Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана Факультет «Информатика и системы управления» Кафедра «Системы обработки информации и управления» Дисциплина «Технологии машинного обучения»

Отчёт

по лабораторной работе №4

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

Студент:

Калин РТ5-61

Преподаватель:

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 К с использованием GridSearchCV и кроссвалидации.

Выполнение работы:

Выбранный датасет:

Решение задачи классификации

load_wine([return_X_y])

Load and return the wine dataset (classification).

https://scikit-

<u>learn.org/stable/modules/generated/sklearn.datasets.load_wine.html#sklearn.datasets.load_wine</u>

1. Изучение качества классификации

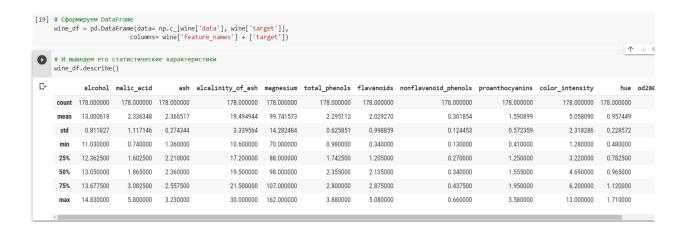
```
▲ Lab4.ipynb ☆
 File Edit View Insert Runtime Tools Help All changes saved
+ Code + Text
 [ ] import numpy as np
     import pandas as pd
     from typing import Dict, Tuple
     from scipy import stats
     from sklearn.datasets import load_wine, load_diabetes
     from sklearn.model selection import train test split
     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")
```

1.1. Подготовка данных и построение базовых моделей для оценки качества

```
[ ] wine = load wine()
[ ] # Наименования признаков
     wine.feature names
['alcohol',
      'malic_acid',
      'ash',
      'alcalinity of ash',
      'magnesium',
      'total_phenols',
      'flavanoids',
      'nonflavanoid phenols',
      'proanthocyanins',
      'color_intensity',
      'hue',
      'od280/od315_of_diluted_wines',
      'proline']
```

```
[ ] # Значения признаков
   wine.data[:5]
□→ array([[1.423e+01, 1.710e+00, 2.430e+00, 1.560e+01, 1.270e+02, 2.800e+00,
         3.060e+00, 2.800e-01, 2.290e+00, 5.640e+00, 1.040e+00, 3.920e+00,
        [1.320e+01, 1.780e+00, 2.140e+00, 1.120e+01, 1.000e+02, 2.650e+00,
        2.760e+00, 2.600e-01, 1.280e+00, 4.380e+00, 1.050e+00, 3.400e+00,
        1.050e+03],
        [1.316e+01, 2.360e+00, 2.670e+00, 1.860e+01, 1.010e+02, 2.800e+00,
        3.240e+00, 3.000e-01, 2.810e+00, 5.680e+00, 1.030e+00, 3.170e+00,
        1.185e+03],
        [1.4376+01, 1.950e+00, 2.500e+00, 1.680e+01, 1.130e+02, 3.850e+00, 3.490e+00, 2.400e-01, 2.180e+00, 7.800e+00, 8.600e-01, 3.450e+00,
        1.480e+03],
        [1.324e+01, 2.590e+00, 2.870e+00, 2.100e+01, 1.180e+02, 2.800e+00,
        2.690e+00, 3.900e-01, 1.820e+00, 4.320e+00, 1.040e+00, 2.930e+00,
        7.350e+02]])
[ ] type(wine.data)
□→ numpy.ndarray
[ ] # Значения целевого признака
   np.unique(wine.target)
□ array([0, 1, 2])
[] # Наименования значений целевого признака
    wine.target_names
 □→ array(['class_0', 'class_1', 'class_2'], dtype='<U7')</pre>
[16] list(zip(np.unique(wine.target), wine.target_names))
 [ (0, 'class_0'), (1, 'class_1'), (2, 'class_2')]
[17] # Значения целевого признака
    wine.target
 2, 2])
[18] # Размер выборки
    wine.data.shape, wine.target.shape
```

Формируем DataFrame:



1.2. Разделение выборки на обучающую и тестовую

```
[21] wine_X_train, wine_X_test, wine_y_train, wine_y_test = train_test_split wine.data, wine.target, test_size=0.5, random_state=1)

[22] # Размер обучающей выборки wine_X_train.shape, wine_y_train.shape

[→ ((89, 13), (89,))

[23] # Размер тестовой выборки wine_X_test.shape, wine_y_test.shape

[→ ((89, 13), (89,))

[24] np.unique(wine_y_train)

[→ array([0, 1, 2])

• np.unique(wine_y_test)

[→ array([0, 1, 2])
```

1.3. Построим базовые модели на основе метода ближайших соседей

```
    # 10 ближайших соседей cl1_2 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=10) cl1_2.fit(wine_X_train, wine_y_train) target1_2 = cl1_2.predict(wine_X_test) len(target1_2), target1_2
    □ (89, array([1, 1, 2, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 2, 0, 2, 1, 0, 0, 0, 2, 1, 2, 1, 0, 2, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 2, 0, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 2, 2, 1, 0, 1, 0, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 2, 1, 0, 2, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1]))
```

2. Метрики качества классификации

2.1. Accuracy

```
[34] # 3 ближайших соседа accuracy_score(wine_y_test, target1_1)
```

C→ 0.6966292134831461

```
# 10 ближайших соседей accuracy_score(wine_y_test, target1_2)
```

C→ 0.6629213483146067

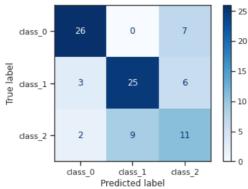
Точность в случае 10 ближайших соседей составляет более 66%, а точность в случае 2 ближайших соседей составляет более 69%.

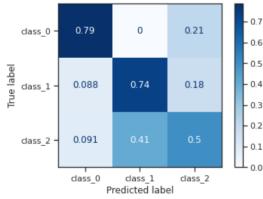
```
def accuracy_score_for_classes(
       y_true: np.ndarray,
        y_pred: np.ndarray) -> Dict[int, float]:
       # Для удобства фильтрации сформируем Pandas DataFrame d = {'t': y_true, 'p': y_pred}
       df = pd.DataFrame(data=d)
       # Метки классов
       classes = np.unique(y_true)
        # Результирующий словарь
       res = dict()
        # Перебор меток классов
        for c in classes:
                                                              def print_accuracy_score_for_classes(
           # отфильтруем данные, которые соответствуют
                                                                 y_true: np.ndarray,
           # текущей метке класса в истинных значениях
                                                                 y_pred: np.ndarray):
           temp_data_flt = df[df['t']==c]
           # расчет ассuracy для заданной метки класса
                                                                 Вывод метрики accuracy для каждого класса
           temp_acc = accuracy_score(
              temp_data_flt['t'].values,
                                                                 accs = accuracy_score_for_classes(y_true, y_pred)
              temp_data_flt['p'].values)
                                                                 if len(accs)>0:
           # сохранение результата в словарь
                                                                    print('Метка \t Accuracy')
           res[c] = temp_acc
                                                                 for i in accs:
       return res
                                                                    print('{} \t {}'.format(i, accs[i]))
[46] # 3 ближайших соседа
     print_accuracy_score_for_classes(wine_y_test, target1_1)
 [→ Метка
              Accuracy
              0.7878787878787878
              0.7352941176470589
     1
    # 10 ближайших соседей
     print_accuracy_score_for_classes(wine_y_test, target1_2)
 [→ Метка
            Accuracy
              0.7878787878787878
     0
     1
              0.8235294117647058
              0.22727272727272727
     # 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
      # Если целевой признак ==2,
      # то будем считать этот случай 1 в бинарном признаке
      bin_wine_y_test = convert_target_to_binary(wine_y_test, 2)
      # Конвертация предсказанных признаков
      bin_target1_1 = convert_target_to_binary(target1_1, 2)
      bin_target1_2 = convert_target_to_binary(target1_2, 2)
[51] balanced_accuracy_score(bin_wine_y_test, bin_target1_1)
    0.6529850746268657
      balanced_accuracy_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2)
 0.5390094979647219
```

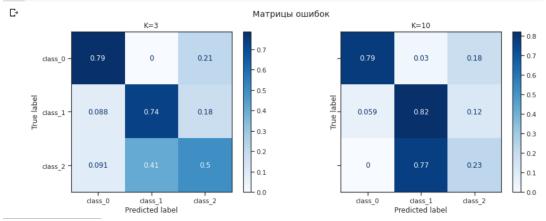
2.2. Матрица ошибок или ConfusionMatrix

```
[57] # Пример для небинарной классификации confusion_matrix(wine_y_test, target1_1, labels=[0, 1, 2])
```

<sklearn.metrics._plot.confusion_matrix.ConfusionMatrixDisplay at 0x7f45b4cd9cc0>







2.3. Precision, recall и F-мера

```
[61] # 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)
```

- (0.458333333333333, 0.5)
- [62] # Для 10 ближайших соседей precision_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2), recall_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2)
- [63] # Параметры TP, TN, FP, FN считаются как сумма по всем классам precision_score(wine_y_test, target1_1, average='micro')

```
[64] # 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')
```

0.6774457094665824

```
# 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')
```

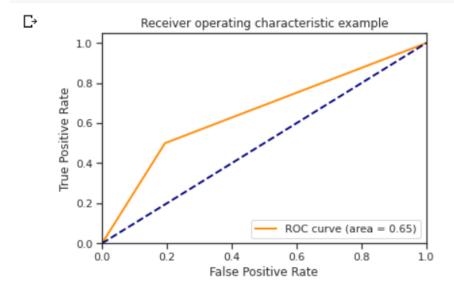
0.7051769964963152

```
[66] f1_score(bin_wine_y_test, bin_target1_2)
      0.27027027027027023
[67] f1_score(wine_y_test, target1_1, average='micro')
 C→ 0.6966292134831461
[68] f1_score(wine_y_test, target1_1, average='macro')
 C→ 0.6753516624040921
[69] f1_score(wine_y_test, target1_1, average='weighted')
 C→ 0.7003847093307279
   classification_report(wine_y_test, target1_1,
                         target_names=wine.target_names, output_dict=True)
('accuracy': 0.6966292134831461,
     'class_0': {'f1-score': 0.8125,
      'precision': 0.8387096774193549,
      'recall': 0.7878787878787878,
      'support': 33},
     'class 1': {'f1-score': 0.735294117647059,
      'precision': 0.7352941176470589,
      'recall': 0.7352941176470589,
      'support': 34},
     'class_2': {'f1-score': 0.4782608695652174, 'precision': 0.4583333333333333,
      'recall': 0.5,
      'support': 22},
     'macro avg': {'f1-score': 0.6753516624040921,
      'precision': 0.6774457094665824,
      'recall': 0.6743909685086157,
      'support': 89},
     'weighted avg': {'f1-score': 0.7003847093307279,
      'precision': 0.7051769964963152,
      'recall': 0.6966292134831461,
      'support': 89}}
```

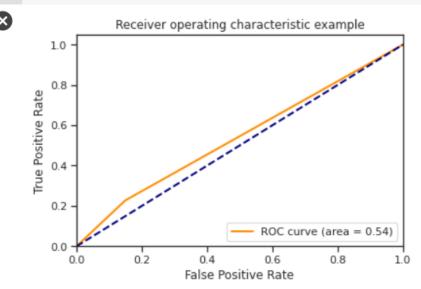
2.4. ROC-кривая и ROC AUC

```
[71] fpr, tpr, thresholds = roc_curve(bin_wine_y_test, bin_target1_1,
                                      pos_label=1)
     fpr, tpr, thresholds
 □→ (array([0.
                       , 0.19402985, 1.
                                               ]),
      array([0. , 0.5, 1. ]),
      array([2, 1, 0]))
[72] # 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 10 ближайших соседей draw_roc_curve(bin_wine_y_test, bin_target1_2, pos_label=1, average='micro')



3. Разбиение выборки на к частей с помощью кросс-валидации.

Наиболее простым способом кросс-валидации является вызов функции cross_val_score. В этом случае стратегия кросс-валидации определяется автоматически.

- [78] from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate

 [80] scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=3), wine.data, wine.target, cv=3)

 [81] # Значение метрики ассигасу для 3 фолдов scores

 □ array([0.61666667, 0.57627119, 0.79661017])

 Усредненное значение метрики ассигасу для 3 фолдов np.mean(scores)
 - □→ 0.6631826741996233

В отличие от функции cross_val_score, функция cross_validate позволяет использовать для оценки несколько метрик и возращает более детальную информацию.

4. Нахождение наилучшего гиперпараметра К с использованием GridSearchCV и кросс-валидации

```
clf_gs.cv_results_
```

```
[> {'mean_fit_time': array([0.00079412, 0.00042229, 0.000424 , 0.00041122, 0.00042453,
            0.00041642, 0.00042357, 0.00042272, 0.00042644, 0.00042472,
            0.00041595, 0.00041776, 0.00041423, 0.00041547, 0.00041981,
            0.0004138 , 0.00041986, 0.00041375, 0.00042772, 0.00042868,
            0.00042977, 0.00041394, 0.00041647, 0.00042043, 0.00040278]),
     'mean_score_time': array([0.00209603, 0.00128002, 0.00122681, 0.00126824, 0.00124025,
            0.00131435, 0.0012342 , 0.00125484, 0.00124636, 0.00125728,
            0.0012476 , 0.00128284, 0.00126023, 0.00125666, 0.00125179,
            0.00125437, 0.00125766, 0.0013196 , 0.00127416, 0.00133877, 0.00129719, 0.00133085, 0.00127959, 0.00134783, 0.00130792]),
     'mean test score': array([0.69411765, 0.67254902, 0.63856209, 0.62679739, 0.66143791,
            0.68300654, 0.70718954, 0.69607843, 0.69607843, 0.70784314,
            0.71895425, 0.71830065, 0.74052288, 0.71830065, 0.71830065,
            0.70784314, 0.69607843, 0.69607843, 0.68431373, 0.69607843,
            0.71699346, 0.73006536, 0.68366013, 0.63921569, 0.69477124]),
     '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],
            fill_value='?',
                 dtype=object),
     'params': [{'n_neighbors': 5},
      {'n_neighbors': 6},
      {'n neighbors': 7},
      {'n neighbors': 8},
      {'n neighbors': 9},
```

clf gs.cv results

```
dtype=object),
\Box
     '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}],
     'rank_test_score': array([17, 21, 24, 25, 22, 20, 10, 11, 11, 9, 3, 4, 1, 4, 6, 8, 11,
            11, 18, 11, 7, 2, 19, 23, 16], dtype=int32),
     'split0 test_score': array([0.77777778, 0.66666667, 0.77777778, 0.72222222, 0.77777778,
```

```
{'n neighbors': 29}],
    'rank test score': array([17, 21, 24, 25, 22, 20, 10, 11, 11, 9, 3, 4, 1, 4, 6, 8, 11,
           11, 18, 11, 7, 2, 19, 23, 16], dtype=int32),
    'split0 test score': array([0.77777778, 0.666666667, 0.77777778, 0.72222222, 0.77777778,
           0.77777778, 0.72222222, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222,
           0.83333333, 0.77777778, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222,
           0.72222222, 0.72222222, 0.72222222, 0.72222222, 0.66666667,
           0.77777778, 0.72222222, 0.66666667, 0.61111111, 0.72222222]),
    'split1_test_score': array([0.72222222, 0.72222222, 0.61111111, 0.666666667, 0.61111111,
           0.66666667, 0.666666667, 0.666666667, 0.611111111, 0.72222222,
           0.72222222, 0.77777778, 0.72222222, 0.77777778, 0.722222222,
           0.66666667, 0.66666667, 0.61111111, 0.61111111, 0.611111111,
           0.77777778, 0.77777778, 0.77777778, 0.77777778]),
    'split2_test_score': array([0.66666667, 0.66666667, 0.61111111, 0.61111111, 0.61111111,
           0.72222222, 0.72222222, 0.66666667, 0.66666667, 0.722222222,
           0.61111111, 0.66666667, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222,
           0.72222222, 0.666666667, 0.722222222, 0.722222222, 0.833333333,
           0.72222222, 0.666666667, 0.722222222, 0.55555556, 0.722222222]),
    'split3_test_score': array([0.83333333, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222, 0.77777778,
           0.77777778, 0.77777778, 0.72222222, 0.83333333, 0.66666667,
           0.72222222, 0.72222222, 0.77777778, 0.72222222, 0.77777778,
           0.72222222, 0.77777778, 0.77777778, 0.77777778, 0.72222222,
           0.77777778, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222, 0.722222222]),
    'split4_test_score': array([0.47058824, 0.52941176, 0.47058824, 0.41176471, 0.52941176,
           0.47058824, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882, 0.70588235,
           0.70588235, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882,
           0.70588235,\ 0.64705882,\ 0.64705882,\ 0.58823529,\ 0.64705882,
           0.52941176, 0.70588235, 0.52941176, 0.52941176, 0.52941176]),
    'std_fit_time': array([2.95198766e-04, 9.22824666e-06, 1.16397113e-05, 3.10048306e-05,
           9.08571883e-06, 6.74282138e-06, 6.14657709e-06, 3.13771894e-06,
           1.34773786e-05, 2.23313588e-05, 5.49625932e-06, 6.36787416e-06,
\Box
            0.77777778, 0.77777778, 0.72222222, 0.72222222, 0.72222222]),
     'split4 test score': array([0.47058824, 0.52941176, 0.47058824, 0.41176471, 0.52941176,
            0.47058824, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882, 0.70588235,
            0.70588235, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882, 0.64705882,
            0.70588235, 0.64705882, 0.64705882, 0.58823529, 0.64705882,
            0.52941176, 0.70588235, 0.52941176, 0.52941176, 0.52941176]),
     'std_fit_time': array([2.95198766e-04, 9.22824666e-06, 1.16397113e-05, 3.10048306e-05,
            9.08571883e-06, 6.74282138e-06, 6.14657709e-06, 3.13771894e-06,
            1.34773786e-05, 2.23313588e-05, 5.49625932e-06, 6.36787416e-06,
            3.25019706e-06, 6.83825051e-06, 6.73573628e-06, 6.64088835e-06,
            9.81636204e-06, 5.37071918e-06, 4.93013650e-06, 7.43774262e-06,
            6.46215515e-06, 9.57291419e-06, 7.43835400e-06, 1.92278339e-06,
            6.96671980e-06]),
     'std_score_time': array([5.87245348e-04, 3.78653142e-05, 3.09571996e-05, 6.63457863e-05,
            3.33649744e-05, 1.34349104e-04, 8.77769011e-06, 2.59980784e-05,
            5.56205558e-06, 3.01392016e-05, 2.22910024e-05, 9.26794812e-05,
            1.87594065e-05, 1.62610560e-05, 1.40190125e-05, 1.78482384e-05,
            1.93897492e-05, 9.92235455e-05, 1.47514644e-05, 4.50280235e-05,
            2.36187991e-05, 3.74661730e-05, 1.45962027e-05, 7.98712061e-05,
            3.03428835e-05]),
     'std_test_score': array([0.12481093, 0.08258087, 0.10592672, 0.11514032, 0.09956546,
            0.11392065, 0.04624385, 0.04794019, 0.07747235, 0.0215389,
            0.07057613, 0.05446449, 0.0514475 , 0.04161505, 0.04161505, 0.0215389 , 0.04794019, 0.05943761, 0.07238691, 0.07747235,
            0.09622726, 0.04293874, 0.08475086, 0.09584918, 0.08543361])}
```

```
[96] # Лучшая модель clf_gs.best_estimator_
```

- [97] # Лучшее значение метрики clf_gs.best_score_
- # Лучшее значение параметров clf_gs.best_params_
 - [→ {'n_neighbors': 17}

Лучшее значение гиперпараметра =17

Лучшее значение метрики при этом гиперпараметре = 0.7405228758169934

