Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
Кафедра «Системы обработки информации и управления»

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
Лещев А. О.

Москва — 2019 г.

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

        # 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 метрологические 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,)
```

Разделим выборку на тренировочную и тестовую:

```
In [16]: X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                                        test_size=0.25, random_state=346705925)
```

```
In [17]: 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 [18]: 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 [19]: reg_5 = KNeighborsRegressor(n_neighbors=5)
         reg_5.fit(X_train, y_train)
```

```
Out[19]: 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 [20]: test_model(reg_5)
```

```
mean_absolute_error: 108.91621708272147
median_absolute_error: 42.613
r2_score: 0.6615910027421655
```

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 [21]: scores = cross_val_score(KNeighborsRegressor(n_neighbors=5), X, y,
                                  cv=KFold(n_splits=10), scoring="r2")
         print(scores)
         print(scores.mean(), "±", scores.std())
```

```
[0.66405889 0.43839604 0.63647152 0.55418655 0.49988143 0.49200125
 0.61591093 0.61630795 0.59734435 0.36549903]
0.5480057944638976 ± 0.09155259343056717
```

```
In [22]: 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())
```

```
[0.65289526 0.6528609  0.65187502 0.64769449 0.63965017 0.6425549
 0.64950303 0.64597133 0.65878865 0.65430962]
0.6496103362454976 ± 0.005465517679968306
```

```
In [23]: scores = cross_val_score(KNeighborsRegressor(n_neighbors=5), X, y,
                                  cv=ShuffleSplit(n_splits=10), scoring="r2")
         print(scores)
         print(scores.mean(), "±", scores.std())
```

```
[0.66354205 0.63094443 0.63430483 0.64449188 0.68082732 0.66318962
 0.66577359 0.66080328 0.6613604  0.64940127]
0.6554638665691975 ± 0.014641941747625842
```

3.5. Подбор гиперпараметра K

Введем список настраиваемых параметров:

```
In [24]: n_range = np.array(range(1, 50, 2))
         tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
         n_range
```

```
Out[24]: 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])
```

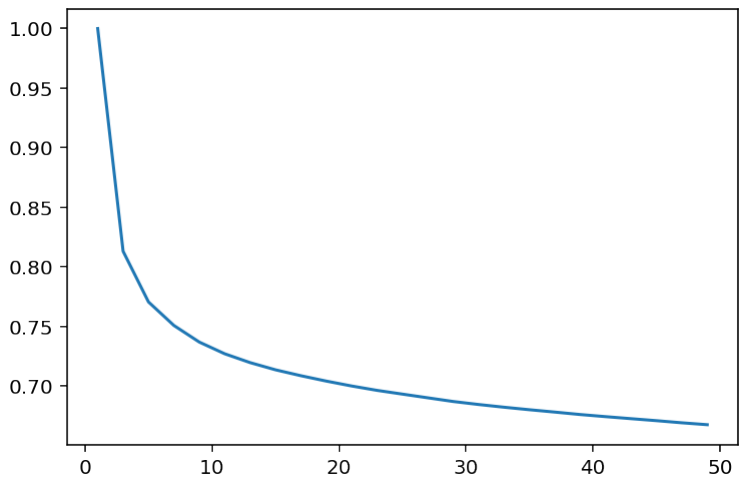
Запустим подбор параметра:

```
In [25]: gs = GridSearchCV(KNeighborsRegressor(), tuned_parameters,
                           cv=ShuffleSplit(n_splits=10), scoring="r2",
                           return_train_score=True)
         gs.fit(X, y)
         gs.best_params_
```

```
Out[25]: {'n_neighbors': 13}
```

Проверим результаты при разных значения гиперпараметра на тренировочном наборе данных:

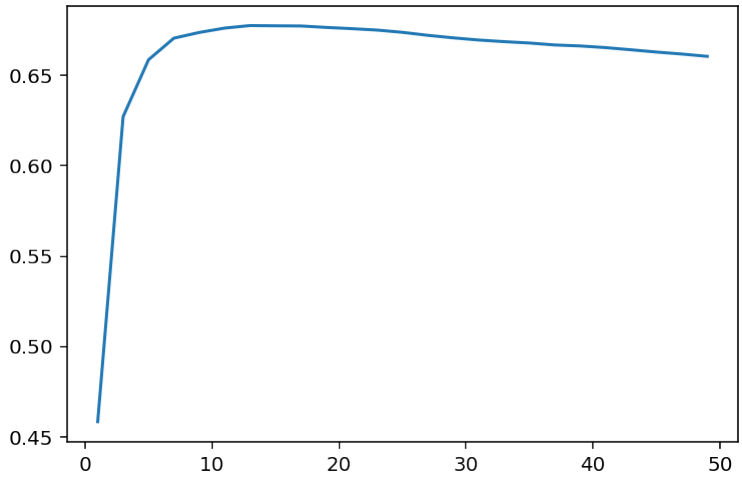
```
In [26]: plt.plot(n_range, gs.cv_results_["mean_train_score"]);
```



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 [27]: 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 [28]: reg = KNeighborsRegressor(**gs.best_params_)
         reg.fit(X_train, y_train)
         test_model(reg)

mean_absolute_error: 109.74182264015964
median_absolute_error: 48.59076923076918
r2_score: 0.6789342169988302
```

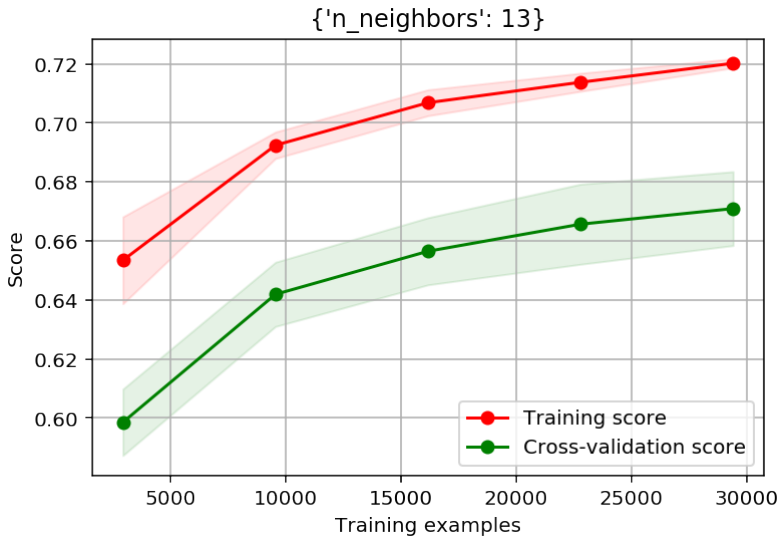
В целом получили примерно тот же результат. Очевидно, что проблема в том, что данный метод не может дать хороший результат для данной выборки.

Построим кривую обучения [7]:

```
In [29]: def plot_learning_curve(estimator, title, X, y, ylim=None, cv=None,
                                 n_jobs=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=n_jobs, 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 [30]: plot_learning_curve(reg, str(gs.best_params_), X, y,
                             cv=ShuffleSplit(n_splits=10));
```

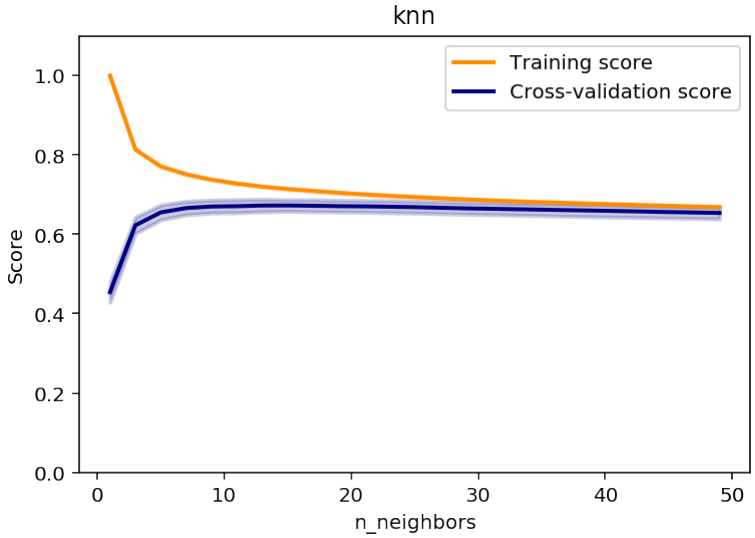


Построим кривую валидации:

```
In [31]: 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=4)
    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 [32]: 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] Гапанюк 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).