2        60              37.5%
3        10              6.25%
```

```
5       12              7.5%
6       8               5.0%
7       23              14.37%
```

[18]:
```
print_type_proportions(y_test)
```

```
Тип     Количество      Процент встречаемости
1       23              42.59%
2       16              29.63%
3       7               12.96%
5       1               1.85%
6       1               1.85%
7       6               11.11%
```

Видим, что пропорции типов стекол приблизительно сохранились.

2.3. Построение модели ближайших соседей для произвольного гиперпараметра

Пусть гиперпараметр будет равен 20, построим модель:

[19]:
```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
```

[20]:
```
clf_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors=20)
clf_i.fit(X_train, y_train)
target_i = clf_i.predict(X_test)
len(target_i), target_i
```

[20]:
```
(54,
 array([5, 7, 2, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 7,
        2, 1, 2, 1, 2, 2, 2, 1, 5, 7, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 5, 1, 1, 7, 7, 1,
        7, 1, 2, 1, 2, 7, 1, 2, 1, 2], dtype=int64))
```

Эту модель будем считать исходной.

2.4. Кросс-валидация и подбор гиперпараметра K через GridSearch и RandomizedSearch

2.4.1. Кросс-валидация

[21]:
```
from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate
```

[22]:
```
scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                         data, data.Type, cv=3)
scores
```

[22]:
```
array([0.91666667, 0.95774648, 0.95774648])
```

С помощью функции cross_validate:

[23]:
```
scoring = {'precision': 'precision_weighted',
           'recall': 'recall_weighted',
           'f1': 'f1_weighted'}
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=3, return_train_score=True)
```

```
scores
```

[23]:
```
{'fit_time': array([0.00199509, 0.00199389, 0.00199485]),
 'score_time': array([0.00909901, 0.00448203, 0.00732541]),
 'test_score': array([0.91673789, 0.95774648, 0.95301901]),
 'train_score': array([0.9930479 , 0.98664493, 0.97930491])}
```

Стратегия K-Fold

[24]:
```
from sklearn.model_selection import KFold
```

[25]:
```
kf = KFold(n_splits=5)
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=kf)
scores
```

[25]:
```
{'fit_time': array([0.00261664, 0.00299215, 0.00283647, 0.00299287,
0.00199413]),
 'score_time': array([0.00499034, 0.00514221, 0.00498915, 0.00421095,
0.00345993]),
 'test_score': array([1.        , 1.        , 0.925     , 0.46055632,
0.01858304])}
```

Стратегия Repeated K-Fold

[26]:
```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold
```

[27]:
```
kf = RepeatedKFold(n_splits=3, n_repeats=2)
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=kf)
scores
```

[27]:
```
{'fit_time': array([0.00273538, 0.00398898, 0.00199461, 0.00199223, 0.00199747,
        0.00374722]),
 'score_time': array([0.00698185, 0.00541639, 0.00603795, 0.00514269,
0.00418472,
        0.00698137]),
 'test_score': array([0.98703704, 0.93623007, 0.94372091, 0.94989013,
0.95848844,
        0.97184521])}
```

Стратегия Leave One Out

[28]:
```
from sklearn.model_selection import LeaveOneOut
```

[29]:
```
kf = LeaveOneOut()
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=kf)
scores
```

```
[29]: {'fit_time': array([0.00299263, 0.00304389, 0.00299311, 0.00294232, 0.00214601,
               0.00206876, 0.00199461, 0.00166726, 0.00157142, 0.00199485,
               0.002141  , 0.00199485, 0.00199509, 0.00186849, 0.00209737,
               0.00199437, 0.00199485, 0.0029912 , 0.00206327, 0.0026257 ,
               0.00199485, 0.00299263, 0.00299239, 0.00182676, 0.00398898,
               0.00299525, 0.00263333, 0.00166082, 0.00299263, 0.00207448,
               0.00278831, 0.00199389, 0.00374508, 0.00220704, 0.0019176 ,
               0.00398898, 0.00254464, 0.00399017, 0.0029912 , 0.00199485,
               0.00199556, 0.00199342, 0.00199509, 0.00292563, 0.00207496,
               0.00299168, 0.00195789, 0.00209022, 0.00144935, 0.00196719,
               0.00199485, 0.00209713, 0.00199461, 0.00199509, 0.00199604,
               0.00199437, 0.00314999, 0.00299168, 0.00199461, 0.00233293,
               0.00299168, 0.00188208, 0.00263381, 0.00308251, 0.00199461,
               0.00199461, 0.00196195, 0.00230861, 0.00199437, 0.00207138,
               0.00598431, 0.00204515, 0.00178123, 0.00398684, 0.00299525,
               0.00218606, 0.00315523, 0.00199437, 0.00268507, 0.00199413,
               0.00253081, 0.00197935, 0.0026865 , 0.00299048, 0.00299287,
               0.00262475, 0.00299191, 0.00299048, 0.00297999, 0.00193882,
               0.00201511, 0.00299215, 0.00211573, 0.00199485, 0.00199485,
               0.00199509, 0.00199389, 0.00199461, 0.00199533, 0.00099754,
               0.00199485, 0.00287938, 0.00199413, 0.00199437, 0.00199533,
               0.00299191, 0.00199294, 0.00199437, 0.00295997, 0.00158596,
               0.00302958, 0.00199366, 0.00195098, 0.00207853, 0.00199461,
               0.00199485, 0.00203109, 0.00173163, 0.00175428, 0.00299048,
               0.00299454, 0.00199437, 0.00299239, 0.00199461, 0.00199437,
               0.00271916, 0.00229812, 0.00231457, 0.00199413, 0.00299144,
               0.00199461, 0.00299239, 0.00199437, 0.00211835, 0.00299025,
               0.0029912 , 0.00198984, 0.00199127, 0.00199556, 0.00199413,
               0.00299907, 0.00299072, 0.00099707, 0.0029912 , 0.00299311,
               0.00099802, 0.00199223, 0.00199485, 0.00199866, 0.00199413,
               0.00299144, 0.00199509, 0.00202751, 0.00199461, 0.00199556,
               0.00202799, 0.00199342, 0.00199628, 0.00199437, 0.0019958 ,
               0.00195622, 0.00199485, 0.00216317, 0.00298977, 0.00218344,
               0.00208235, 0.00199461, 0.00247383, 0.00182295, 0.00207329,
               0.00199437, 0.00299239, 0.00197577, 0.00199556, 0.00199485,
               0.00199437, 0.00188446, 0.00290966, 0.00129986, 0.00199485,
               0.00199485, 0.00199485, 0.00199533, 0.00199413, 0.00414681,
               0.00299048, 0.00598407, 0.00299263, 0.00208616, 0.00305486,
               0.00365639, 0.00299263, 0.00299239, 0.00199461, 0.00199509,
               0.00270534, 0.00199509, 0.00279617, 0.00299048, 0.00311613,
               0.00334263, 0.00199294, 0.00399089, 0.00150847, 0.00255609,
               0.00199342, 0.00160646, 0.0019958 , 0.0029912 , 0.00207615,
               0.00299454, 0.00195217, 0.00299406, 0.0025053 ]),
 'score_time': array([0.00498676, 0.00293851, 0.00304151, 0.00299311,
0.00283837,
               0.00208092, 0.00398946, 0.00299168, 0.00299239, 0.00299144,
               0.00208187, 0.00199485, 0.00311756, 0.00343466, 0.00209188,
               0.00299215, 0.00299263, 0.00210524, 0.00317907, 0.00299287,
               0.00299144, 0.00299072, 0.00299239, 0.00299263, 0.00351882,
               0.00598121, 0.00342131, 0.00688767, 0.00324631, 0.00385809,
               0.00498652, 0.00299239, 0.00323677, 0.0027554 , 0.00443459,
               0.00398993, 0.00244069, 0.00398946, 0.00199437, 0.0039897 ,
               0.00398993, 0.00299168, 0.00705123, 0.00298882, 0.00457907,
```

```
        0.00399494, 0.00202608, 0.00383186, 0.00199485, 0.00208068,
        0.00299239, 0.00245929, 0.00196958, 0.00598478, 0.00398755,
        0.00299191, 0.00383234, 0.00281739, 0.00299287, 0.00365114,
        0.00206542, 0.00299239, 0.00299096, 0.0021081 , 0.00299239,
        0.004987  , 0.00302386, 0.00355268, 0.0043931 , 0.00251102,
        0.00398898, 0.00210381, 0.00299621, 0.00324845, 0.00299239,
        0.00479627, 0.00239229, 0.004987  , 0.00329709, 0.00245738,
        0.00299168, 0.00430846, 0.00299358, 0.00399041, 0.00298977,
        0.00236297, 0.00299335, 0.00200701, 0.00199437, 0.00364923,
        0.00299215, 0.00199747, 0.0038681 , 0.00213933, 0.00295234,
        0.00299239, 0.00299191, 0.00299168, 0.00199485, 0.00299168,
        0.0021081 , 0.00199389, 0.00299191, 0.00225091, 0.00299358,
        0.0034833 , 0.00199485, 0.00302553, 0.00299144, 0.00294352,
        0.00195718, 0.0040319 , 0.00299191, 0.00314999, 0.00398922,
        0.00259447, 0.00295568, 0.00399017, 0.00272894, 0.00299239,
        0.00298929, 0.00299215, 0.00299191, 0.0039897 , 0.00299215,
        0.00299096, 0.00368404, 0.00269437, 0.00398993, 0.00199485,
        0.00398874, 0.00299263, 0.00299191, 0.00386834, 0.00299191,
        0.00199914, 0.00399351, 0.00299191, 0.00299144, 0.00299287,
        0.00298524, 0.00199485, 0.00398993, 0.00302601, 0.00199151,
        0.00395894, 0.00299287, 0.00322485, 0.00299287, 0.00299215,
        0.00199485, 0.0029943 , 0.00395465, 0.00299072, 0.00299215,
        0.00299454, 0.00199437, 0.00299311, 0.00298929, 0.00217223,
        0.00299191, 0.00299311, 0.00481939, 0.00299382, 0.00299191,
        0.00206137, 0.00251293, 0.00321484, 0.00309753, 0.00205994,
        0.00299239, 0.00301027, 0.00299191, 0.00210619, 0.00299239,
        0.002105  , 0.00407147, 0.00199509, 0.00268936, 0.00299168,
        0.00464845, 0.00199509, 0.00251675, 0.00316215, 0.00267005,
        0.00199509, 0.00299191, 0.00299096, 0.00290036, 0.00392723,
        0.0023272 , 0.00398898, 0.00299072, 0.00335503, 0.00399208,
        0.002913  , 0.00318766, 0.00399113, 0.00274873, 0.00386572,
        0.00360894, 0.0051055 , 0.00298953, 0.00299311, 0.00342798,
        0.00299191, 0.00299335, 0.00398779, 0.00247765, 0.00442386,
        0.00298882, 0.00203753, 0.00299001, 0.0024817 ]),
 'test_score': array([1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 0., 0., 1., 1., 0.,
        0., 0., 0., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.])}
```

Стратегия Leave P Out

[30]:
```
from sklearn.model_selection import LeavePOut
```

[31]:
```
kf = LeavePOut(2)
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=kf)
scores
```

[31]:
```
{'fit_time': array([0.00199461, 0.00498605, 0.00250959, …, 0.00135422,
0.00156355,
        0.00159883]),
 'score_time': array([0.00398946, 0.00628161, 0.00447178, …, 0.00299239,
0.0025394 ,
        0.00239086]),
 'test_score': array([1., 1., 1., …, 1., 1., 1.])}
```

Стратегия ShuffleSplit

[32]:
```
from sklearn.model_selection import ShuffleSplit
```

[33]:
```
kf = ShuffleSplit(n_splits=5, test_size=0.25)
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=kf)
scores
```

[33]:
```
{'fit_time': array([0.00199342, 0.00301981, 0.00199485, 0.00199246,
0.00206017]),
 'score_time': array([0.00598359, 0.0041585 , 0.00399232, 0.00446057,
0.00345206]),
 'test_score': array([1.        , 0.94182566, 0.97016461, 0.96090535,
0.94729345])}
```

Стратегия StratifiedKFold

[34]:
```
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
```

[35]:
```
skf = StratifiedKFold(n_splits=3)
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        data, data.Type, scoring='f1_weighted',
                        cv=skf)
scores
```

[35]:
```
{'fit_time': array([0.00198126, 0.00498486, 0.0029912 ]),
 'score_time': array([0.00500107, 0.00498891, 0.00498557]),
 'test_score': array([0.91673789, 0.95774648, 0.95301901])}
```

2.4.2. Оптимизация гиперпараметра

Через GridSearch

[36]:
```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
```

[37]:
```
n_range = np.array(range(5,55,5))
tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
```

```
tuned_parameters
```

[37]:
```
[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50])}]
```

[38]:
```
%%time
clf_gs = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5,
↪scoring='accuracy')
clf_gs.fit(X_train, y_train)
```

```
CPU times: total: 172 ms
Wall time: 263 ms
```

[38]:
```
GridSearchCV(cv=5, estimator=KNeighborsClassifier(),
             param_grid=[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40,
45, 50])}],
             scoring='accuracy')
```

[39]:
```
clf_gs.cv_results_
```

[39]:
```
{'mean_fit_time': array([0.00271177, 0.00205445, 0.00173397, 0.00169015,
0.00211964,
        0.00198412, 0.0016819 , 0.00136933, 0.00195174, 0.00172234]),
 'std_fit_time': array([0.00127936, 0.00053822, 0.00040229, 0.000397  ,
0.00029571,
        0.00068425, 0.00026905, 0.00025122, 0.00013681, 0.0004558 ]),
 'mean_score_time': array([0.0037106 , 0.00255346, 0.00259519, 0.00269642,
0.00253229,
        0.00290351, 0.00255089, 0.00291533, 0.00264716, 0.00290046]),
 'std_score_time': array([0.00116456, 0.00038766, 0.00035512, 0.00033663,
0.00039703,
        0.00029038, 0.00044796, 0.00028231, 0.00034596, 0.00027754]),
 'param_n_neighbors': masked_array(data=[5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50],
              mask=[False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False],
        fill_value='?',
             dtype=object),
 'params': [{'n_neighbors': 5},
  {'n_neighbors': 10},
  {'n_neighbors': 15},
  {'n_neighbors': 20},
  {'n_neighbors': 25},
  {'n_neighbors': 30},
  {'n_neighbors': 35},
  {'n_neighbors': 40},
  {'n_neighbors': 45},
  {'n_neighbors': 50}],
 'split0_test_score': array([0.5625 , 0.5625 , 0.5625 , 0.59375, 0.5625 ,
0.53125, 0.53125,
        0.625  , 0.53125, 0.40625]),
 'split1_test_score': array([0.65625, 0.6875 , 0.625  , 0.5625 , 0.59375,
0.59375, 0.5625 ,
        0.59375, 0.5625 , 0.53125]),
 'split2_test_score': array([0.625  , 0.5625 , 0.59375, 0.5625 , 0.59375, 0.5625
```

```
, 0.59375,
        0.5    , 0.5    , 0.53125]),
 'split3_test_score': array([0.53125, 0.5    , 0.5    , 0.53125, 0.4375 , 0.375
, 0.40625,
        0.40625, 0.34375, 0.34375]),
 'split4_test_score': array([0.75   , 0.71875, 0.6875 , 0.65625, 0.65625,
0.65625, 0.59375,
        0.625  , 0.53125, 0.46875]),
 'mean_test_score': array([0.625  , 0.60625, 0.59375, 0.58125, 0.56875, 0.54375,
0.5375 ,
        0.55   , 0.49375, 0.45625]),
 'std_test_score': array([0.07654655, 0.08291562, 0.0625    , 0.04238956,
0.07234898,
        0.0939581 , 0.06959705, 0.08523864, 0.07756046, 0.0728869 ]),
 'rank_test_score': array([ 1,  2,  3,  4,  5,  7,  8,  6,  9, 10])}
```

Лучшая модель:

[40]:
```
clf_gs.best_estimator_
```

[40]:
```
KNeighborsClassifier()
```

Лучшее значение метрики:

[41]:
```
clf_gs.best_score_
```

[41]:
```
0.625
```

Лучшее значение параметров:

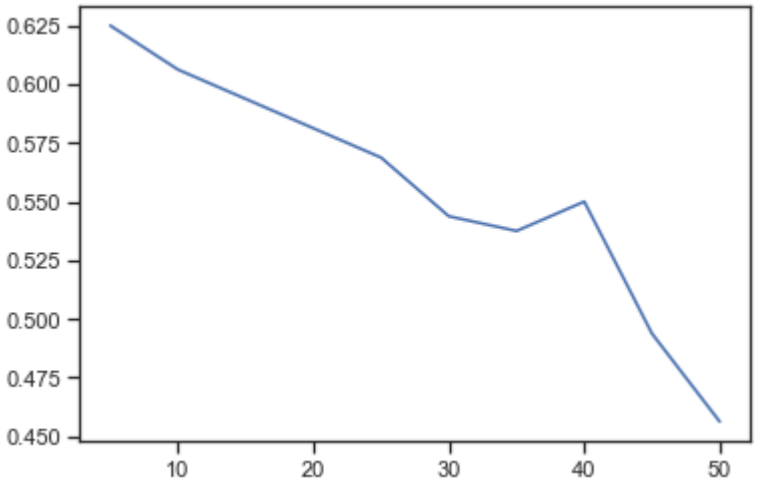
[42]:
```
clf_gs.best_params_
```

[42]:
```
{'n_neighbors': 5}
```

Изменение качества на тестовой выборке в зависимости от К-соседей:

[43]:
```
plt.plot(n_range, clf_gs.cv_results_['mean_test_score'])
```

[43]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26c1bf0f820>]
```



Через RandomizedSearch

[44]:
```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
```

[45]:
```
%%time
clf_rs = RandomizedSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5,
 ↪scoring='accuracy')
clf_rs.fit(X_train, y_train)
```

```
CPU times: total: 234 ms
Wall time: 297 ms
```

[45]:
```
RandomizedSearchCV(cv=5, estimator=KNeighborsClassifier(),
                   param_distributions=[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20,
 25, 30, 35, 40, 45, 50])}],
                   scoring='accuracy')
```

Оптимальные параметры:

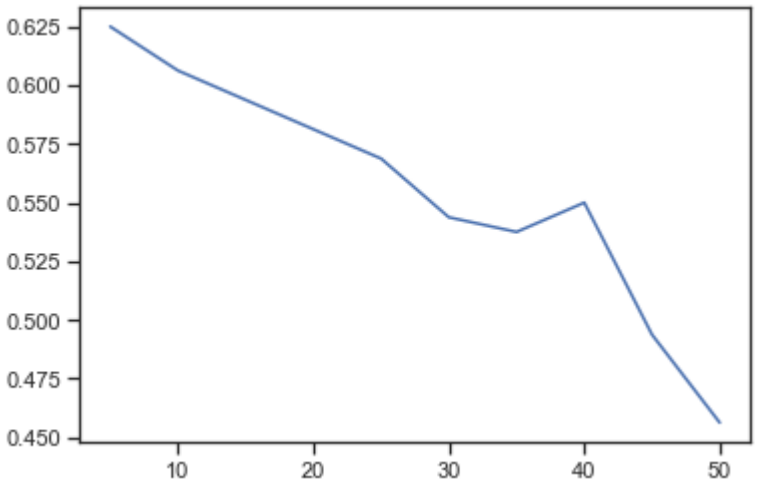
[46]:
```
clf_rs.best_score_, clf_rs.best_params_
```

[46]:
```
(0.625, {'n_neighbors': 5})
```

Изменение качества на тестовой выборке в зависимости от К-соседей:

[47]:
```
plt.plot(n_range, clf_rs.cv_results_['mean_test_score'])
```

[47]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26c1b366790>]
```



2.4.3. Построение оптимальной модели

Оптимальное число ближайших соседей = 5. Построим оптимальную модель:

[49]:
```
clf_o = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5)
clf_o.fit(X_train, y_train)
target_o = clf_o.predict(X_test)
len(target_o), target_o
```

[49]:
```
(54,
 array([5, 7, 2, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 7,
        2, 1, 1, 1, 2, 2, 1, 1, 5, 6, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 5, 1, 1, 7, 7, 1,
        7, 1, 1, 1, 2, 7, 2, 2, 1, 2], dtype=int64))
```

2.5. Оценка качества исходной и оптимальной модели

2.5.1. Метрика Accuracy

Она вычисляет процент (в долях) правильно определенных типов.

[50]:
```
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
```

Проверим для всех типов исходной модели:

[51]:
```
accuracy_score(y_test, target_i)
```

[51]:
```
0.6851851851851852
```

И оптимальной модели:

[52]:
```
accuracy_score(y_test, target_o)
```

[52]:
```
0.7222222222222222
```

Видно, что точность оптимальной модели (5 ближайших соседей) выше, чем в исходной модели (20).

Теперь проверим для каждого конкретного типа:

[53]:
```
def accuracy_score_for_types(
    y_true: np.ndarray,
    y_pred: np.ndarray) -> Dict[int, float]:
    d = {'t': y_true, 'p': y_pred}
    df = pd.DataFrame(data=d)
    types = np.unique(y_true)
    res = dict()
    for t in types:
        temp_data_flt = df[df['t']==t]
        temp_acc = accuracy_score(
            temp_data_flt['t'].values,
            temp_data_flt['p'].values)
        res[t] = temp_acc
    return res

def print_accuracy_score_for_types(
    y_true: np.ndarray,
    y_pred: np.ndarray):
    accs = accuracy_score_for_types(y_true, y_pred)
    if len(accs)>0:
        print('Тип \t Accuracy')
    for i in accs:
        print('{} \t {}'.format(i, accs[i]))
```

Для исходной модели:

[54]:
```
print_accuracy_score_for_types(y_test, target_i)
```

```
Тип      Accuracy
1        0.8260869565217391
2        0.6875
3        0.0
5        1.0
6        0.0
7        1.0
```

Видим, что процент “Accuracy” для типа 1 составляет 83%, для типа 2 - 68%, для типа 3 - 0%. Для типов 5, 6, 7 “Accuracy” составляет 100%.

Для оптимальной модели:

[55]:
```
print_accuracy_score_for_types(y_test, target_o)
```

```
Тип      Accuracy
1        0.8695652173913043
2        0.6875
3        0.0
5        1.0
6        1.0
7        1.0
```

Результаты схожи, но у типа 1 метрика составляет уже 87%.

2.5.2. Метрика balanced_accuracy_score

Используется для бинарной классификации. Сконвертируем данные и выведем метрику:

[56]:
```
def convert_target_to_binary(array:np.ndarray, target:int) -> np.ndarray:
    res = [1 if x==target else 0 for x in array]
    return res
```

[57]:
```
bin_y_train = convert_target_to_binary(y_train, 2)
list(zip(y_train, bin_y_train))[:10]
```

[57]:
```
[(5, 0),
 (2, 1),
 (7, 0),
 (1, 0),
 (7, 0),
 (7, 0),
 (2, 1),
 (2, 1),
 (2, 1),
 (2, 1)]
```

[58]:
```
bin_y_test = convert_target_to_binary(y_test, 2)
list(zip(y_test, bin_y_test))[:10]
```

[58]:
```
[(2, 1),
 (7, 0),
 (2, 1),
 (2, 1),
 (1, 0),
 (1, 0),
```

```
 (1, 0),
 (3, 0),
 (1, 0),
 (1, 0)]
```

Для исходной модели:

[59]:
```
bin_target_i = convert_target_to_binary(target_i, 2)
```

[60]:
```
balanced_accuracy_score(bin_y_test, bin_target_i)
```

[60]:
```
0.7516447368421053
```

Для оптимальной модели:

[61]:
```
bin_target_o = convert_target_to_binary(target_o, 2)
```

[62]:
```
balanced_accuracy_score(bin_y_test, bin_target_o)
```

[62]:
```
0.7911184210526316
```

Видно, что у исходной модели метрика составляет 75%, а у оптимальной - 79%.

2.5.3. Метрика “Матрица ошибок”

Создадим матрицу с помощью функции confusion_matrix:

[63]:
```
from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay
from sklearn.metrics import confusion_matrix
```

Для исходной модели:

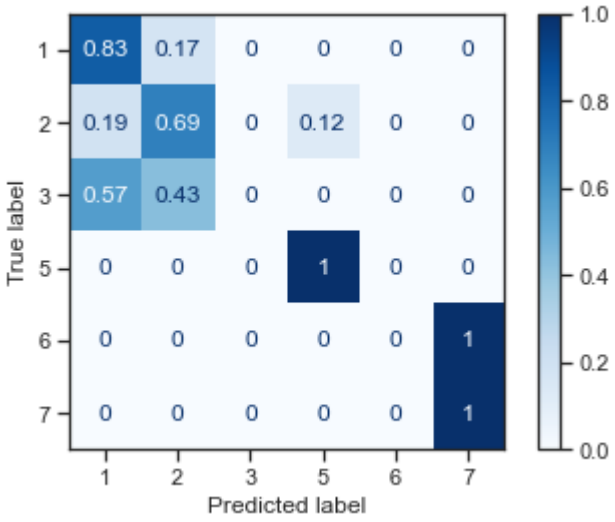
[64]:
```
confusion_matrix(y_test, target_i, labels=[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7])
```

[64]:
```
array([[ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0, 19,  4,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  3, 11,  0,  0,  2,  0,  0],
       [ 0,  4,  3,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  1,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  1],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  6]], dtype=int64)
```

Визуально представим матрицу ошибок, показывающую количество верно и ошибочно классифицированных данных:

[65]:
```
ConfusionMatrixDisplay.from_estimator(
        clf_i,
        X_test,
        y_test,
        display_labels=clf_i.classes_,
        cmap=plt.cm.Blues,
        normalize='true',
    )
```

[65]:
```
<sklearn.metrics._plot.confusion_matrix.ConfusionMatrixDisplay at 0x26c09b2c580>
```



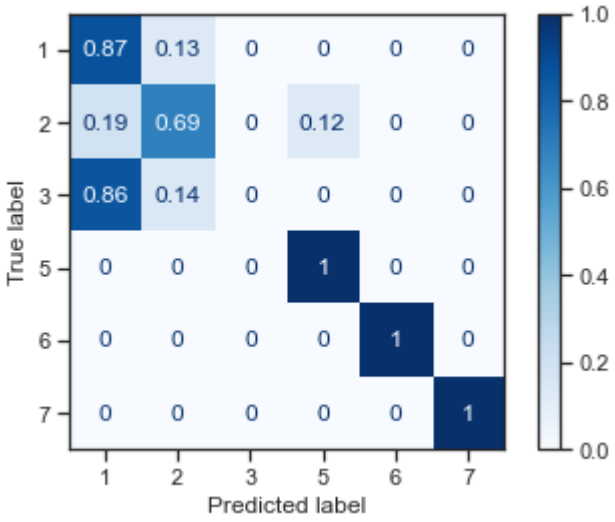
Для оптимальной модели:

[66]:
```
confusion_matrix(y_test, target_o, labels=[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7])
```

[66]:
```
array([[ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0, 20,  3,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  3, 11,  0,  0,  2,  0,  0],
       [ 0,  6,  1,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  1,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  1,  0],
       [ 0,  0,  0,  0,  0,  0,  0,  6]], dtype=int64)
```

[67]:
```
ConfusionMatrixDisplay.from_estimator(
        clf_o,
        X_test,
        y_test,
        display_labels=clf_o.classes_,
        cmap=plt.cm.Blues,
        normalize='true',
    )
```

[67]:
```
<sklearn.metrics._plot.confusion_matrix.ConfusionMatrixDisplay at 0x26c1bfd7970>
```



Точность у оптимальной модели выше, чем у исходной.

2.5.4. Метрика Precision

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

[68]:
```
from sklearn.metrics import precision_score
```

Для исходной модели:

[69]:
```
precision_score(bin_y_test, bin_target_i)
```

[69]: 0.6111111111111112

Для оптимальной модели:

[70]:
```
precision_score(bin_y_test, bin_target_o)
```

[70]: 0.7333333333333333

Также видна улучшенная точность у оптимальной по отношению к исходной (73% и 61%).

2.5.5. Метрика Recall

Recall показывает долю верно предсказанных классификатором положительных объектов, из всех действительно положительных объектов.

[71]:
```
from sklearn.metrics import recall_score
```

Для исходной:

[72]:
```
recall_score(bin_y_test, bin_target_i)
```

[72]: 0.6875

Для оптимальной:

[73]:
```
recall_score(bin_y_test, bin_target_o)
```

[73]: 0.6875

Точность моделей одинакова - 69%.

2.5.6. Метрика F1-мера

Для объединения метрик Precision и Recall используют F-меру - среднее гармоническое от Precision и Recall. В F1 мере вес точности = 1.

[74]:
```
from sklearn.metrics import f1_score
```

Для исходной:

[75]:
```
f1_score(bin_y_test, bin_target_i)
```

[75]:
```
0.6470588235294118
```

Для оптимальной:

[76]:
```
f1_score(bin_y_test, bin_target_o)
```

[76]:
```
0.7096774193548386
```

Точность оптимальной модели выше.

2.5.7. Вывод метрик через classification_report

Функция classification_report позволяет выводить значения точности, полноты и F-меры для всех классов выборки:

[77]:
```
from sklearn.metrics import classification_report
```

Для исходной:

[78]:
```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
classification_report(y_test, target_i,
                      target_names=clf_i.classes_, output_dict=True)
```

[78]:
```
{1: {'precision': 0.7307692307692307,
  'recall': 0.8260869565217391,
  'f1-score': 0.7755102040816326,
  'support': 23},
 2: {'precision': 0.6111111111111112,
  'recall': 0.6875,
  'f1-score': 0.6470588235294118,
  'support': 16},
 3: {'precision': 0.0, 'recall': 0.0, 'f1-score': 0.0, 'support': 7},
 5: {'precision': 0.3333333333333333,
  'recall': 1.0,
  'f1-score': 0.5,
  'support': 1},
 6: {'precision': 0.0, 'recall': 0.0, 'f1-score': 0.0, 'support': 1},
 7: {'precision': 0.8571428571428571,
  'recall': 1.0,
  'f1-score': 0.923076923076923,
  'support': 6},
 'accuracy': 0.6851851851851852,
 'macro avg': {'precision': 0.42205942205942204,
  'recall': 0.5855978260869565,
  'f1-score': 0.4742743251146612,
  'support': 54},
 'weighted avg': {'precision': 0.593734454845566,
```

```
  'recall': 0.6851851851851852,
  'f1-score': 0.6338543964594385,
  'support': 54}}
```

Для оптимальной:

[79]:
```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
classification_report(y_test, target_o,
                      target_names=clf_o.classes_, output_dict=True)
```

[79]:
```
{1: {'precision': 0.6896551724137931,
  'recall': 0.8695652173913043,
  'f1-score': 0.7692307692307693,
  'support': 23},
 2: {'precision': 0.7333333333333333,
  'recall': 0.6875,
  'f1-score': 0.7096774193548386,
  'support': 16},
 3: {'precision': 0.0, 'recall': 0.0, 'f1-score': 0.0, 'support': 7},
 5: {'precision': 0.3333333333333333,
  'recall': 1.0,
  'f1-score': 0.5,
  'support': 1},
 6: {'precision': 1.0, 'recall': 1.0, 'f1-score': 1.0, 'support': 1},
 7: {'precision': 1.0, 'recall': 1.0, 'f1-score': 1.0, 'support': 6},
 'accuracy': 0.7222222222222222,
 'macro avg': {'precision': 0.6260536398467433,
  'recall': 0.7595108695652174,
  'f1-score': 0.6631513647642681,
  'support': 54},
 'weighted avg': {'precision': 0.6468284376330352,
  'recall': 0.7222222222222222,
  'f1-score': 0.6767990074441687,
  'support': 54}}
```

2.5.8. ROC-кривая и ROC AUC

Используется для оценки качества бинарной классификации.

Обучим исходную модель на основе бинарной классифкации, чтобы получить вероятности типов:

[80]:
```
bin_clf_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors=20)
bin_clf_i.fit(X_train, bin_y_train)
bin_clf_i.predict(X_test)
```

[80]:
```
array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 1])
```

Предскажем вероятности типов:

[81]:
```
proba_target_i = bin_clf_i.predict_proba(X_test)
len(proba_target_i), proba_target_i
```

```
[81]: (54,
       array([[0.75, 0.25],
              [1.  , 0.  ],
              [0.55, 0.45],
              [0.55, 0.45],
              [0.6 , 0.4 ],
              [0.8 , 0.2 ],
              [0.45, 0.55],
              [0.7 , 0.3 ],
              [0.3 , 0.7 ],
              [0.75, 0.25],
              [0.2 , 0.8 ],
              [0.95, 0.05],
              [0.45, 0.55],
              [0.8 , 0.2 ],
              [0.65, 0.35],
              [0.55, 0.45],
              [0.55, 0.45],
              [0.75, 0.25],
              [0.95, 0.05],
              [0.95, 0.05],
              [0.8 , 0.2 ],
              [1.  , 0.  ],
              [0.25, 0.75],
              [0.75, 0.25],
              [0.6 , 0.4 ],
              [0.65, 0.35],
              [0.15, 0.85],
              [0.3 , 0.7 ],
              [0.5 , 0.5 ],
              [0.9 , 0.1 ],
              [0.75, 0.25],
              [0.85, 0.15],
              [0.8 , 0.2 ],
              [0.75, 0.25],
              [0.8 , 0.2 ],
              [0.55, 0.45],
              [0.45, 0.55],
              [0.55, 0.45],
              [0.75, 0.25],
              [0.8 , 0.2 ],
              [0.8 , 0.2 ],
              [1.  , 0.  ],
              [1.  , 0.  ],
              [0.9 , 0.1 ],
              [1.  , 0.  ],
              [0.75, 0.25],
              [0.4 , 0.6 ],
              [0.85, 0.15],
              [0.2 , 0.8 ],
              [1.  , 0.  ],
              [0.65, 0.35],
              [0.4 , 0.6 ],
```

```
        [0.8 , 0.2 ],
        [0.3 , 0.7 ]]))
```

Вероятность единичного класса:

[82]:
```
true_proba_target_i = proba_target_i[:,1]
true_proba_target_i
```

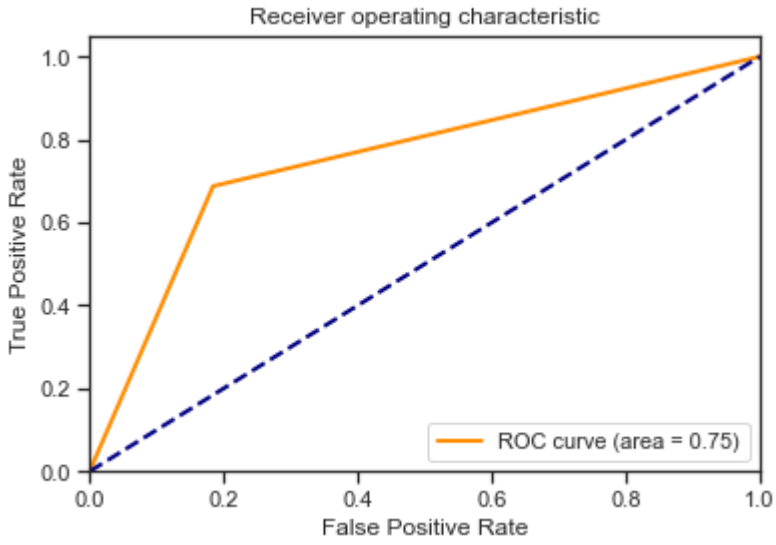
[82]:
```
array([0.25, 0.  , 0.45, 0.45, 0.4 , 0.2 , 0.55, 0.3 , 0.7 , 0.25, 0.8 ,
       0.05, 0.55, 0.2 , 0.35, 0.45, 0.45, 0.25, 0.05, 0.05, 0.2 , 0.  ,
       0.75, 0.25, 0.4 , 0.35, 0.85, 0.7 , 0.5 , 0.1 , 0.25, 0.15, 0.2 ,
       0.25, 0.2 , 0.45, 0.55, 0.45, 0.25, 0.2 , 0.2 , 0.  , 0.  , 0.1 ,
       0.  , 0.25, 0.6 , 0.15, 0.8 , 0.  , 0.35, 0.6 , 0.2 , 0.7 ])
```

ROC-кривая:

[83]:
```
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
```

[84]:
```
def draw_roc_curve(y_true, y_score, pos_label, average):
    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()
```

[85]:
```
draw_roc_curve(bin_y_test, bin_target_i, pos_label=1, average='micro')
```



Сделаем тоже самое для оптимальной модели:

[86]:
```
bin_clf_o = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5)
bin_clf_o.fit(X_train, bin_y_train)
bin_clf_o.predict(X_test)
```

[86]:
```
array([0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 1])
```

[87]:
```
proba_target_o = bin_clf_o.predict_proba(X_test)
len(proba_target_o), proba_target_o
```

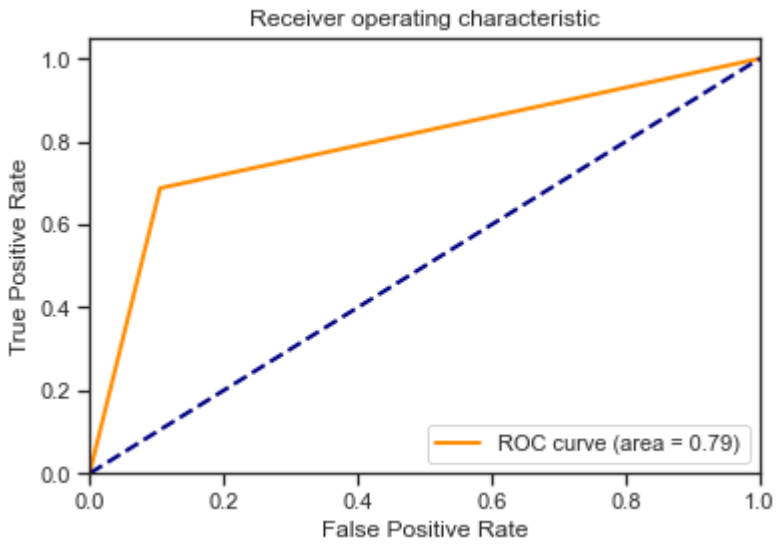
[87]:
```
(54,
 array([[1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [0.4, 0.6],
        [0.2, 0.8],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [0.4, 0.6],
        [0.8, 0.2],
        [0.4, 0.6],
        [1. , 0. ],
        [0. , 1. ],
        [1. , 0. ],
        [0.2, 0.8],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [0.2, 0.8],
        [0.6, 0.4],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [0.2, 0.8],
        [1. , 0. ],
        [0.8, 0.2],
        [0.8, 0.2],
        [0.2, 0.8],
        [0. , 1. ],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [0.8, 0.2],
        [0.4, 0.6],
        [0.8, 0.2],
        [0.8, 0.2],
        [0.8, 0.2],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
        [1. , 0. ],
```

```
       [1. , 0. ],
       [1. , 0. ],
       [1. , 0. ],
       [0.8, 0.2],
       [0.6, 0.4],
       [1. , 0. ],
       [0.2, 0.8],
       [1. , 0. ],
       [0.4, 0.6],
       [0.4, 0.6],
       [0.6, 0.4],
       [0. , 1. ]]))
```

[88]:
```
true_proba_target_o = proba_target_o[:,1]
true_proba_target_o
```

[88]:
```
array([0. , 0. , 0.6, 0.8, 0.2, 0. , 0.6, 0.2, 0.6, 0. , 1. , 0. , 0.8,
       0. , 0. , 0.8, 0.4, 0.2, 0. , 0. , 0.2, 0. , 0.8, 0. , 0.2, 0.2,
       0.8, 1. , 0.2, 0. , 0. , 0.2, 0. , 0. , 0.2, 0.6, 0.2, 0.2, 0.2,
       0. , 0. , 0. , 0. , 0. , 0. , 0.2, 0.4, 0. , 0.8, 0. , 0.6, 0.6,
       0.4, 1. ])
```

[89]:
```
draw_roc_curve(bin_y_test, bin_target_o, pos_label=1, average='micro')
```



Видно, что у оптимальной модели выше точность, чем у исходной.