

Лабораторная работа №4
по дисциплине
«Методы машинного обучения»
на тему
«Подготовка обучающей и тестовой выборки,
кросс-валидация и подбор гиперпараметров на
примере метода ближайших соседей»

Выполнил:
студент группы ИУ5-24М
Лецев А. О.

1. Цель лабораторной работы

Изучить сложные способы подготовки выборки и подбора гиперпараметров на примере метода ближайших соседей [1].

2. Задание

Требуется выполнить следующие действия [1]:

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

3. Ход выполнения работы

Подключим все необходимые библиотеки и настроим отображение графиков [2, 3]:

```
In [1]: from datetime import datetime
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.metrics import mean_absolute_error
from sklearn.metrics import median_absolute_error, r2_score
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.model_selection import KFold, RepeatedKFold, ShuffleSplit
from sklearn.model_selection import cross_val_score, train_test_split
from sklearn.model_selection import learning_curve, validation_curve
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# Enable inline plots
%matplotlib inline

# Set plots formats to save high resolution PNG
from IPython.display import set_matplotlib_formats
set_matplotlib_formats("retina")
```

Зададим ширину текстового представления данных, чтобы в дальнейшем текст в отчёте влезал на A4 [4]:

```
In [2]: pd.set_option("display.width", 70)
```

3.1. Предварительная подготовка данных

В качестве набора данных используются метеорологические данные с метеостанции HI-SEAS (Hawaii Space Exploration Analog and Simulation) за четыре месяца (с сентября по декабрь 2016 года) [5]:

```
In [3]: data = pd.read_csv("./SolarPrediction.csv")
```

Преобразуем временные колонки в соответствующий временной формат:

```
In [4]: data["Time"] = (pd
                        .to_datetime(data["UNIXTime"], unit="s", utc=True)
                        .dt.tz_convert("Pacific/Honolulu")).dt.time

    data["TimeSunRise"] = (pd
                        .to_datetime(data["TimeSunRise"],
                                    infer_datetime_format=True)
                        .dt.time)

    data["TimeSunSet"] = (pd
                        .to_datetime(data["TimeSunSet"],
                                    infer_datetime_format=True)
                        .dt.time)

    data = data.rename({"WindDirection(Degrees)": "WindDirection"},
                        axis=1)
```

Проверим полученные типы:

```
In [5]: data.dtypes
```

```
Out[5]: UNIXTime          int64
        Data              object
        Time              object
        Radiation         float64
        Temperature       int64
        Pressure          float64
        Humidity          int64
        WindDirection     float64
        Speed            float64
        TimeSunRise       object
        TimeSunSet        object
        dtype: object
```

Посмотрим на данные в данном наборе данных:

```
In [6]: data.head()
```

```

Out[6]:
      UNIXTime      Data      Time  Radiation \
0  1475229326  9/29/2016 12:00:00 AM  23:55:26    1.21
1  1475229023  9/29/2016 12:00:00 AM  23:50:23    1.21
2  1475228726  9/29/2016 12:00:00 AM  23:45:26    1.23
3  1475228421  9/29/2016 12:00:00 AM  23:40:21    1.21
4  1475228124  9/29/2016 12:00:00 AM  23:35:24    1.17

      Temperature  Pressure  Humidity  WindDirection  Speed \
0              48     30.46      59         177.39    5.62
1              48     30.46      58         176.78    3.37
2              48     30.46      57         158.75    3.37
3              48     30.46      60         137.71    3.37
4              48     30.46      62         104.95    5.62

      TimeSunRise TimeSunSet
0      06:13:00    18:13:00
1      06:13:00    18:13:00
2      06:13:00    18:13:00
3      06:13:00    18:13:00
4      06:13:00    18:13:00

```

Очевидно, что все эти временные характеристики в таком виде нам не особо интересны. Преобразуем все нечисловые столбцы в числовые. В целом колонка `UNIXTime` нам не интересна, дата скорее интереснее в виде дня в году. Время измерения может быть интересно в двух видах: просто секунды с полуночи, и время, нормализованное относительно рассвета и заката. Для преобразования времени в секунды используем следующий метод [6]:

```

In [7]: def time_to_second(t):
        return ((datetime.combine(datetime.min, t) - datetime.min)
                .total_seconds())

```

```

In [8]: df = data.copy()

timeInSeconds = df["Time"].map(time_to_second)

sunrise = df["TimeSunRise"].map(time_to_second)
sunset = df["TimeSunSet"].map(time_to_second)
df["DayPart"] = (timeInSeconds - sunrise) / (sunset - sunrise)

df = df.drop(["UNIXTime", "Data", "Time",
             "TimeSunRise", "TimeSunSet"], axis=1)

df.head()

```

```

Out[8]:
      Radiation  Temperature  Pressure  Humidity  WindDirection  Speed \
0          1.21           48     30.46      59         177.39    5.62
1          1.21           48     30.46      58         176.78    3.37
2          1.23           48     30.46      57         158.75    3.37
3          1.21           48     30.46      60         137.71    3.37
4          1.17           48     30.46      62         104.95    5.62

```

```

    DayPart
0  1.475602
1  1.468588
2  1.461713
3  1.454653
4  1.447778

```

In [9]: df.dtypes

```

Out[9]: Radiation      float64
        Temperature    int64
        Pressure       float64
        Humidity       int64
        WindDirection  float64
        Speed          float64
        DayPart        float64
        dtype: object

```

С такими данными уже можно работать. Проверим размер набора данных:

In [10]: df.shape

```

Out[10]: (32686, 7)

```

Проверим основные статистические характеристики набора данных:

In [11]: df.describe()

```

Out[11]:
      Radiation  Temperature  Pressure  Humidity  \
count  32686.000000  32686.000000  32686.000000  32686.000000
mean    207.124697    51.103255    30.422879    75.016307
std     315.916387     6.201157     0.054673    25.990219
min       1.110000    34.000000    30.190000     8.000000
25%       1.230000    46.000000    30.400000    56.000000
50%       2.660000    50.000000    30.430000    85.000000
75%      354.235000    55.000000    30.460000    97.000000
max     1601.260000    71.000000    30.560000   103.000000

      WindDirection      Speed  DayPart
count  32686.000000  32686.000000  32686.000000
mean    143.489821     6.243869     0.482959
std      83.167500     3.490474     0.602432
min       0.090000     0.000000    -0.634602
25%      82.227500     3.370000    -0.040139
50%     147.700000     5.620000     0.484332
75%     179.310000     7.870000     1.006038
max     359.950000    40.500000     1.566061

```

Проверим наличие пропусков в данных:

In [12]: df.isnull().sum()

```
Out[12]: Radiation      0
         Temperature    0
         Pressure       0
         Humidity       0
         WindDirection  0
         Speed          0
         DayPart        0
         dtype: int64
```

3.2. Разделение данных

Разделим данные на целевой столбец и признаки:

```
In [13]: X = df.drop("Radiation", axis=1)
         y = df["Radiation"]
```

```
In [14]: print(X.head(), "\n")
         print(y.head())
```

	Temperature	Pressure	Humidity	WindDirection	Speed	DayPart
0	48	30.46	59	177.39	5.62	1.475602
1	48	30.46	58	176.78	3.37	1.468588
2	48	30.46	57	158.75	3.37	1.461713
3	48	30.46	60	137.71	3.37	1.454653
4	48	30.46	62	104.95	5.62	1.447778

```
0    1.21
1    1.21
2    1.23
3    1.21
4    1.17
```

```
Name: Radiation, dtype: float64
```

```
In [15]: print(X.shape)
         print(y.shape)
```

```
(32686, 6)
(32686,)
```

Предобработаем данные, чтобы методы работали лучше:

```
In [16]: columns = X.columns
         scaler = StandardScaler()
         X = scaler.fit_transform(X)
         pd.DataFrame(X, columns=columns).describe()
```

```
c:\users\matsh\onedrive\428a~1\3188~1\2425f~1\9b69~1\lab4\venv~1\lib\site-packages
return self.partial_fit(X, y)
c:\users\matsh\onedrive\428a~1\3188~1\2425f~1\9b69~1\lab4\venv~1\lib\site-packages
return self.fit(X, **fit_params).transform(X)
```

```

Out[16]:
      Temperature      Pressure      Humidity      WindDirection \
count  3.268600e+04  3.268600e+04  3.268600e+04  3.268600e+04
mean   5.565041e-16  2.904952e-14  1.391260e-17  6.956302e-17
std    1.000015e+00  1.000015e+00  1.000015e+00  1.000015e+00
min    -2.758117e+00 -4.259540e+00 -2.578560e+00 -1.724255e+00
25%    -8.229646e-01 -4.184734e-01 -7.316829e-01 -7.366250e-01
50%    -1.779139e-01  1.302504e-01  3.841386e-01  5.062367e-02
75%     6.283995e-01  6.789742e-01  8.458578e-01  4.307058e-01
max     3.208603e+00  2.508053e+00  1.076717e+00  2.602741e+00

      Speed      DayPart
count  3.268600e+04  3.268600e+04
mean   -9.738822e-17  5.217226e-18
std     1.000015e+00  1.000015e+00
min     -1.788859e+00 -1.855112e+00
25%     -8.233591e-01 -8.683240e-01
50%     -1.787376e-01  2.279483e-03
75%      4.658840e-01  8.682924e-01
max      9.814329e+00  1.797910e+00

```

Разделим выборку на тренировочную и тестовую:

```

In [17]: X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
      test_size=0.25, random_state=346705925)

```

```

In [18]: print(X_train.shape)
      print(X_test.shape)
      print(y_train.shape)
      print(y_test.shape)

```

```

(24514, 6)
(8172, 6)
(24514,)
(8172,)

```

3.3. Модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K

Напишем функцию, которая считает метрики построенной модели:

```

In [19]: def test_model(model):
      print("mean_absolute_error:",
            mean_absolute_error(y_test, model.predict(X_test)))
      print("median_absolute_error:",
            median_absolute_error(y_test, model.predict(X_test)))
      print("r2_score:",
            r2_score(y_test, model.predict(X_test)))

```

Попробуем метод ближайших соседей с гиперпараметром $K = 5$:

```
In [20]: reg_5 = KNeighborsRegressor(n_neighbors=5)
         reg_5.fit(X_train, y_train)
```

```
Out[20]: KNeighborsRegressor(algorithm='auto', leaf_size=30, metric='minkowski',
                             metric_params=None, n_jobs=None, n_neighbors=5, p=2,
                             weights='uniform')
```

Проверим метрики построенной модели:

```
In [21]: test_model(reg_5)

mean_absolute_error: 55.39857905041605
median_absolute_error: 4.0170000000000004
r2_score: 0.8677873476991447
```

Видно, что средние ошибки не очень показательны для одной модели, они больше подходят для сравнения разных моделей. В тоже время коэффициент детерминации неплох сам по себе, в данном случае модель более-менее состоятельна.

3.4. Использование кросс-валидации

Проверим различные стратегии кросс-валидации. Для начала посмотрим классический K-fold:

```
In [22]: scores = cross_val_score(KNeighborsRegressor(n_neighbors=5), X, y,
                                   cv=KFold(n_splits=10), scoring="r2")

         print(scores)
         print(scores.mean(), "±", scores.std())

[0.83276085 0.5984654 0.83547149 0.75974839 0.76407458 0.81422383
 0.85420738 0.79432111 0.74927049 0.28234327]
0.7284886763598686 ± 0.16383980384698185
```

```
In [23]: scores = cross_val_score(KNeighborsRegressor(n_neighbors=5), X, y,
                                   cv=RepeatedKFold(n_splits=5, n_repeats=2),
                                   scoring="r2")

         print(scores)
         print(scores.mean(), "±", scores.std())

[0.86645745 0.87359216 0.86201671 0.87253355 0.86825249 0.87149987
 0.86931511 0.86595468 0.86938791 0.867287 ]
0.8686296919477157 ± 0.0032664937392509145
```

```
In [24]: scores = cross_val_score(KNeighborsRegressor(n_neighbors=5), X, y,
                                   cv=ShuffleSplit(n_splits=10), scoring="r2")

         print(scores)
         print(scores.mean(), "±", scores.std())

[0.87288289 0.86965989 0.87846365 0.87005449 0.86511118 0.87199795
 0.87614293 0.87572756 0.87447917 0.86520971]
0.8719729406086248 ± 0.00427294746868573
```


3.5. Подбор гиперпараметра K

Введем список настраиваемых параметров:

```
In [25]: n_range = np.array(range(1, 50, 2))
         tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}
         n_range
```

```
Out[25]: array([ 1,  3,  5,  7,  9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23, 25, 27, 29, 31, 33, 35, 37, 39, 41, 43, 45, 47, 49])
```

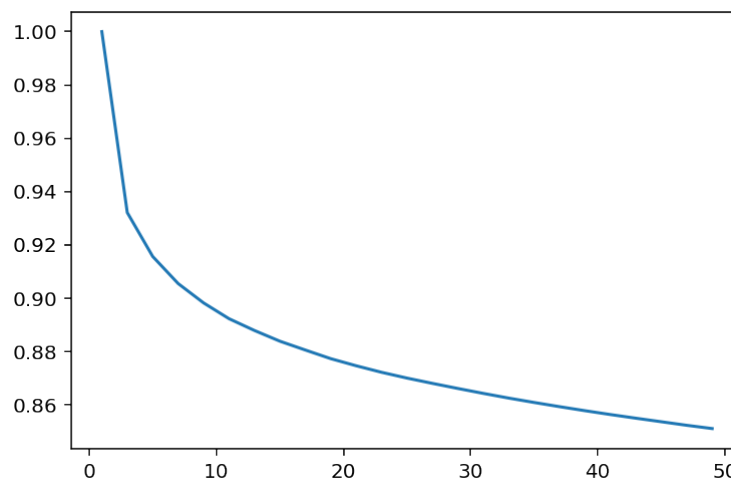
Запустим подбор параметра:

```
In [26]: gs = GridSearchCV(KNeighborsRegressor(), tuned_parameters,
                           cv=ShuffleSplit(n_splits=10), scoring="r2",
                           return_train_score=True, n_jobs=-1)
         gs.fit(X, y)
         gs.best_params_
```

```
Out[26]: {'n_neighbors': 5}
```

Проверим результаты при разных значения гиперпараметра на тренировочном наборе данных:

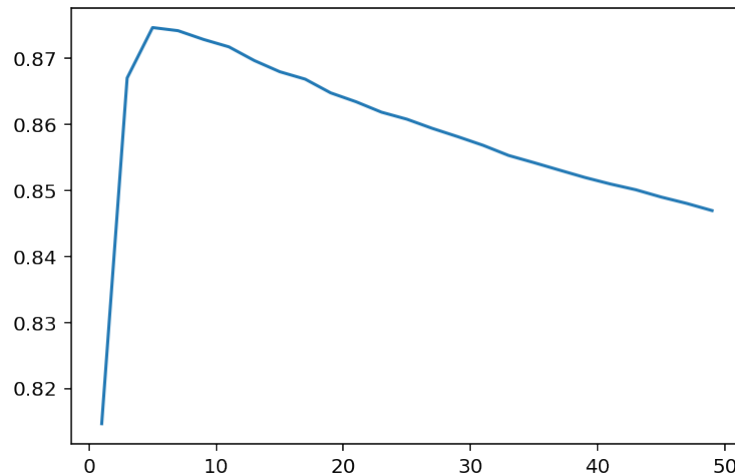
```
In [27]: plt.plot(n_range, gs.cv_results_["mean_train_score"]);
```



Очевидно, что для $K = 1$ на тренировочном наборе данных мы находим ровно ту же точку, что и нужно предсказать, и чем больше её соседей мы берём — тем меньше точность.

На тестовом наборе данных картина сильно интереснее:

```
In [28]: plt.plot(n_range, gs.cv_results_["mean_test_score"]);
```



Выходит, что сначала соседей слишком мало (высоко влияние выбросов), а затем количество соседей постепенно становится слишком велико, и среднее значение по этим соседям всё больше и больше оттягивает значение от истинного.

Проверим получившуюся модель:

```
In [29]: reg = KNeighborsRegressor(**gs.best_params_)
          reg.fit(X_train, y_train)
          test_model(reg)
```

```
mean_absolute_error: 55.39857905041605
median_absolute_error: 4.0170000000000004
r2_score: 0.8677873476991447
```

В целом получили примерно тот же результат. Очевидно, что проблема в том, что данный метод и так показал достаточно хороший результат для данной выборки.

Построим кривую обучения [7]:

```
In [30]: def plot_learning_curve(estimator, title, X, y, ylim=None, cv=None):
          train_sizes=np.linspace(.1, 1.0, 5)

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

```

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

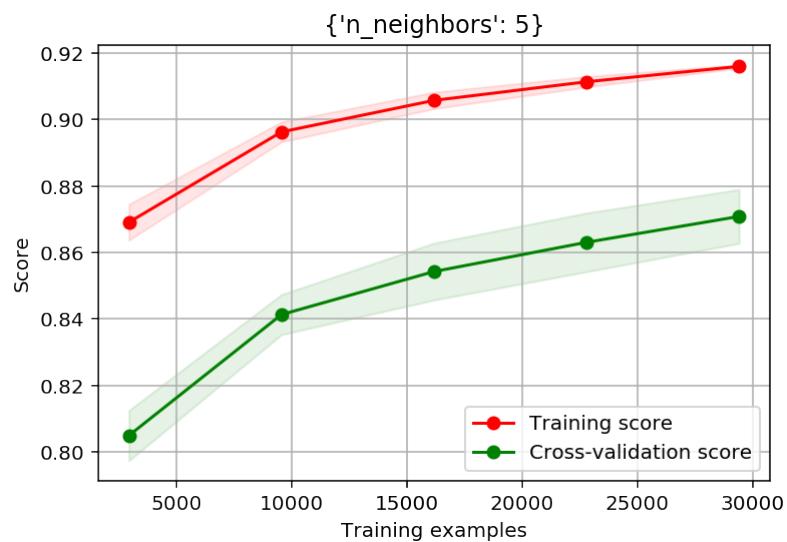
plt.legend(loc="best")
return plt

```

```

In [31]: plot_learning_curve(reg, str(gs.best_params_), X, y,
                             cv=ShuffleSplit(n_splits=10));

```



Построим кривую валидации:

```

In [32]: def plot_validation_curve(estimator, title, X, y,
                                   param_name, param_range, cv,
                                   scoring="accuracy"):

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

    plt.title(title)

```

```

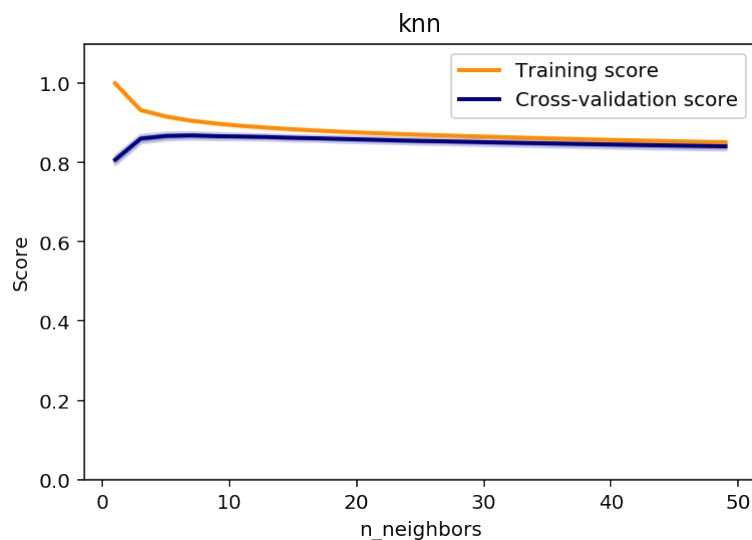
plt.xlabel(param_name)
plt.ylabel("Score")
plt.ylim(0.0, 1.1)
lw = 2
plt.plot(param_range, train_scores_mean, label="Training score",
         color="darkorange", lw=lw)
plt.fill_between(param_range, train_scores_mean - train_scores_std,
                 train_scores_mean + train_scores_std, alpha=0.2,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

```

```

In [33]: plot_validation_curve(KNeighborsRegressor(), "knn", X, y,
                             param_name="n_neighbors", param_range=n_range,
                             cv=ShuffleSplit(n_splits=10), scoring="r2");

```



Список литературы

- [1] Галанюк Ю. Е. Лабораторная работа «Подготовка обучающей и тестовой выборки, кросс-валидация и подбор гиперпараметров на примере метода ближайших соседей» [Электронный ресурс] // GitHub. — 2019. — Режим доступа: https://github.com/ugapanyuk/ml_course/wiki/LAB_KNN (дата обращения: 05.04.2019).
- [2] Team The IPython Development. IPython 7.3.0 Documentation [Electronic resource] // Read the Docs. — 2019. — Access mode: <https://ipython.readthedocs.io/en/stable/> (online; accessed: 20.02.2019).

- [3] Waskom M. seaborn 0.9.0 documentation [Electronic resource] // PyData. — 2018. — Access mode: <https://seaborn.pydata.org/> (online; accessed: 20.02.2019).
- [4] pandas 0.24.1 documentation [Electronic resource] // PyData. — 2019. — Access mode: <http://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/> (online; accessed: 20.02.2019).
- [5] dronio. Solar Radiation Prediction [Electronic resource] // Kaggle. — 2017. — Access mode: <https://www.kaggle.com/dronio/SolarEnergy> (online; accessed: 18.02.2019).
- [6] Chrétien M. Convert datetime.time to seconds [Electronic resource] // Stack Overflow. — 2017. — Access mode: <https://stackoverflow.com/a/44823381> (online; accessed: 20.02.2019).
- [7] scikit-learn 0.20.3 documentation [Electronic resource]. — 2019. — Access mode: <https://scikit-learn.org/> (online; accessed: 05.04.2019).