Введение в scikit-Learn

Александр Дьяконов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

east

Презентация писалась в спешке и дальше будет дорабатываться, описаны не все возможности пакета. Критику и замечания - присылать автору.

Что есть, кроме хороших алгоритмов...

Перемешивание

Раньше

Сейчас

```
rng = np.random.RandomState(0)
permutation = rng.permutation(len(X))
X, y = X[permutation], y[permutation]
from sklearn.utils import shuffle
X, y = shuffle(X, y)
```

Разбиение на обучение и контроль – одна строчка

```
from sklearn.cross_validation import train_test_split
train X, test X, train y, test y = train test split(X, y, train size=0.5, random state=1999)
```

Как работать с моделями...

1. Загружаем/создаём выборку

```
from sklearn.datasets import make_blobs
X, y = make_blobs(random_state=42)
```

2. Предобрабатываем

- 3. Обучаем модель: fit()
- 4. Запускаем на тесте: predict()

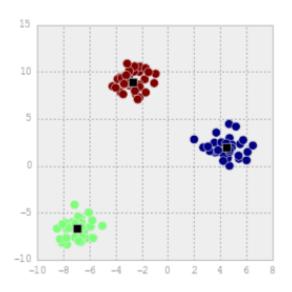
```
from sklearn.cluster import KMeans
kmeans = KMeans(n_clusters=3, random_state=42)
labels = kmeans.fit_predict(X)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=70)

mu = kmeans.cluster_centers_
plt.scatter(mu[:,0], mu[:,1], s=50, c='black', marker='s')
print(mu)
```

5. Оцениваем качество

```
from sklearn.metrics import confusion_matrix, accuracy_score
print(accuracy_score(y, labels))
print(confusion_matrix(y, labels))

from sklearn.metrics import adjusted_rand_score
adjusted_rand_score(y, labels)
```



```
0.0
[[ 0 0 34]
[33 0 0]
[ 0 33 0]]
```

Интерфейсы

У Scikit-learn единый способ использования всех методов. Для всех моделей (estimator object) доступны следующие методы.

```
model.fit() - настройка на данные (обучение) model.fit(X, y) - для обучения с учителем (supervised learning) model.fit(X) - для обучение без учителя (unsupervised learning)
```

model.predict	model.transform
Classification	Preprocessing
Regression	Dimensionality Reduction
Clustering	Feature Extraction
	Feature selection

Для обучения с учителем:

model.predict(X_test) - предсказать значения целевой переменной

model.predict_proba() - выдать «степень уверенности» в ответе (вероятность) - для некоторых моделей

model.decision_function() - решающая функция - для некоторых моделей

model.score() - в большинстве моделей встроены методы оценки их качества работы

model.transform() – для отбора признаков (feature selection) «сжимает» обучающую матрицу. Для регрессионных моделей и классификаторов (linear, RF и т.п.) выделяет наиболее информативные признаки

Для обучения без учителя

model.transform() - преобразует данные

model.fit_transform() — не во всех моделях — эффективная настройка и трансформация обучения

model.predict() - для кластеризации (не во всех моделях) - получить метки кластеров

model.predict_proba() - Gaussian mixture models (GMMs) получают вероятности принадлежности к компонентам для каждой точки

model.score() – некоторые модели (KDE, GMMs) получают правдободобие (насколько данные соответствуют модели)

Совет – для 2D-визуализации

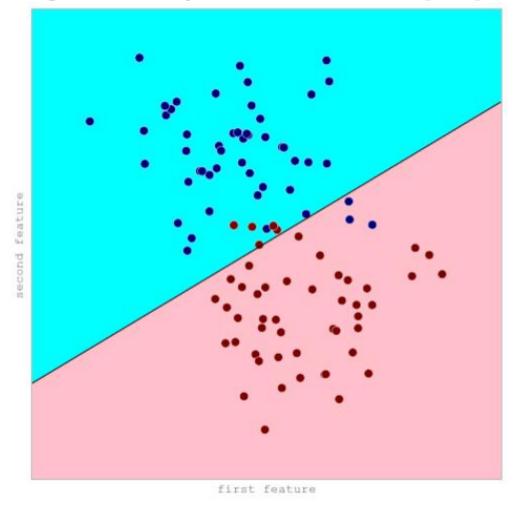
Напишите подобную функцию... (см. дальше результаты работы)

```
def plot 2d separator(classifier, X, fill=False, line=True, ax=None, eps=None):
    if eps is None:
        eps = 1.0 \ #X.std() / 2.
    x \min, x \max = X[:, 0].\min() - eps, X[:, 0].max() + eps
    y \min_{x \in X} y \max_{x \in X} = X[:, 1].\min() - eps_{x} X[:, 1].\max() + eps_{x}
    xx = np.linspace(x min, x max, 100)
    yy = np.linspace(y min, y max, 100)
    X1, X2 = np.meshgrid(xx, yy)
    X grid = np.c [X1.ravel(), X2.ravel()]
    try:
        decision values = classifier.decision function(X grid)
        levels = [0]
        fill levels = [decision values.min(), 0, decision values.max()]
    except AttributeError:
        # no decision function
        decision values = classifier.predict proba(X grid)[:, 1]
        levels = [.5]
        fill levels = [0, .5, 1]
    if ax is None:
        ax = plt.gca()
    if fill:
        ax.contourf(X1, X2, decision values.reshape(X1.shape),
                     levels=fill levels, colors=['cyan', 'pink'])
    if line:
        ax.contour(X1, X2, decision values.reshape(X1.shape), levels=levels,
                    colors="black")
    ax.set xlim(x min, x max)
    ax.set ylim(y min, y max)
    ax.set xticks(())
    ax.set yticks(())
```

Работа с моделями

```
# данные
from sklearn.datasets import make blobs
X, y = make blobs(centers=2, random state=0)
# разбивка: обучение - контроль
from sklearn.cross validation import train test split
X train, X test, y train, y test = train test split(X, y, random state=0)
# обучение модели и предсказание
from sklearn.linear model import LogisticRegression
classifier = LogisticRegression()
classifier.fit(X train, y train)
prediction = classifier.predict(X test)
# качество
                                                          0.92
print (np.mean(prediction == y test))
                                                          0.92
print (classifier.score(X test, y test)) # более
                                                          0.96
удобная функция
print (classifier.score(X train, y train))
# визуализация
plt.xlabel("first feature")
plt.ylabel("second feature")
plot 2d separator(classifier, X, fill=True)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=70)
from sklearn.metrics import confusion matrix
                                                          [[12
                                                                11
print (confusion matrix(y test, prediction))
                                                           [ 4
                                                                8]]
from sklearn.metrics import classification report
                                                                        precision
                                                                                     recall f1-score
                                                                                                         support
print(classification report(y test, prediction))
                                                                    0
                                                                            0.75
                                                                                      0.92
                                                                                                 0.83
                                                                                                             13
                                                                    1
                                                                                      0.67
                                                                                                 0.76
                                                                            0.89
                                                                                                             12
                                                          avg / total
                                                                            0.82
                                                                                      0.80
                                                                                                 0.80
                                                                                                             25
```

Работа с моделями Что получилось (логистическая регрессия)



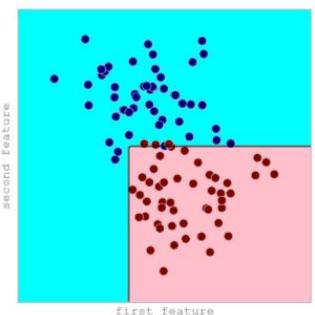
Чем отличаются алгоритмы

```
from sklearn.neighbors import
KNeighborsClassifier
knn = KNeighborsClassifier(n neighbors=1)
knn.fit(X train, y train)
print (knn)
print (knn.score(X test, y test))
KNeighborsClassifier(algorithm='auto',
leaf size=30, metric='minkowski',
           metric params=None,
n neighbors=1, p=2, weights='uniform')
0.92
```

```
from sklearn.tree import
DecisionTreeClassifier
tree = DecisionTreeClassifier(max depth=10)
tree.fit(X train, y train)
print (tree)
print (tree.score(X test, y test))
DecisionTreeClassifier(class weight=None,
criterion='gini', max depth=10,
            max features=None,
max leaf nodes=None, min samples leaf=1,
            min samples split=2,
min weight fraction leaf=0.0,
            random state=None,
```

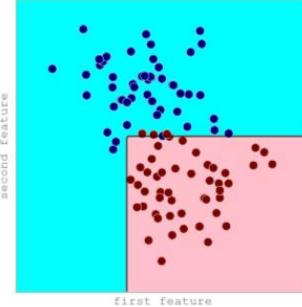
splitter='best')

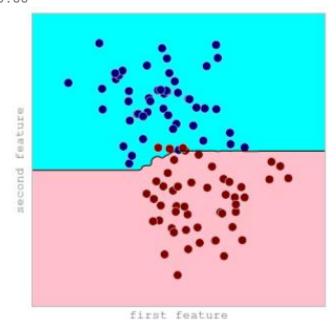
0.88



```
from sklearn.ensemble import
RandomForestClassifier
```

```
RandomForestClassifier(n estimators=100)
rf.fit(X train, y train)
RandomForestClassifier(bootstrap=True,
class weight=None, criterion='gini',
            max depth=None,
max features='auto', max leaf nodes=None,
            min samples leaf=1,
min samples split=2,
            min weight fraction leaf=0.0,
n estimators=100, n jobs=1,
            oob score=False,
random state=None, verbose=0,
            warm start=False)
0.88
```





Вопрос: Что подозрительного в kNN?

first feature

feature

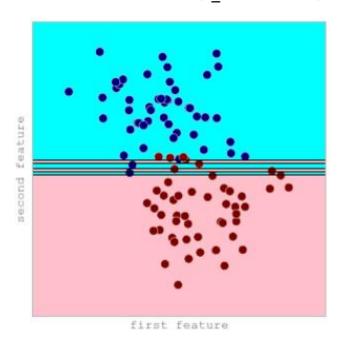
Параметры алгоритмов

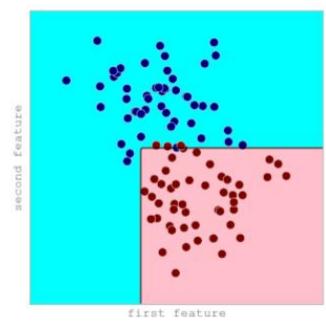
Каждый алгоритм имеет кучу параметров...

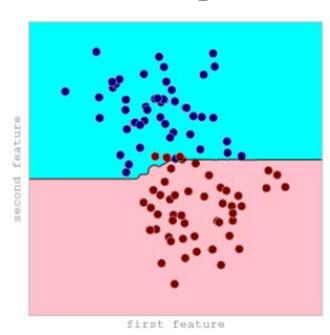
RandomForestClassifier(n estimators=1)

RandomForestClassifier(n_estimators=5)

RandomForestClassifier(n_estimators=100)



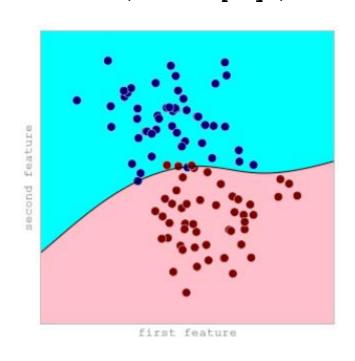


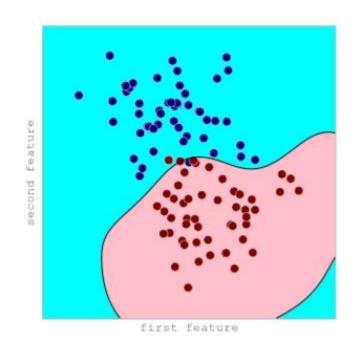


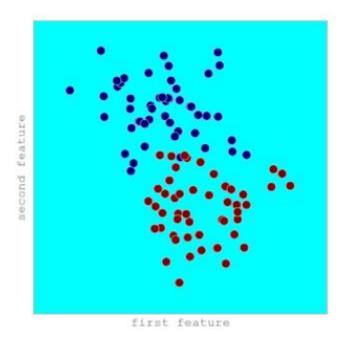
Параметры алгоритмов Некоторые параметры очень существенные











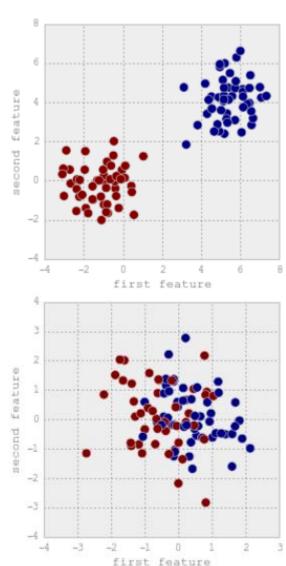
Какое ядро не изображено? Как быть с сигмоидой?

Встроенные датасеты

```
from sklearn.datasets import make_blobs
X, y = make_blobs(centers=2)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
plt.xlabel("first feature")
plt.ylabel("second feature")
```

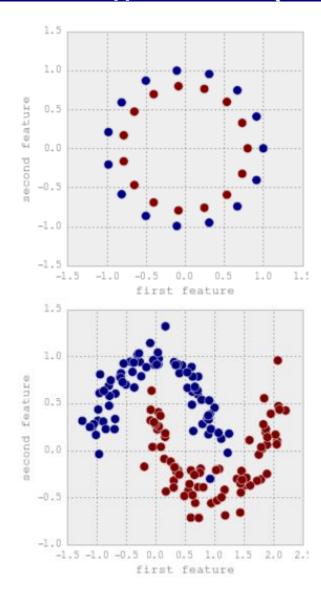
```
from sklearn.datasets import
make_classification

X, y = make_classification(100)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
plt.xlabel("first feature")
plt.ylabel("second feature")
```



```
from sklearn.datasets import make_circles
X, y = make_circles(30)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
plt.xlabel("first feature")
plt.ylabel("second feature")
```

```
from sklearn.datasets import make_moons
X, y = make_moons(150, noise=0.15)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, s=75)
plt.xlabel("first feature")
plt.ylabel("second feature")
```



Есть много и других (регрессия, sparse-матрицы и т.п.)

Разбиения выборок: cross_validation

Зачем нужны разбиения

```
from sklearn.cross validation import
                                             sklearn.cross validation.StratifiedKFold(labels=[1
                                             1 2 2 2 2 3 3 3 3 3], n folds=2, shuffle=False,
StratifiedKFold
                                             random state=None)
# когда дисбаланс классов
                                             индексы теста = [0 \ 2 \ 3 \ 6 \ 7 \ 8]
                                             классы теста = [1 2 2 3 3 3]
y = np.array([1,1,2,2,2,2,3,3,3,3,3,3,3])
cv = StratifiedKFold(y, n folds=2)
                                             индексы теста = [1 \ 4 \ 5 \ 9 \ 10 \ 11]
print(cv)
                                             классы теста = [1 2 2 3 3 3]
for train, test in cv:
    print('индексы теста = ' + str(test))
    print('классы теста = ' +
str(y[test]))
```

Какие бывают разбиения

```
from sklearn.cross validation import KFold
                                             индексы теста = [0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5]
for train, test in KFold(12,2):
                                             классы теста = [1 1 2 2 2 2]
   print('индексы теста = ' + str(test))
                                             индексы теста = [ 6 7 8 9 10 11]
                                             классы теста = [3 3 3 3 3 3]
   print('классы теста = ' + str(y[test]))
from sklearn.cross validation import
                                             индексы теста = [0]
LeaveOneOut # KFold(n, n folds=n)
                                             классы теста = [1]
for train, test in LeaveOneOut(12):
                                             индексы теста = [1]
   print('индексы теста = ' + str(test))
                                             классы теста = [1]
   print('классы теста = ' + str(y[test]))
                                             индексы теста = [2]

классы теста = [2]

from sklearn.cross validation import LeavePOut индексы теста = [0 1 2]
for train, test in LeavePOut(12,3):
                                             классы теста = [1 1 2]
   print('индексы теста = ' + str(test))
                                             индексы теста = [0 \ 1 \ 3]
   print('классы теста = ' + str(y[test]))
                                             индексы теста = [0 \ 1 \ 4]
from sklearn.cross validation import
                                             индексы теста = [11 	 0]
ShuffleSplit
                                             for train, test in ShuffleSplit(12, 3):
                                             индексы теста = [2 \ 4]
   print('индексы теста = ' + str(test))
                                             print('классы теста = ' + str(y[test]))
                                             индексы теста = [0\ 1]
```

Ещё в cross_validation

cross_validation.train_test_split- от матрицы
cross_validation.cross_val_score - оценка с помощью CV (см. ниже)
cross_validation.cross_val_predict - формирование сv-метапризнаков

Оценка модели

```
from sklearn.cross_validation import cross_val_score array([0.85, 1. , 0.9 , 0.95, 1. ])
from sklearn.cross_validation import ShuffleSplit

cv = ShuffleSplit(len(y), n_iter=5, test_size=.2)
cross val score(logreg, X, y, cv=cv)
```

У этих функций много параметров... Они (функции) «понимают» друг друга Пока не указываем скорер – используется встроенный (в модель)

Скореры в оценке модели

```
from sklearn.metrics.scorer import SCORERS

dict

# какие скореры есть
print(SCORERS.keys())

# пишем свой скорер
def my_accuracy_scoring(est, X, y):
    return np.mean(est.predict(X) == y)

cross_val_score(knn, X, y,
scoring=my_accuracy_scoring, cv=5)

'fl_weighter
'precision
'precis
```

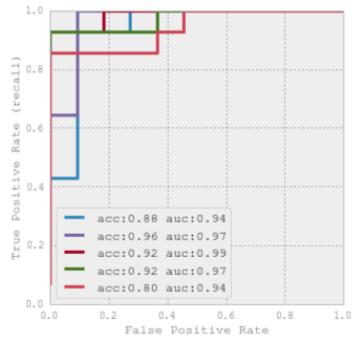
Есть много скореров Можно написать свой

KayectBo: metrics

```
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score

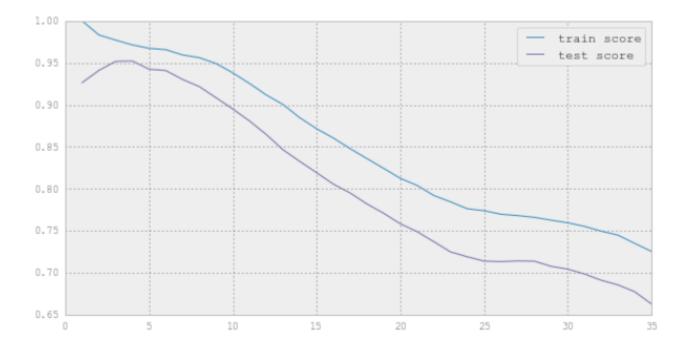
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)

for gamma in [.01, .05, 1, 2, 5]:
    plt.xlabel("False Positive Rate")
    plt.ylabel("True Positive Rate (recall)")
    svm = SVC(gamma=gamma).fit(X_train, y_train)
    decision_function = svm.decision_function(X_test)
    fpr, tpr, _ = roc_curve(y_test, decision_function)
    acc = svm.score(X_test, y_test)
    auc = roc_auc_score(y_test, svm.decision_function(X_test))
    plt.plot(fpr, tpr, label="acc:%.2f auc:%.2f" % (acc, auc), linewidth=3)
    plt.legend(loc="best")
```

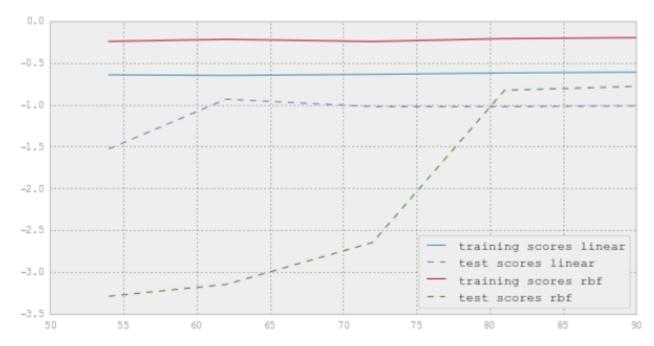


Есть ещё много метрик...

Выбор параметров модели: learning_curve.validation_curve



Выбор параметров модели: learning_curve.validation_curve



Выбор параметров модели: learning_curve.validation_curve

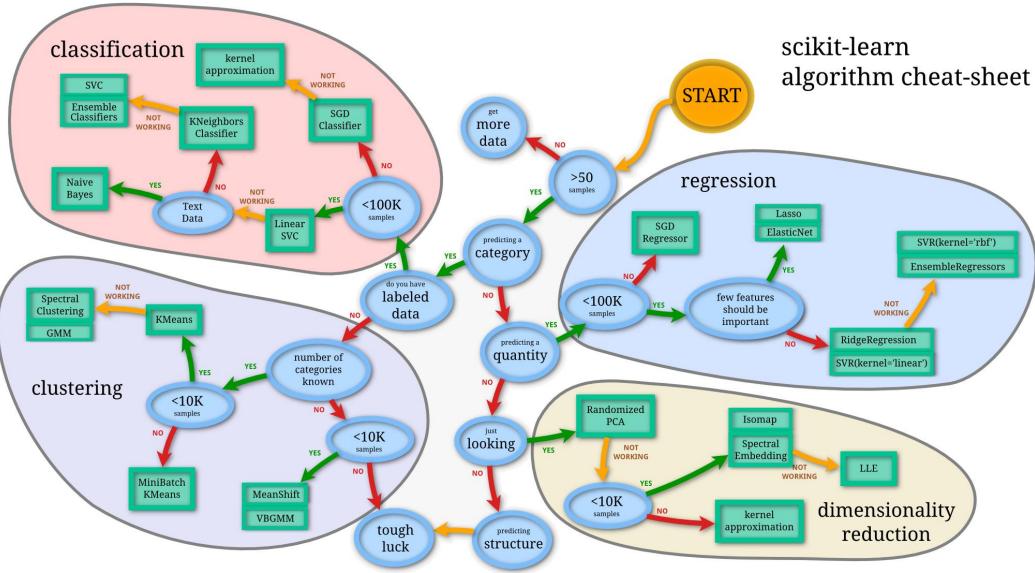
```
from sklearn.grid search import GridSearchCV
from sklearn.svm import SVR
param grid = {'C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10], 'gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1]}
cv = KFold(n=len(X), n folds=5, shuffle=True)
grid = GridSearchCV(SVR(), param grid=param grid, cv=cv, verbose=3)
grid.fit(X, y)
Fitting 5 folds for each of 20 candidates, totalling 100 fits
[CV] gamma=0.001, C=0.001 ......
[CV] ..... gamma=0.001, C=0.001, score=-0.076544 - 0.0s
[CV] ..... gamma=0.001, C=0.001, score=-0.001319 - 0.0s
print(grid.best score )
print(grid.best params )
print(grid.score(X test, y test))
0.958154154548
{'qamma': 1, 'C': 10}
0.963548256612
```

Последовательность операторов: pipeline

```
from sklearn.pipeline import make_pipeline
pipeline = make_pipeline(TfidfVectorizer(), LogisticRegression())
pipeline.fit(text_train, y_train)
pipeline.score(text_test, y_test)
0.5
```

Оптимизация параметров

Выбор алгоритма (модели)



Предобработка данных: preprocessing Нормировка данных

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(X)
X scaled = scaler.transform(X)
                                      Перенумерация
f = ['a', 'bb', 20, 'bb', 'a', 'a']
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
encoder = LabelEncoder()
encoder.fit(f)
encoder.transform(f)
array([1, 2, 0, 2, 1, 1], dtype=int64)
                            Характеристическая матрица
f = ['a', 'bb', 'c', 'bb', 'a', 'a']
from sklearn.preprocessing import LabelBinarizer
encoder = LabelBinarizer()
encoder.fit(f)
encoder.transform(f)
array([[1, 0, 0],
```

[0, 1, 0], [0, 0, 1], [0, 1, 0], [1, 0, 0], [1, 0, 0]])

Предобработка данных: preprocessing

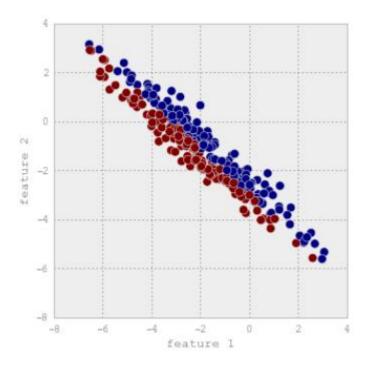
Характеристическая матрица для группы вещественных признаков

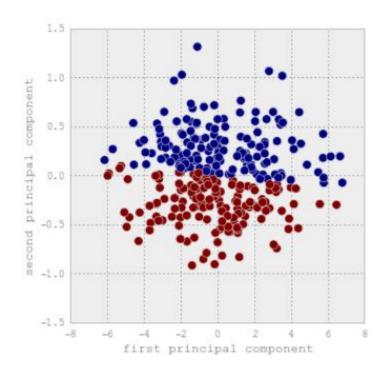
Полиномиальные признаки

Декомпозиции матриц: decomposition

Приведём лишь пример с SVD (есть ещё ICA, NMF и т.п.)

```
from sklearn.decomposition import PCA
pca = PCA()
pca.fit(X_blob)
X_pca = pca.transform(X_blob)
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], c=y, linewidths=0, s=70)
plt.xlabel("first principal component")
plt.ylabel("second principal component")
```





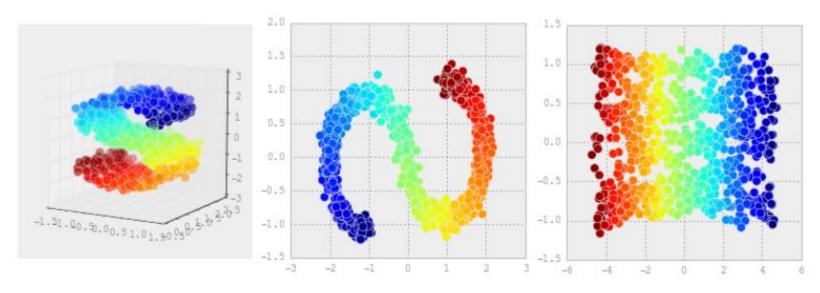
Сокращение размерности

```
from sklearn.datasets import make_s_curve
X, y = make_s_curve(n_samples=1000, noise=0.1)

from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
ax = plt.axes(projection='3d')
ax.scatter3D(X[:, 0], X[:, 1], X[:, 2], c=y, s=70)
ax.view_init(10, -60)

X_pca = PCA(n_components=2).fit_transform(X)
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], c=y, s=70)

from sklearn.manifold import Isomap
iso = Isomap(n_neighbors=15, n_components=2)
X_iso = iso.fit_transform(X)
plt.scatter(X_iso[:, 0], X_iso[:, 1], c=y, s=70)
```



Работа с текстами

Как всегда – всё просто...

```
from sklearn.feature_extraction.text import TfidfVectorizer
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

vectorizer = TfidfVectorizer()
vectorizer.fit(text_train)

X_train = vectorizer.transform(text_train)
X_test = vectorizer.transform(text_test)

clf = LogisticRegression()
clf.fit(X_train, y_train)

clf.score(X_test, y_test)
```

Работа с текстами: чуть подробнее

```
X = ["Some say the world will end in fire,",
     "Some say in ice."]
from sklearn.feature extraction.text import CountVectorizer
vectorizer = CountVectorizer()
vectorizer.fit(X)
vectorizer.vocabulary
{ 'end': 0,
 'fire': 1,
 'ice': 2,
 'in': 3,
 'say': 4,
 'some': 5,
 'the': 6,
 'will': 7,
 'world': 8}
X bag of words = vectorizer.transform(X) # sparse-матрица
X bag of words.toarray()
array([[1, 1, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1],
       [0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0]], dtype=int64)
vectorizer.get feature names()
['end', 'fire', 'ice', 'in', 'say', 'some', 'the', 'will', 'world']
vectorizer.inverse transform(X bag of words)
[array(['end', 'fire', 'in', 'say', 'some', 'the', 'will', 'world'],
       dtype='<U5'), array(['ice', 'in', 'say', 'some'],</pre>
       dtvpe='<U5')1
```

```
from sklearn.feature extraction.text import TfidfVectorizer
tfidf vectorizer = TfidfVectorizer() # другой "векторайзер"!
tfidf vectorizer.fit(X)
TfidfVectorizer(analyzer='word', binary=False, decode error='strict',
       dtype=<class 'numpy.int64'>, encoding='utf-8', input='content',
       lowercase=True, max df=1.0, max features=None, min df=1,
       ngram range=(1, 1), norm='12', preprocessor=None, smooth idf=True,
       stop words=None, strip accents=None, sublinear tf=False,
       token pattern='(?u)\\b\\w\\w+\\b', tokenizer=None, use idf=True,
       vocabulary=None)
print(tfidf vectorizer.transform(X).toarray())
[0. 0. 0.63 0.45 0.45 0.45 0. 0. 0. 1]
bigram vectorizer = CountVectorizer(ngram range=(1, 2)) # от какого до какого ранга
bigram vectorizer.fit(X)
CountVectorizer(analyzer='word', binary=False, decode error='strict',
       dtype=<class 'numpy.int64'>, encoding='utf-8', input='content',
       lowercase=True, max df=1.0, max features=None, min df=1,
       ngram range=(1, 2), preprocessor=None, stop words=None,
       strip accents=None, token pattern='(?u)\\b\\w\\w+\\b',
       tokenizer=None, vocabulary=None)
bigram vectorizer.get feature names()
['end',
 'end in',
'world will'
bigram vectorizer.transform(X).toarray()
 array([[1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1],
      [0, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]], dtype=int64)
```

Модели для sparse-матриц

```
linear_model.Ridge()
linear_model.Lasso()
linear_model.ElasticNet()
linear_model.LinearRegression()
linear_model.Perceptron()
linear_model.PassiveAggressiveRegressor()
linear_model.PassiveAggressiveClassifier()
linear_model.SGDRegressor()
linear_model.SGDClassifier()
svm.SVR()
svm.NuSVR()
naive_bayes.MultinomialNB()
naive_bayes.BernoulliNB()
neighbors.KNeighborsRegressor()
```

На вход можно подавать разреженную матрицу – всё работает (не во всех моделях быстро на больших матрицах).

Ссылки

В данной презентации много примеров взято из ноутбука

https://github.com/amueller/scipy_2015_sklearn_tutorial/tree/master/notebooks

Спасибо Андреасу Мюллеру!

Инструкции по настройке конкретных моделей – в слайдах курсов АМА и ПЗАД.

Ссылка на презентацию дана в блоге автора https://alexanderdyakonov.wordpress.com/