МГТУ им. Н. Э. Баумана, кафедра ИУ5

курс “Технологии машинного обучения”

Лабораторная работа №4

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

ВЫПОЛНИЛ:

Пученков Д.О.

Группа: ИУ5-61Б

ПРОВЕРИЛ:

Гапанюк Ю.Е.

Москва, 2020 г.

Цель лабораторной работы: изучение сложных способов подготовки выборки и подбора гиперпараметров на примере метода ближайших соседей.

Задание:

1. Выберите набор данных (датасет) для решения задачи классификации или регрессии.
2. С использованием метода train_test_split разделите выборку на обучающую и тестовую.
3. Обучите модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оцените качество модели с помощью подходящих для задачи метрик.
4. Постройте модель и оцените качество модели с использованием кросс-валидации.
5. Произведите подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации.

Выполненная работа:

Загрузка и первичный анализ данных

In [313]:
```
import pandas as pd
from typing import Dict, Tuple
from scipy import stats
from sklearn.datasets import load_iris, load_boston, load_wine
from sklearn.model_selection import train_test_split, cross_val_score, cross_validate, GridSearchCV
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
from sklearn.metrics import plot_confusion_matrix
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score, f1_score, classification_report
from sklearn.metrics import confusion_matrix
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, mean_squared_log_error, median_absolute_error, r2_score
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")
```

In [319]:
```
wine = load_wine()
```

In [320]:
```
# Наименования признаков
wine.feature_names
```

Out[320]:
```
['alcohol',
 'malic_acid',
 'ash',
 'alcalinity_of_ash',
 'magnesium',
 'total_phenols',
 'flavanoids',
 'nonflavanoid_phenols',
 'proanthocyanins',
 'color_intensity',
 'hue',
 'od280/od315_of_diluted_wines',
 'proline']
```

In [322]:
```
# Размер выборки
wine.data.shape, wine.target.shape
```

Out[322]:
```
((178, 13), (178,))
```

Формирование DataFrame

In [323]:
```
# Сформируем DataFrame
wine_df = pd.DataFrame(data= np.c_[wine['data'], wine['target']],
                       columns= list(wine['feature_names']) + ['target'])
```

In [324]:
```
# И выведем его статистические характеристики
wine_df.describe()
```

Out[324]:

	alcohol	malic_acid	ash	alcalinity_of_ash	magnesium	total_phenols	flavanoids	nonflavanoid_phenols	proanthocyanins	color_intensity	
count	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	1
mean	13.000618	2.336348	2.366517	19.494944	99.741573	2.295112	2.029270	0.361854	1.590899	5.058090	
std	0.811827	1.117146	0.274344	3.339564	14.282484	0.625851	0.998859	0.124453	0.572359	2.318286	
min	11.030000	0.740000	1.360000	10.600000	70.000000	0.980000	0.340000	0.130000	0.410000	1.280000	
25%	12.362500	1.602500	2.210000	17.200000	88.000000	1.742500	1.205000	0.270000	1.250000	3.220000	
50%	13.050000	1.865000	2.360000	19.500000	98.000000	2.355000	2.135000	0.340000	1.555000	4.690000	
75%	13.677500	3.082500	2.557500	21.500000	107.000000	2.800000	2.875000	0.437500	1.950000	6.200000	
max	14.830000	5.800000	3.230000	30.000000	162.000000	3.880000	5.080000	0.660000	3.580000	13.000000	

Разделение данных на обучающую и тестовую выборки и построение базовых моделей на основе метода ближайших соседей

In [325]:
```
# Разделение данных на обучающую и тестовую выборки
wine_X_train, wine_X_test, wine_y_train, wine_y_test = train_test_split(
    wine.data, wine.target, test_size=0.3, random_state=1)
```

In [326]:
```
# Размер обучающей выборки
wine_X_train.shape, wine_y_train.shape
```

Out[326]:
```
((124, 13), (124,))
```

In [328]:
```
# Размер тестовой выборки
wine_X_test.shape, wine_y_test.shape
```

Out[328]:
```
((54, 13), (54,))
```

In [345]:
```
# 3 ближайших соседа
cl1_1 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
cl1_1.fit(wine_X_train, wine_y_train)
target1_1 = cl1_1.predict(wine_X_test)
len(target1_1), target1_1
```

Out[345]:
```
(54,
 array([0, 1, 2, 1, 0, 1, 2, 0, 2, 1, 0, 2, 1, 0, 2, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1,
        2, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 2, 1, 0, 0, 1, 2, 0,
        0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 2, 2, 0]))
```

In [344]:
```
# 5 ближайших соседей
cl1_2 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5)
cl1_2.fit(wine_X_train, wine_y_train)
target1_2 = cl1_2.predict(wine_X_test)
len(target1_2), target1_2
```

Out[344]:
```
(54,
 array([1, 1, 2, 2, 0, 1, 2, 0, 2, 1, 0, 2, 1, 0, 2, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1,
        2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 2, 1, 0, 0, 1, 2, 0,
        0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 2, 2, 0]))
```

Метрики качества классификации

1) Accuracy

In [343]:
```
# wine_y_test - эталонное значение классов из исходной (тестовой) выборки
# target* - предсказанное значение классов

# 3 ближайших соседа
accuracy_score(wine_y_test, target1_1)
```

Out[343]:
```
0.7407407407407407
```

In [332]:
```
# 5 ближайших соседей
accuracy_score(wine_y_test, target1_2)
```

Out[332]:
```
0.7037037037037037
```

2) Матрица ошибок или Confusion Matrix

In [333]:
```
# Конвертация целевого признака в бинарный
def convert_target_to_binary(array:np.ndarray, target:int) -> np.ndarray:
    # Если целевой признак совпадает с указанным, то 1 иначе 0
    res = [1 if x==target else 0 for x in array]
    return res
bin_wine_y_test = convert_target_to_binary(wine_y_test, 2)
bin_target1_1 = convert_target_to_binary(target1_1, 2)
bin_target1_2 = convert_target_to_binary(target1_2, 2)
confusion_matrix(bin_wine_y_test, bin_target1_1, labels=[0, 1])
```

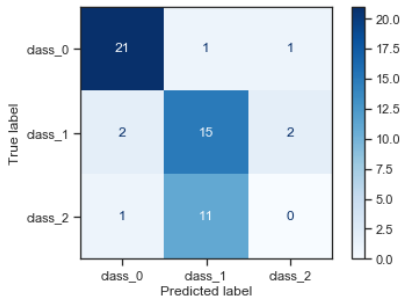
Out[333]:
```
array([[39,  3],
       [12,  0]], dtype=int64)
```

In [334]:
```
tn, fp, fn, tp = confusion_matrix(bin_wine_y_test, bin_target1_1).ravel()
tn, fp, fn, tp
```

Out[334]:
```
(39, 3, 12, 0)
```

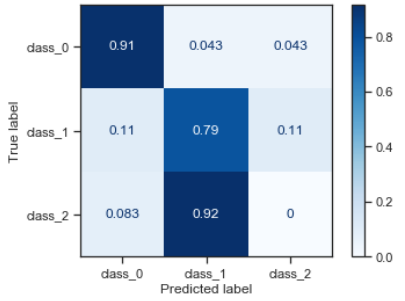
In [335]:
```
plot_confusion_matrix(cl1_1, wine_X_test, wine_y_test,
                      display_labels=wine.target_names, cmap=plt.cm.Blues)
```

Out[335]:
```
<sklearn.metrics._plot.confusion_matrix.ConfusionMatrixDisplay at 0xd59ff30>
```



In [336]:
```
plot_confusion_matrix(cl1_1, wine_X_test, wine_y_test,
                      display_labels=wine.target_names, cmap=plt.cm.Blues,
                      normalize='true')
```

Out[336]:
```
<sklearn.metrics._plot.confusion_matrix.ConfusionMatrixDisplay at 0xd4a3ed0>
```

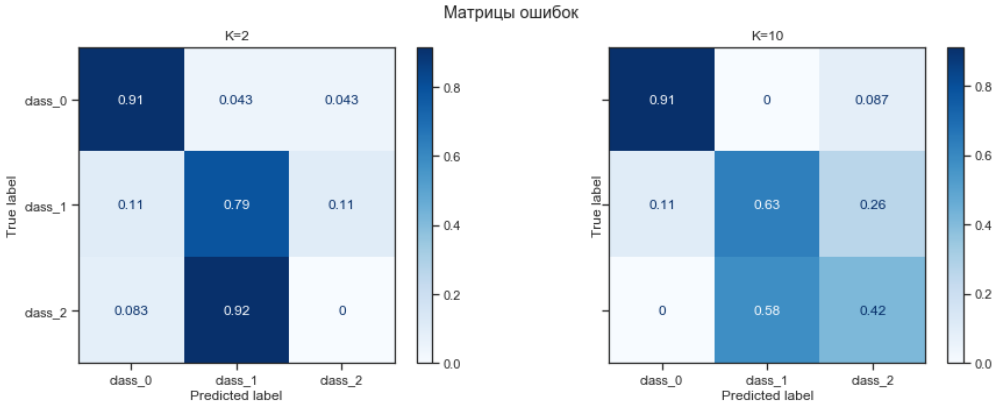


In [337]:
```
fig, ax = plt.subplots(1, 2, sharex='col', sharey='row', figsize=(15,5))

plot_confusion_matrix(cl1_1, wine_X_test, wine_y_test,
                      display_labels=wine.target_names,
                      cmap=plt.cm.Blues, normalize='true', ax=ax[0])

plot_confusion_matrix(cl1_2, wine_X_test, wine_y_test,
                      display_labels=wine.target_names,
                      cmap=plt.cm.Blues, normalize='true', ax=ax[1])

fig.suptitle('Матрицы ошибок')
ax[0].title.set_text('K=2')
ax[1].title.set_text('K=10')
```



3) Precision, recall и F-мера

In [348]:
```
# По умолчанию метрики считаются для 1 класса бинарной классификации
# Для 3 ближайших соседей
precision_score(bin_wine_y_test, bin_target1_1), recall_score(bin_wine_y_test, bin_target1_1)
```

Out[348]: (0.0, 0.0)

In [347]:
```
# Для 5 ближайших соседей
precision_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2), recall_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2)
```

Out[347]: (0.4166666666666667, 0.4166666666666667)

In [350]:
```
# Параметры TP, TN, FP, FN считаются как сумма по всем классам
precision_score(wine_y_test, target1_1, average='micro')
```

Out[350]: 0.7407407407407407

In [351]:
```
# Параметры TP, TN, FP, FN считаются отдельно для каждого класса
# и берется среднее значение, дисбаланс классов не учитывается.
precision_score(wine_y_test, target1_1, average='macro')
```

Out[351]: 0.6990740740740741

In [352]:
```
# Параметры TP, TN, FP, FN считаются отдельно для каждого класса
# и берется средневзвешенное значение, дисбаланс классов учитывается
# в виде веса классов (вес - количество истинных значений каждого класса).
precision_score(wine_y_test, target1_1, average='weighted')
```

Out[352]: 0.7379115226337448

In [353]:
```
classification_report(wine_y_test, target1_1,
                      target_names=wine.target_names, output_dict=True)
```

Out[353]:
```
{'class_0': {'precision': 0.875,
  'recall': 0.9130434782608695,
  'f1-score': 0.8936170212765957,
  'support': 23},
 'class_1': {'precision': 0.7222222222222222,
  'recall': 0.6842105263157895,
  'f1-score': 0.7027027027027027,
  'support': 19},
 'class_2': {'precision': 0.5, 'recall': 0.5, 'f1-score': 0.5, 'support': 12},
 'accuracy': 0.7407407407407407,
 'macro avg': {'precision': 0.6990740740740741,
  'recall': 0.6990846681922197,
  'f1-score': 0.6987732413264328,
  'support': 54},
 'weighted avg': {'precision': 0.7379115226337448,
  'recall': 0.7407407407407407,
  'f1-score': 0.7389730155687603,
  'support': 54}}
```

4) ROC-кривая и ROC AUC

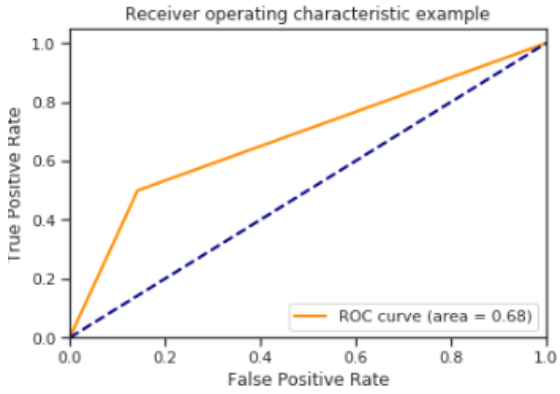
In [354]:
```
fpr, tpr, thresholds = roc_curve(bin_wine_y_test, bin_target1_1,
                                 pos_label=1)
fpr, tpr, thresholds
```

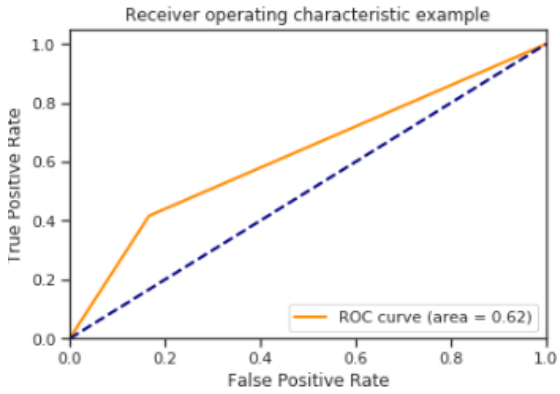
Out[354]:
```
(array([0.        , 0.07142857, 1.        ]),
 array([0., 0., 1.]),
 array([2, 1, 0]))
```

In [357]:
```
# Отрисовка ROC-кривой
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 example')
    plt.legend(loc="lower right")
    plt.show()

# Для 3 ближайших соседей
draw_roc_curve(bin_wine_y_test, bin_target1_1, pos_label=1, average='micro')

# Для 5 ближайших соседей
draw_roc_curve(bin_wine_y_test, bin_target1_2, pos_label=1, average='micro')
```





Проанализировав результаты полученных метрик качества классификации, можно судить о среднем качестве классификиции.

Разбиение выборки на k частей с помощью кросс-валидации. Наиболее простым способом кросс-валидации является вызов функции cross_val_score. В этом случае стратегия кросс-валидации определяется автоматически

In [358]:
```
wine_cross = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                             wine.data, wine.target, cv=11)
```

In [359]:
```
wine_cross
```

Out[359]:
```
array([0.58823529, 0.64705882, 0.6875    , 0.5625    , 0.5625    ,
       0.625     , 0.8125    , 0.6875    , 0.8125    , 0.75      ,
       0.75      ])
```

In [360]:
```
np.mean(wine_cross)
```

Out[360]:
```
0.68048128342246
```

In [361]:
```
wining = {'precision': 'precision_weighted',
          'recall': 'recall_weighted',
          'f1': 'f1_weighted'}

wine_cross = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                            wine.data, wine.target, scoring=wining,
                            cv=3, return_train_score=True)
wine_cross
```

Out[361]:
```
{'fit_time': array([0.00099993, 0.00099993, 0.00099993]),
 'score_time': array([0.00800037, 0.00700068, 0.00700021]),
 'test_precision': array([0.48984127, 0.62317561, 0.70585516]),
 'train_precision': array([0.91000807, 0.8877454 , 0.85825075]),
 'test_recall': array([0.56666667, 0.6440678 , 0.72881356]),
 'train_recall': array([0.89830508, 0.87394958, 0.83193277]),
 'test_f1': array([0.51069094, 0.6198816 , 0.6798559 ]),
 'train_f1': array([0.89415947, 0.8703245 , 0.8181316 ])}
```

Нахождение наилучшего гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации

In [362]:
```
n_range = np.array(range(5,30,1))
tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
tuned_parameters
```

Out[362]:
```
[{'n_neighbors': array([ 5,  6,  7,  8,  9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21,
        22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29])}]
```

In [381]:
```
%%time
clf_gs = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5, scoring='accuracy')
clf_gs.fit(wine_X_train, wine_y_train)
```

```
Wall time: 480 ms
```

Out[381]:
```
GridSearchCV(cv=5, error_score=nan,
             estimator=KNeighborsClassifier(algorithm='auto', leaf_size=30,
                                            metric='minkowski',
                                            metric_params=None, n_jobs=None,
                                            n_neighbors=5, p=2,
                                            weights='uniform'),
             iid='deprecated', n_jobs=None,
             param_grid=[{'n_neighbors': array([ 5,  6,  7,  8,  9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21,
       22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29])}],
             pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
             scoring='accuracy', verbose=0)
```

In [382]:
```
clf_gs.cv_results_
```

Out[382]:
```
{'mean_fit_time': array([0.00079999, 0.0006    , 0.00100021, 0.00100017, 0.00079999,
        0.0006    , 0.00080009, 0.00040002, 0.00040002, 0.00059996,
        0.00060005, 0.00039997, 0.00040007, 0.00080004, 0.00040002,
        0.0006001 , 0.0006    , 0.00099998, 0.00180016, 0.00100002,
        0.00060005, 0.00080004, 0.00040002, 0.00080009, 0.00100007]),
 'std_fit_time': array([3.99994861e-04, 4.89901382e-04, 9.53674316e-08, 1.50789149e-07,
        3.99994861e-04, 4.89901382e-04, 4.00042545e-04, 4.89920847e-04,
        4.89920847e-04, 4.89862441e-04, 4.89940316e-04, 4.89862441e-04,
        4.89979242e-04, 4.00018706e-04, 4.89920847e-04, 4.89979242e-04,
        4.89901382e-04, 9.53674316e-08, 1.60009861e-03, 1.16800773e-07,
        4.89940316e-04, 4.00018706e-04, 4.89920847e-04, 4.00042545e-04,
        1.16800773e-07]),
 'mean_score_time': array([0.00280023, 0.00220017, 0.00280004, 0.00220013, 0.00240011,
        0.00240016, 0.00200009, 0.00220013, 0.00240021, 0.00220017,
        0.00220017, 0.00240016, 0.00240011, 0.00220013, 0.00240021,
        0.00220003, 0.00240006, 0.0032002 , 0.00300007, 0.00420027,
        0.00260005, 0.00280018, 0.00240011, 0.00260015, 0.0032002 ]),
 'std_score_time': array([7.48455670e-04, 4.00042545e-04, 3.99971008e-04, 4.00066376e-04,
        4.89920847e-04, 4.89784582e-04, 1.50789149e-07, 4.00066404e-04,
        4.90037648e-04, 4.00161743e-04, 4.00042545e-04, 4.89881921e-04,
        4.89920871e-04, 4.00066404e-04, 4.89940339e-04, 4.00114074e-04,
        4.89862441e-04, 3.99994861e-04, 6.32485089e-04, 2.40013600e-03,
        4.89959789e-04, 4.00161772e-04, 4.89920847e-04, 4.89940316e-04,
        9.79783297e-04]),
 'param_n_neighbors': masked_array(data=[5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19,
                    20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29],
              mask=[False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False],
        fill_value='?',
             dtype=object),
 'params': [{'n_neighbors': 5},
```

```
{'n_neighbors': 6},
{'n_neighbors': 7},
{'n_neighbors': 8},
{'n_neighbors': 9},
{'n_neighbors': 10},
{'n_neighbors': 11},
{'n_neighbors': 12},
{'n_neighbors': 13},
{'n_neighbors': 14},
{'n_neighbors': 15},
{'n_neighbors': 16},
{'n_neighbors': 17},
{'n_neighbors': 18},
{'n_neighbors': 19},
{'n_neighbors': 20},
{'n_neighbors': 21},
{'n_neighbors': 22},
{'n_neighbors': 23},
{'n_neighbors': 24},
{'n_neighbors': 25},
{'n_neighbors': 26},
{'n_neighbors': 27},
{'n_neighbors': 28},
{'n_neighbors': 29}],
```

```
'split0_test_score': array([0.64, 0.64, 0.6 , 0.6 , 0.64, 0.64, 0.64, 0.64, 0.64, 0.6 , 0.6 ,
       0.76, 0.76, 0.72, 0.68, 0.76, 0.76, 0.76, 0.72, 0.72, 0.76, 0.76,
       0.76, 0.76, 0.76]),
'split1_test_score': array([0.72, 0.8 , 0.72, 0.8 , 0.76, 0.64, 0.68, 0.76, 0.72, 0.72, 0.76,
       0.8 , 0.8 , 0.8 , 0.8 , 0.8 , 0.8 , 0.84, 0.8 , 0.76, 0.8 , 0.84,
       0.8 , 0.76, 0.8 ]),
'split2_test_score': array([0.76, 0.8 , 0.76, 0.72, 0.76, 0.76, 0.76, 0.84, 0.8 , 0.84, 0.8 ,
       0.68, 0.68, 0.68, 0.76, 0.72, 0.72, 0.72, 0.72, 0.72, 0.72, 0.72,
       0.72, 0.72, 0.72]),
'split3_test_score': array([0.68, 0.76, 0.72, 0.76, 0.72, 0.76, 0.72, 0.72, 0.72, 0.64, 0.64,
       0.64, 0.64, 0.64, 0.64, 0.64, 0.64, 0.68, 0.64, 0.64, 0.64, 0.64,
       0.64, 0.64, 0.64]),
'split4_test_score': array([0.58333333, 0.625     , 0.54166667, 0.5       , 0.58333333,
       0.58333333, 0.58333333, 0.54166667, 0.66666667, 0.625     ,
       0.66666667, 0.70833333, 0.75      , 0.79166667, 0.75      ,
       0.75      , 0.75      , 0.75      , 0.75      , 0.75      ,
       0.66666667, 0.70833333, 0.625     , 0.70833333, 0.625     ]),
'mean_test_score': array([0.67666667, 0.725     , 0.66833333, 0.676     , 0.69266667,
       0.67666667, 0.67666667, 0.70033333, 0.70933333, 0.685     ,
       0.69333333, 0.71766667, 0.726     , 0.72633333, 0.726     ,
       0.734     , 0.734     , 0.75      , 0.726     , 0.718     ,
       0.71733333, 0.73366667, 0.709     , 0.71766667, 0.709     ]),
'std_test_score': array([0.06146363, 0.0770714 , 0.08301272, 0.1105622 , 0.07006029,
       0.07111806, 0.06146363, 0.10224372, 0.05491003, 0.08729261,
       0.07495184, 0.05676071, 0.05782733, 0.0621861 , 0.05782733,
       0.05351635, 0.05351635, 0.05291503, 0.052     , 0.04214262,
       0.05866667, 0.06573009, 0.06755738, 0.04406561, 0.06755738]),
'rank_test_score': array([21,  9, 25, 24, 19, 22, 22, 17, 14, 20, 18, 11,  6,  5,  6,  2,  2,
        1,  6, 10, 13,  4, 15, 11, 15], dtype=int32)}
```

In [383]:
```
# Лучшая модель
clf_gs.best_estimator_
```

Out[383]:
```
KNeighborsClassifier(algorithm='auto', leaf_size=30, metric='minkowski',
                     metric_params=None, n_jobs=None, n_neighbors=22, p=2,
                     weights='uniform')
```

In [384]:
```
# Лучшее значение метрики
clf_gs.best_score_
```

Out[384]:
```
0.7500000000000001
```

In [385]:
```
# Лучшее значение параметров
clf_gs.best_params_
```

Out[385]:
```
{'n_neighbors': 22}
```

Как видно, лучшее найденное значение гиперпараметра = 22. При этом гиперпараметре получено наилучшее значение метрики = 0.75