Инструмент Pipeline в sklearn

In [1]:
```
import pandas as pd
import numpy as np
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt

from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

%matplotlib inline
```

Данные

Датасет состоит из 11 химических признаков вина и таргет-переменная --- качество вина.

In [2]:
```
winedf = pd.read_csv('https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine-quality/winequality
winedf.head()
```

Out[2]:

	fixed acidity	volatile acidity	citric acid	residual sugar	chlorides	free sulfur dioxide	total sulfur dioxide	density	pH	sulphates	alcohol	quality
0	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9.4	5
1	7.8	0.88	0.00	2.6	0.098	25.0	67.0	0.9968	3.20	0.68	9.8	5
2	7.8	0.76	0.04	2.3	0.092	15.0	54.0	0.9970	3.26	0.65	9.8	5
3	11.2	0.28	0.56	1.9	0.075	17.0	60.0	0.9980	3.16	0.58	9.8	6
4	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9.4	5

Посмотрим, есть ли пропущенные значения

In [3]:
```
1 winedf.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 1599 entries, 0 to 1598
Data columns (total 12 columns):
fixed acidity           1599 non-null float64
volatile acidity        1599 non-null float64
citric acid             1599 non-null float64
residual sugar          1599 non-null float64
chlorides               1599 non-null float64
free sulfur dioxide     1599 non-null float64
total sulfur dioxide    1599 non-null float64
density                 1599 non-null float64
pH                      1599 non-null float64
sulphates               1599 non-null float64
alcohol                 1599 non-null float64
quality                 1599 non-null int64
dtypes: float64(11), int64(1)
memory usage: 150.0 KB
```

Можно и так

In [4]:
```
1 winedf['quality'].isnull().sum()
```

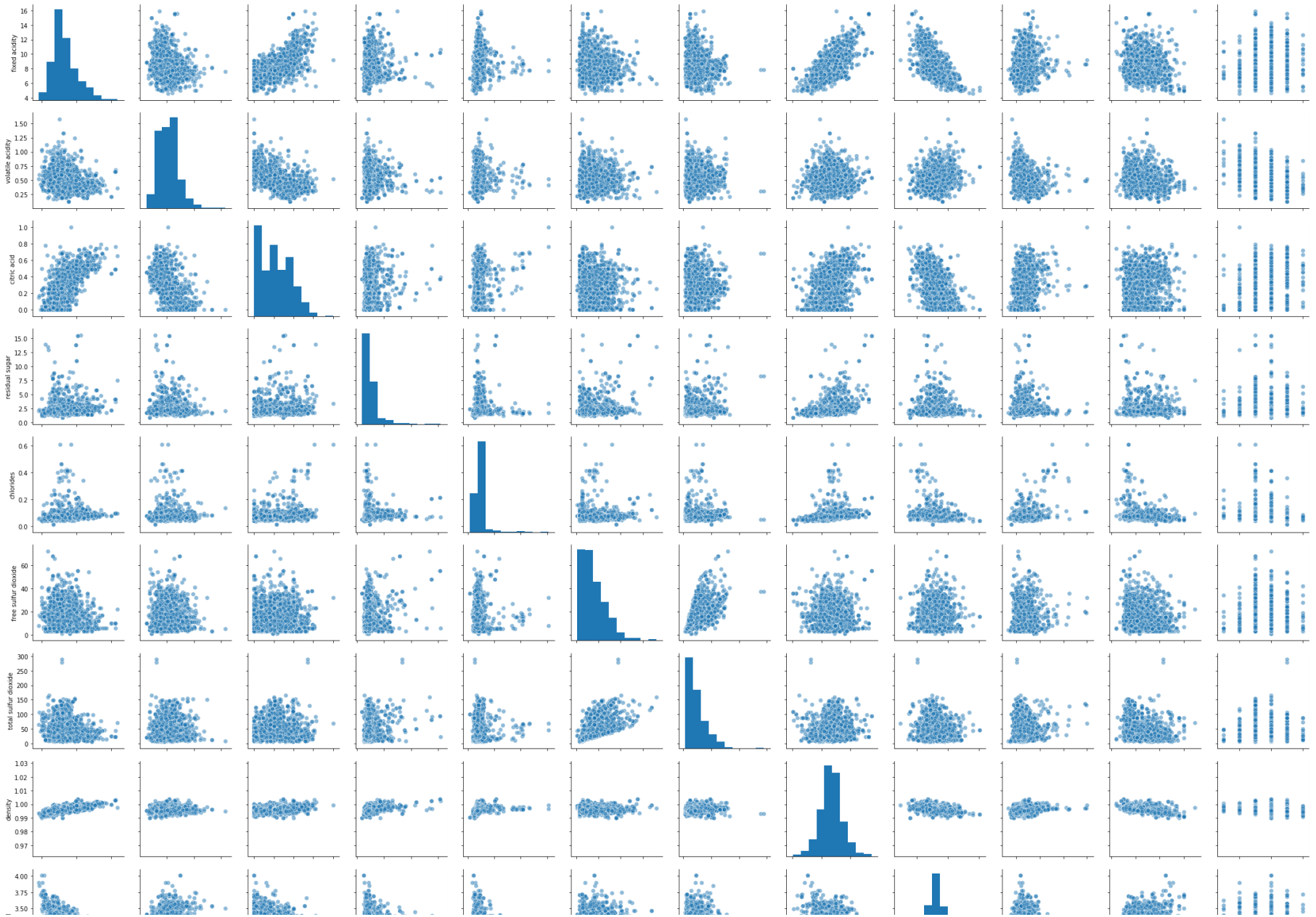
Out[4]:
```
0
```

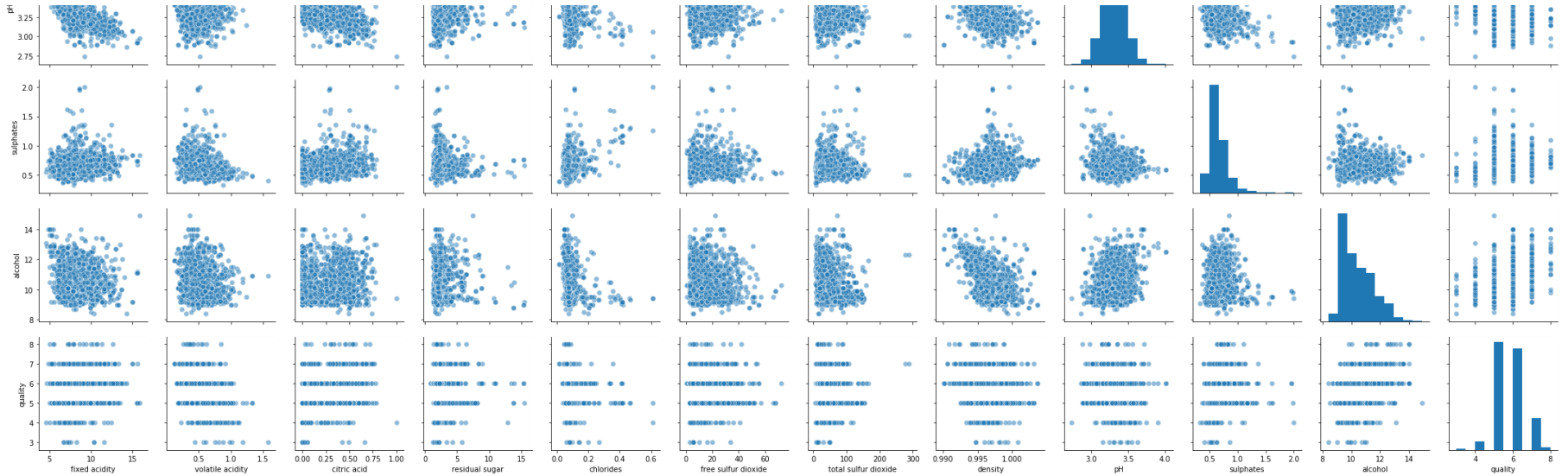
Попарные графики

In [5]:

```
1 plt.figure(figsize=(15, 30))
2 sns.pairplot(winedf, plot_kws=dict(s=50, alpha=0.5));
```

```
<Figure size 1080x2160 with 0 Axes>
```





Разделим на X и Y

In [6]:
```
X = winedf.drop(['quality'],axis=1)
Y = winedf['quality']

# y is a pandas series
print(type(X), type(Y))
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'> <class 'pandas.core.series.Series'>
```

Пайплайн

Импортим класс классификатора, который будем использовать далее, scaler и класс `Pipline` .
Кроме `StandardScaler в sklearn` есть еще набор классов для масштабирования:

- `MinMaxScaler`
- `MaxAbsScaler`
- `StandardScaler`
- `RobustScaler`
- `Normalizer`
- `QuantileTransformer`

- PowerTransformer

In [7]:
```
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
```

Создаем `Pipeline` . Сначала в данном случае применяем scaler, а потом логистическую регрессию.

In [8]:
```
steps = [
    ('scaler', StandardScaler()),
    ('clf', LogisticRegression(solver='saga',
                               multi_class='multinomial',
                               max_iter=5000))
]

pipeline = Pipeline(steps)
```

Разделим выборку на train и test. Перед этим посмотрим на распределение классов у target-переменной

In [9]:
```
winedf['quality'].value_counts()
```

Out[9]:
```
5    681
6    638
7    199
4     53
8     18
3     10
Name: quality, dtype: int64
```

Распределение классов очень несбалансированное. Поэтому будем использовать стратификацию при разделении на test и train: то есть сделаем разбиение данных так, чтобы распределение классов примерно сохранилось.

In [10]:
```
X_train, X_test, Y_train, Y_test \
    = train_test_split(X, Y, test_size=0.2, random_state=30, stratify=Y)
```

На самом деле уже здесь мы можем обучить созданный ранее Pipeline на обучающей выборке и предсказать на тестовой.

Обучаем

In [11]:
```
pipeline.fit(X_train, Y_train)
```

Out[11]:
```
Pipeline(memory=None,
         steps=[('scaler',
                 StandardScaler(copy=True, with_mean=True, with_std=True)),
                ('clf',
                 LogisticRegression(C=1.0, class_weight=None, dual=False,
                                    fit_intercept=True, intercept_scaling=1,
                                    l1_ratio=None, max_iter=5000,
                                    multi_class='multinomial', n_jobs=None,
                                    penalty='l2', random_state=None,
                                    solver='saga', tol=0.0001, verbose=0,
                                    warm_start=False))],
         verbose=False)
```

Предсказываем и посмотрим на score, который получается на данных предсказаниях. В качестве скора pipeline берет метрику, которую минимизирует последний классификатор.

In [12]:
```
prediction = pipeline.predict(X_test)
pipeline.score(X_test, Y_test)
```

Out[12]:
```
0.584375
```

Пайплайн и подбор гиперпараметров

Мы хотим подобрать оптимальные параметры у классификатора. У логистической регрессии обычно оптимизируют `penalty` и `C`.

In [13]:
```
parameteres = {'clf__penalty': ['l1', 'l2'],
               'clf__C': [0.01, 0.1, 1, 10, 100]}
```

Теперь создадим объект сетку `GridSearchCV`, которой передадим модель `pipline` и скажем, что будем использовать кросс-валидацию на 5 фолдов

In [14]:
```
grid = GridSearchCV(pipeline, param_grid=parameteres, cv=5)
```

Полученное обучим на обучающей выборке.

In [15]:
```
%%time
grid.fit(X_train, Y_train)
```

```
CPU times: user 19.4 s, sys: 1.61 ms, total: 19.4 s
Wall time: 19.4 s
```

Out[15]:
```
GridSearchCV(cv=5, error_score='raise-deprecating',
             estimator=Pipeline(memory=None,
                                steps=[('scaler',
                                        StandardScaler(copy=True,
                                                       with_mean=True,
                                                       with_std=True)),
                                       ('clf',
                                        LogisticRegression(C=1.0,
                                                           class_weight=None,
                                                           dual=False,
                                                           fit_intercept=True,
                                                           intercept_scaling=1,
                                                           l1_ratio=None,
                                                           max_iter=5000,
                                                           multi_class='multinomial',
                                                           n_jobs=None,
                                                           penalty='l2',
                                                           random_state=None,
                                                           solver='saga',
                                                           tol=0.0001,
                                                           verbose=0,
                                                           warm_start=False))],
                                verbose=False),
             iid='warn', n_jobs=None,
             param_grid={'clf__C': [0.01, 0.1, 1, 10, 100],
                         'clf__penalty': ['l1', 'l2']},
             pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
             scoring=None, verbose=0)
```

И посмотрим на оптимальные параметры

In [16]:
```
print("score = %3.2f" % (grid.score(X_test, Y_test)))
print(grid.best_params_)
```

```
score = 0.58
{'clf__C': 0.1, 'clf__penalty': 'l2'}
```

Зачем это вообще нужно?

1). Обеспечивает соблюдение определенного порядка выполнения операций, что способствует воспроизводимости и созданию удобного рабочего процесса.

2). Собираем несколько шагов, которые кросс-валидируем вместе выбирая разные параметры. Можно рассматривать параметры с разных шагов используя их имена и название параметра, разделенные " `__` " (Например, " `clf__gamma` ").

3). Применять сначала scaler ко всем данным, а после этого на полученном вызывать gridSearch не совсем корректно. gridSearch на каждом этапе разбивает на train и validate, обучает на train и смотрит результат на validate. Однако в таком случае, train знает что-то о validate, ведь мы до этого применили scaler ко всем данным. Так плохо, по хорошему мы не должны видеть validate до тех пор пока не собирёмся измерять качество модели на нем.