`Дисциплина: Методы и технологии машинного обучения`
`Уровень подготовки: бакалавриат`
`Направление подготовки: 01.03.02 Прикладная математика и информатика`
`Семестр: осень 2021/2022`

Лабораторная работа №3: Линейные модели. Кросс-валидация.

В практических примерах ниже показано:

- как пользоваться инструментами предварительного анализа для поиска линейных взаимосвязей
- как строить и интерпретировать линейные модели с логарифмами
- как оценивать точность моделей с перекрёстной проверкой (LOOCV, проверка по блокам)

Модели: множественная линейная регрессия *Данные*: `insurance` (источник: https://www.kaggle.com/mirichoi0218/insurance/version/1)

In [1]:
```
# настройка ширины страницы блокнота .....................................
from IPython.core.display import display, HTML
display(HTML("<style>.container { width:80% !important; }</style>"))
```

Указания к выполнению

Загружаем пакеты

In [2]:
```
# загрузка пакетов: инструменты ----------------------------------------
#  работа с массивами
import numpy as np
#  фреймы данных
import pandas as pd
#  графики
import matplotlib as mpl
#  стили и шаблоны графиков на основе matplotlib
import seaborn as sns
# перекодировка категориальных переменных
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
#  тест Шапиро-Уилка на нормальность распределения
from scipy.stats import shapiro
#  для таймера
import time

# загрузка пакетов: модели ---------------------------------------------
#  линейные модели
import sklearn.linear_model as skl_lm
#  расчёт MSE
from sklearn.metrics import mean_squared_error
```

```
#  кросс-валидация
from sklearn.model_selection import train_test_split, LeaveOneOut
from sklearn.model_selection import KFold, cross_val_score
#  полиномиальные модели
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
```

In [3]:

```
# константы
#  ядро для генератора случайных чисел
my_seed = 9212
#  создаём псевдоним для короткого обращения к графикам
plt = mpl.pyplot
# настройка стиля и отображения графиков
#  примеры стилей и шаблонов графиков:
#  http://tonysyu.github.io/raw_content/matplotlib-style-gallery/gallery.html
mpl.style.use('seaborn-whitegrid')
sns.set_palette("Set2")
# раскомментируйте следующую строку, чтобы посмотреть палитру
# sns.color_palette("Set2")
```

Загружаем данные

Набор данных `insurance` в формате .csv доступен для загрузки по адресу: https://raw.githubusercontent.com/aksyuk/MTML/main/Labs/data/insurance.csv. Справочник к данным: https://github.com/aksyuk/MTML/blob/main/Labs/data/CodeBook_insurance.md. Загружаем данные во фрейм и кодируем категориальные переменные.

In [4]:

```
# читаем таблицу из файла .csv во фрейм
fileURL = 'https://raw.githubusercontent.com/aksyuk/MTML/main/Labs/data/insuranc
DF_raw = pd.read_csv(fileURL)

# выясняем размерность фрейма
print('Число строк и столбцов в наборе данных:\n', DF_raw.shape)
```

```
Число строк и столбцов в наборе данных:
 (1338, 7)
```

In [5]:

```
# первые 5 строк фрейма
DF_raw.head(5)
```

Out[5]:

	age	sex	bmi	children	smoker	region	charges
0	19	female	27.900	0	yes	southwest	16884.92400
1	18	male	33.770	1	no	southeast	1725.55230
2	28	male	33.000	3	no	southeast	4449.46200
3	33	male	22.705	0	no	northwest	21984.47061
4	32	male	28.880	0	no	northwest	3866.85520

In [6]:

```
# типы столбцов фрейма
DF_raw.dtypes
```

Out[6]:
```
age           int64
sex          object
bmi         float64
children      int64
smoker       object
region       object
charges     float64
dtype: object
```

Проверим, нет ли в таблице пропусков.

In [7]:
```
# считаем пропуски в каждом столбце
DF_raw.isna().sum()
```

Out[7]:
```
age         0
sex         0
bmi         0
children    0
smoker      0
region      0
charges     0
dtype: int64
```

Пропусков не обнаружено.

In [8]:
```
# кодируем категориальные переменные
#  пол
sex_dict = {'female' : 1, 'male' : 0}
DF_raw['sexFemale'] = DF_raw.sex.map(sex_dict)

#  курильщик
yn_dict = {'yes' : 1, 'no' : 0}
DF_raw['smokerYes'] = DF_raw.smoker.map(yn_dict)

# находим уникальные регионы
DF_raw['region'].unique()
```

Out[8]:
```
array(['southwest', 'southeast', 'northwest', 'northeast'], dtype=object)
```

In [9]:
```
#  добавляем фиктивные на регион: число фиктивных = число уникальных - 1
df_dummy = pd.get_dummies(DF_raw[['region']], drop_first=True)
df_dummy.head(5)
```

Out[9]:

	region_northwest	region_southeast	region_southwest
0	0	0	1
1	0	1	0
2	0	1	0
3	1	0	0
4	1	0	0

In [10]:
```
# объединяем с исходным фреймом
DF_all = pd.concat([DF_raw.reset_index(drop=True), df_dummy], axis=1)
```

```
# сколько теперь столбцов
DF_all.shape
```

Out[10]:
```
(1338, 12)
```

In [11]:
```
# смотрим первые 8 столбцов
DF_all.iloc[:, :8].head(5)
```

Out[11]:

	age	sex	bmi	children	smoker	region	charges	sexFemale
0	19	female	27.900	0	yes	southwest	16884.92400	1
1	18	male	33.770	1	no	southeast	1725.55230	0
2	28	male	33.000	3	no	southeast	4449.46200	0
3	33	male	22.705	0	no	northwest	21984.47061	0
4	32	male	28.880	0	no	northwest	3866.85520	0

In [12]:
```
# смотрим последние 5 столбцов
DF_all.iloc[:, 8:].head(5)
```

Out[12]:

	smokerYes	region_northwest	region_southeast	region_southwest
0	1	0	0	1
1	0	0	1	0
2	0	0	1	0
3	0	1	0	0
4	0	1	0	0

In [13]:
```
# оставляем в наборе данных только то, что нужно
#  (плюс метки регионов для графиков)
DF_all = DF_all[['charges', 'age', 'sexFemale', 'bmi', 'children', 'smokerYes',
                 'region_northwest', 'region_southeast',
                 'region_southwest', 'region']]

# перекодируем регион в числовой фактор,
#  чтобы использовать на графиках
class_le = LabelEncoder()
DF_all['region'] = class_le.fit_transform(DF_all['region'].values)

DF_all.columns
```

Out[13]:
```
Index(['charges', 'age', 'sexFemale', 'bmi', 'children', 'smokerYes',
       'region_northwest', 'region_southeast', 'region_southwest', 'region'],
      dtype='object')
```

In [14]:
```
DF_all.dtypes
```

Out[14]:
```
charges             float64
age                   int64
```

```
sexFemale              int64
bmi                  float64
children               int64
smokerYes              int64
region_northwest       uint8
region_southeast       uint8
region_southwest       uint8
region                 int32
dtype: object
```

In [15]:
```
# удаляем фрейм-исходник
del DF_raw
```

Прежде чем переходить к анализу данных, разделим фрейм на две части: одна (90%) станет основой для обучения моделей, на вторую (10%) мы сделаем прогноз по лучшей модели.

In [16]:
```
# данные для построения моделей
DF = DF_all.sample(frac = 0.9, random_state = my_seed)

# данные для прогнозов
DF_predict = DF_all.drop(DF.index)
```

Предварительный анализ данных

Считаем описательные статистики

Рассчитаем описательные статистики для непрерывных переменных. Из таблицы ниже можно видеть, что переменная `charges`, которая является зависимой переменной модели, сильно отличается по масштабу от всех остальных. Также заметим, что из всех объясняющих только переменная `children` принимает нулевые значения. Остальные показатели положительны.

In [17]:
```
# описательные статистики для непрерывных переменных
DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children']].describe()
```

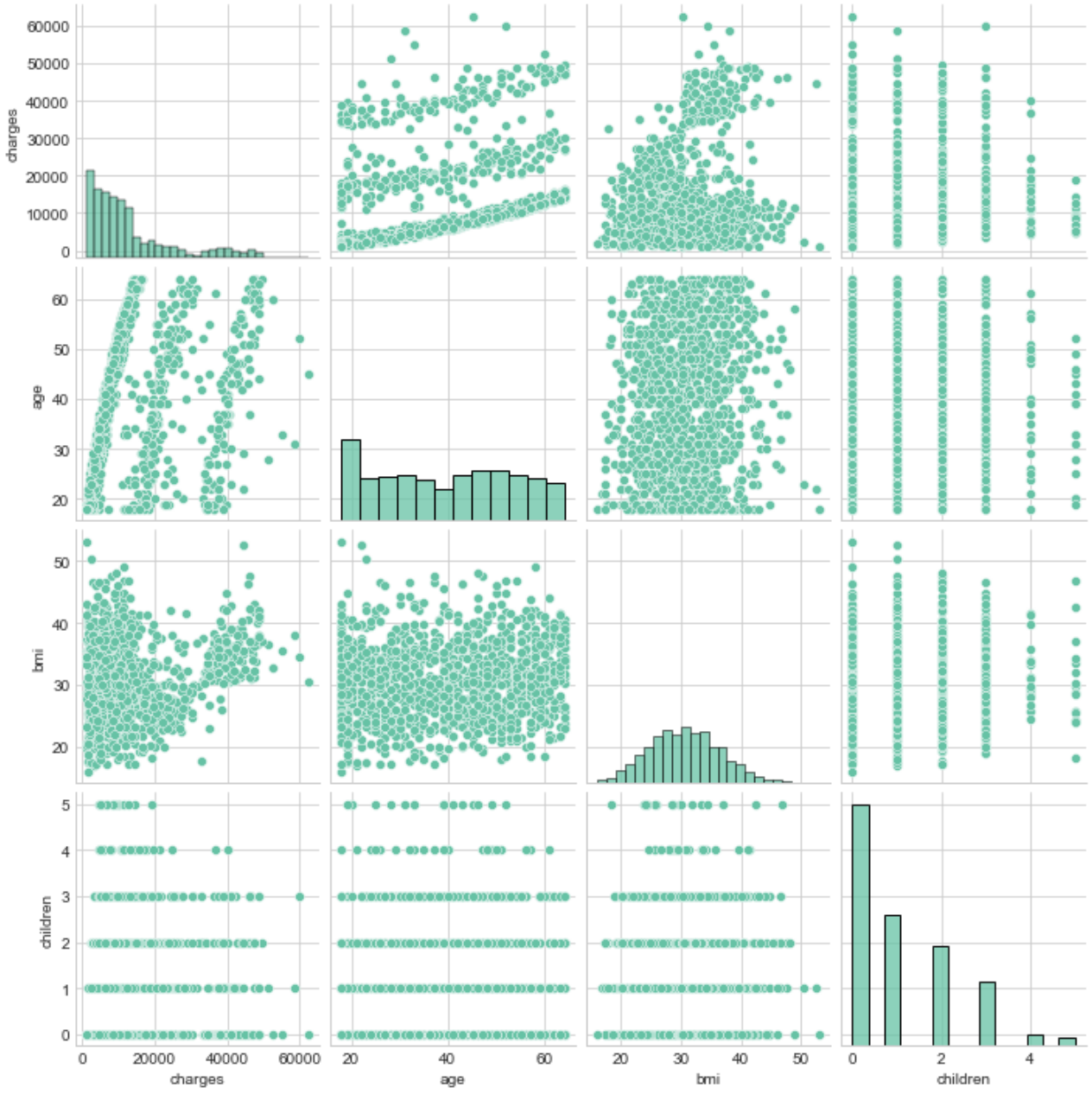
Out[17]:

	charges	age	bmi	children
count	1204.000000	1204.000000	1204.000000	1204.000000
mean	13172.801289	39.453488	30.704007	1.094684
std	12019.293394	14.028898	6.054108	1.217497
min	1121.873900	18.000000	15.960000	0.000000
25%	4750.065725	27.000000	26.400000	0.000000
50%	9382.033000	40.000000	30.495000	1.000000
75%	16328.508137	51.000000	34.717500	2.000000
max	62592.873090	64.000000	53.130000	5.000000

Строим графики

Посмотрим на графики взаимного разброса непрерывных переменных.

In [18]:
```
# матричный график разброса с линиями регрессии
sns.pairplot(DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children']])
plt.show()
```

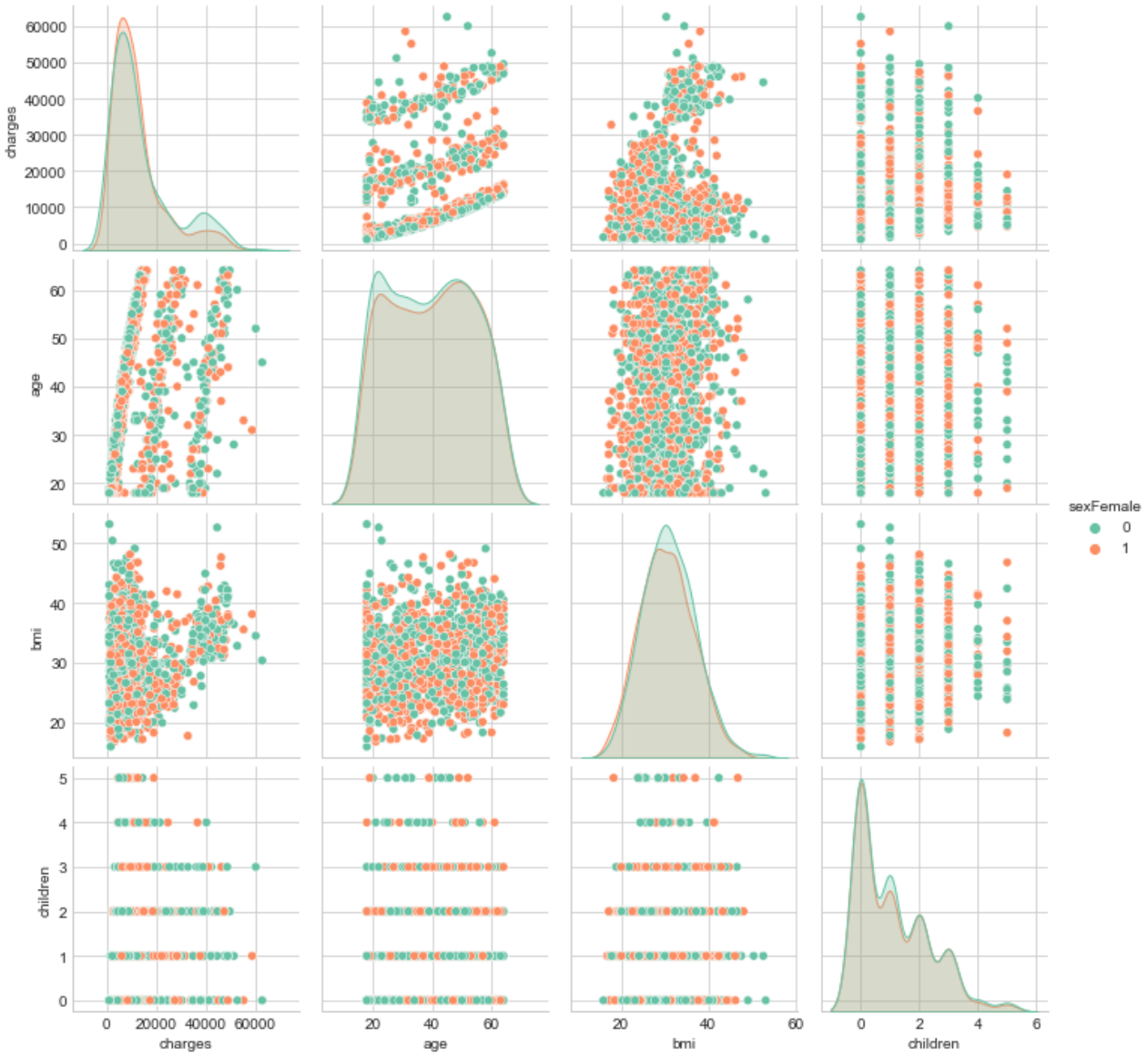


Судя по этим графикам:

- распределение зависимой `charges` не является нормальным;
- из всех объясняющих нормально распределена только `bmi`;
- имеется три уровня стоимости страховки, что заметно на графиках разброса `charges` от `age`;
- облако наблюдений на графике `charges` от `bmi` делится на две неравные части;
- объясняющая `children` дискретна, что очевидно из её смысла: количество детей;
- разброс значений `charges` у застрахованных с количеством детей 5 (максимум из таблицы выше) намного меньше, чем у остальных застрахованных.

Наблюдаемые закономерности могут объясняться влиянием одной или нескольких из фиктивных объясняющих переменных. Построим график, раскрасив точки цветом в зависимости от пола застрахованного лица.

In [19]:
```
# матричный график разброса с цветом по полу
sns.pairplot(DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children',
                 'sexFemale']], hue='sexFemale')
plt.show()
```



Похоже, что оранжевые и зелёные точки распределены по обозначенным выше интересным участкам графиков более-менее равномерно, за исключением столбца значений `children == 5`, где зелёных визуально больше. Проверим это.

In [20]:
```
DF.groupby('sexFemale')['children'].value_counts()
```

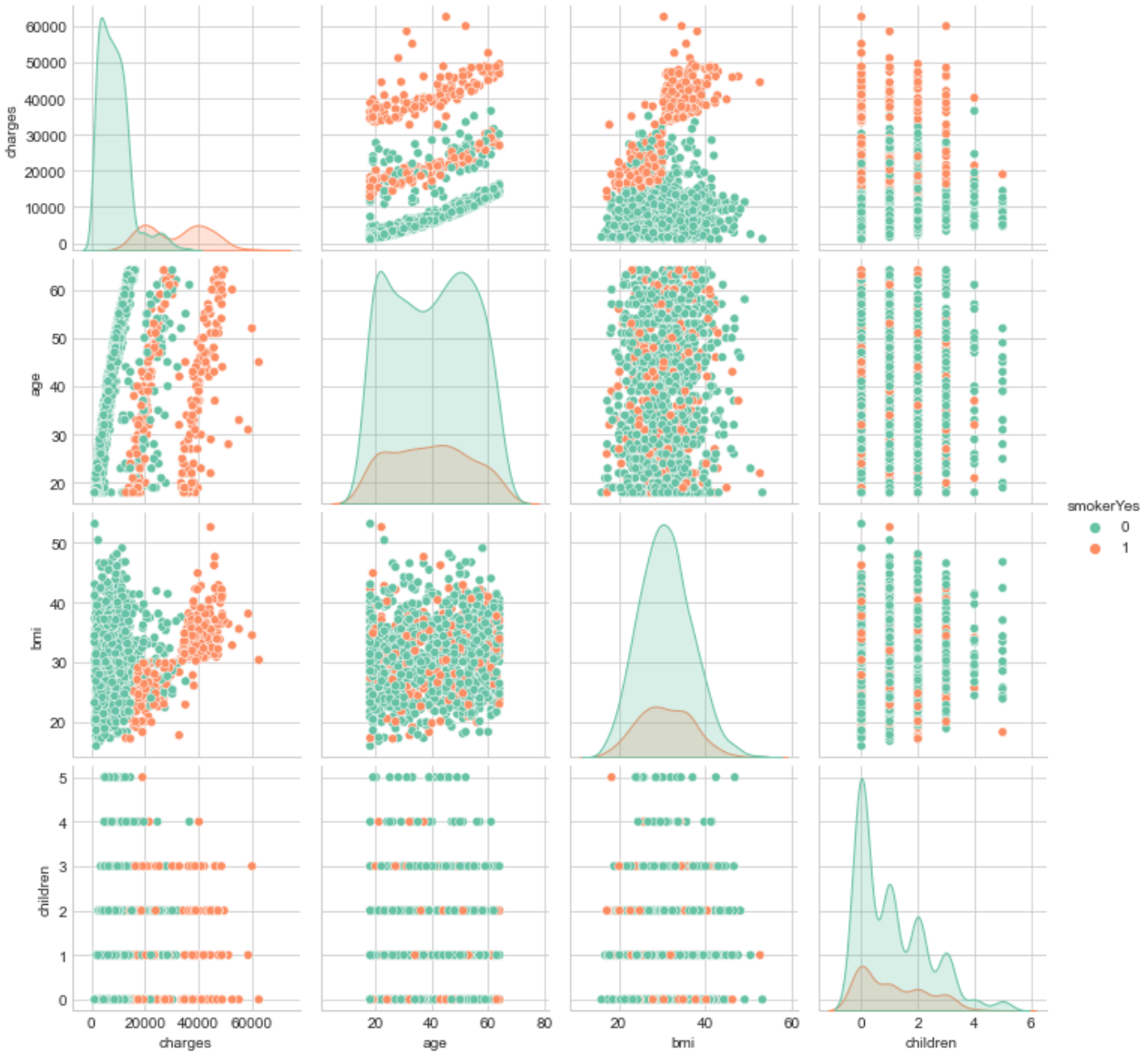
Out[20]:
```
sexFemale  children
0          0           264
           1           151
           2           108
           3            70
```

```
             4             13
             5             10
1            0            259
             1            133
             2            108
             3             70
             4             10
             5              8
Name: children, dtype: int64
```

Очевидно, подсчёт частот не подтверждает наше наблюдение: застрахованных мужчин и женщин с одним и тем же количеством детей примерно одинаково.
Теперь покажем цветом на графиках отношение застрахованых лиц к курению.

In [21]:

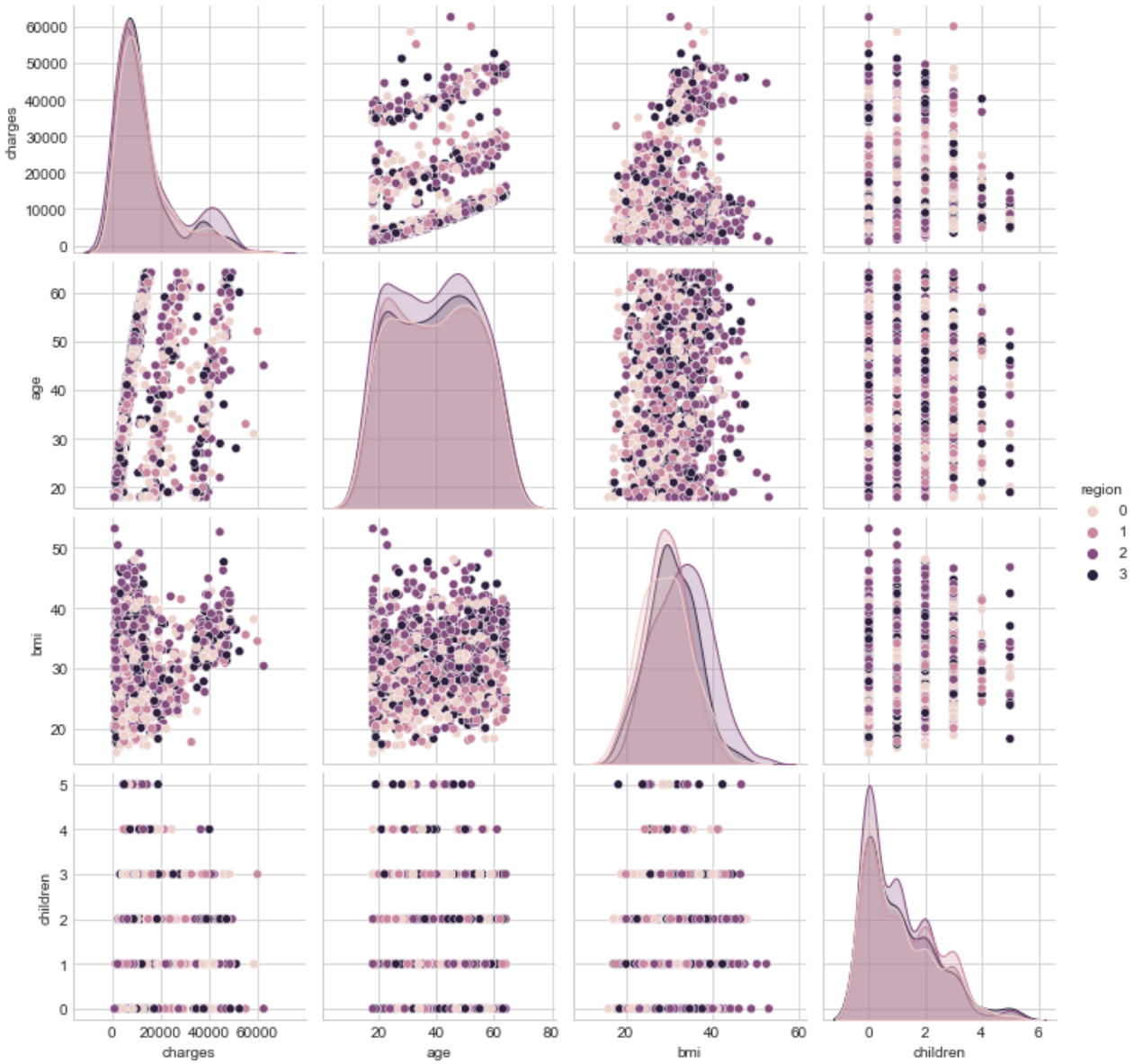
```
# матричный график разброса с цветом по smokerYes
sns.pairplot(DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children',
                 'smokerYes']], hue='smokerYes')
plt.show()
```



Здесь фиктивная переменная `smokerYes` явно влияет на сумму страховки. Во-первых, для некурящих действует свой тариф в зависимости от возраста (у линейной модели отличается константа). Во-вторых, курильщики с индексом массы тела выше среднего (`bmi`) также платят

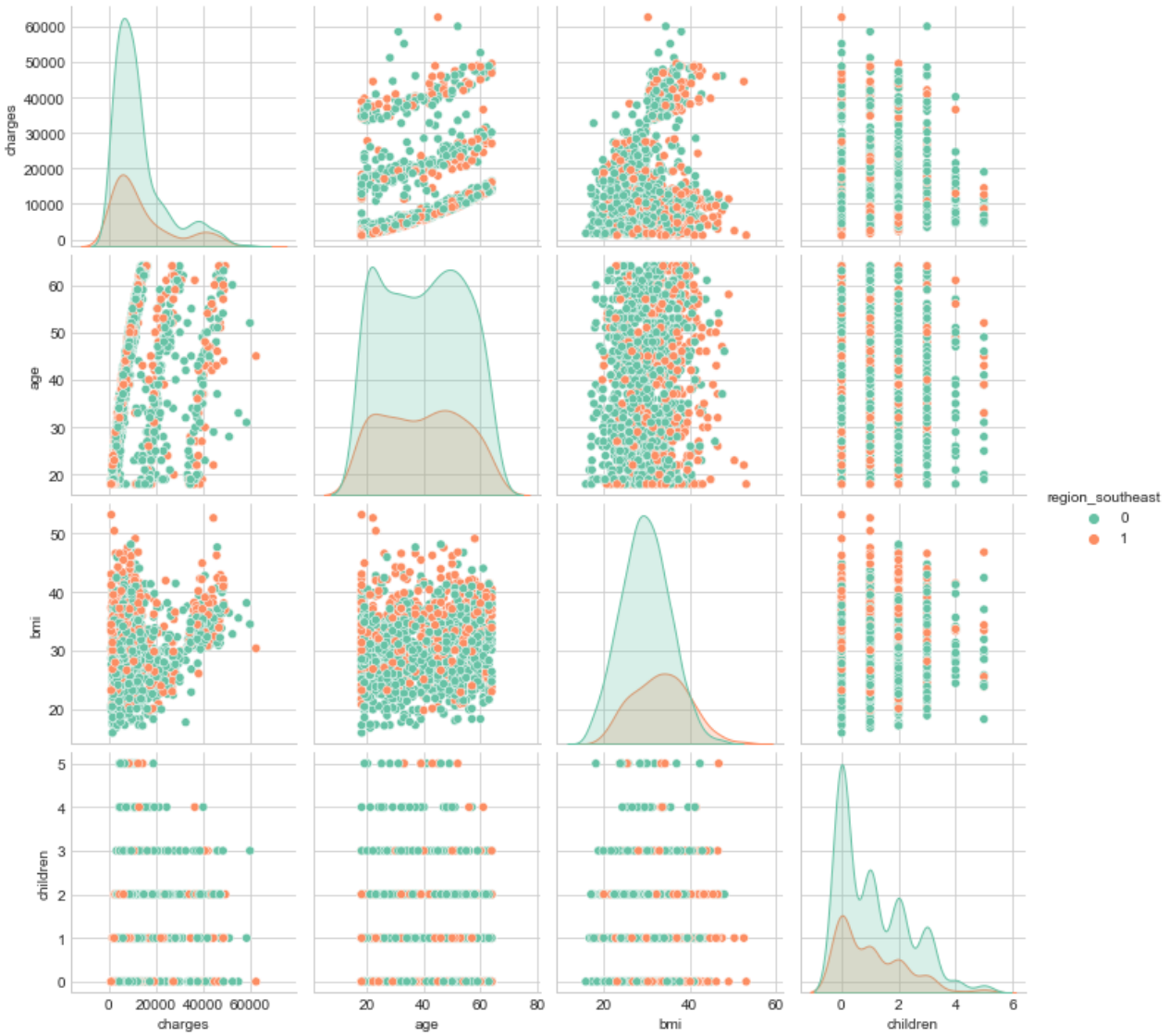
за медицинскую страховку больше, однако, судя по графику разброса, здесь присутствует влияние ещё какого-то фактора.
Наконец, покажем с помощью цвета на графиках регионы.

In [22]:
```
# матричный график разброса с цветом по region
sns.pairplot(DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children',
                 'region']], hue='region')
plt.show()
```



Судя по графикам плотности, переменная `region` не делит непрерывные переменные фрейма на какие-то подгруппы. Отличаются по регионам разве что средние значения `bmi`: похоже, что у региона с кодом 2 (что соответствует `region_southeast == 1`, в чём можно убедиться, заглянув во фрейм данных) средний индекс массы тела немного выше, чем в других регионах. Нарисуем график отдельно по `region_southeast`.

In [23]:
```
# матричный график разброса с цветом по региону southeast
sns.pairplot(DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children',
                 'region_southeast']], hue='region_southeast')
plt.show()
```



Увы, явных шаблонов, связанных с этим регионом, на графиках разброса не обнаруживается. Посмотрим на корреляционные матрицы непрерывных переменных фрейма.

In [24]:
```
# корреляционная матрица по всем наблюдениям
corr_mat = DF[['charges', 'age', 'bmi', 'children']].corr()
corr_mat.style.background_gradient(cmap='coolwarm').set_precision(2)
```

Out[24]:

	charges	age	bmi	children
charges	1.00	0.31	0.18	0.07
age	0.31	1.00	0.10	0.06
bmi	0.18	0.10	1.00	0.01
children	0.07	0.06	0.01	1.00

Без разбиения на классы наблюдений по фиктивным переменным максимальная теснота линейной взаимосвязи соответствует коэффициенту корреляции 0.30 между `charges` и `age`. Посчитаем корреляционные матрицы для курящих и некурящих застрахованных лиц.

In [25]:
```
```

```
# корреляционная матрица по классу курильщиков
corr_mat = DF.loc[DF['smokerYes'] == 1][['charges', 'age',
                                         'bmi', 'children']].corr()
corr_mat.style.background_gradient(cmap='coolwarm').set_precision(2)
```

Out[25]:

	charges	age	bmi	children
charges	1.00	0.38	0.80	0.00
age	0.38	1.00	0.05	0.07
bmi	0.80	0.05	1.00	-0.06
children	0.00	0.07	-0.06	1.00

In [26]:

```
# корреляционная матрица по классу не курильщиков
corr_mat = DF.loc[DF['smokerYes'] == 0][['charges', 'age',
                                         'bmi', 'children']].corr()
corr_mat.style.background_gradient(cmap='coolwarm').set_precision(2)
```

Out[26]:

	charges	age	bmi	children
charges	1.00	0.63	0.07	0.16
age	0.63	1.00	0.11	0.06
bmi	0.07	0.11	1.00	0.03
children	0.16	0.06	0.03	1.00

Можно убедиться, что линейные связи с учётом `smokerYes` значительно усиливаются, причём у тесно связанным с `charges` объясняющим добавляется `bmi`.

Логарифмируем зависимую переменную

Важным допущением линейной регрессии является нормальность зависимой переменной. Чтобы добиться нормального распределения, используют логарифмирование либо преобразование Бокса-Кокса. В этой лабораторной остановимся на логарифмировании.

In [27]:

```
# логарифмируем зависимую переменную
DF['log_charges'] = np.log(DF['charges'])

# описательные статистики для непрерывных показателей
DF[['charges', 'log_charges', 'age', 'bmi', 'children']].describe()
```

Out[27]:

	charges	log_charges	age	bmi	children
count	1204.000000	1204.000000	1204.000000	1204.000000	1204.000000
mean	13172.801289	9.092599	39.453488	30.704007	1.094684
std	12019.293394	0.919331	14.028898	6.054108	1.217497
min	1121.873900	7.022756	18.000000	15.960000	0.000000
25%	4750.065725	8.465914	27.000000	26.400000	0.000000

	charges	log_charges	age	bmi	children
50%	9382.033000	9.146552	40.000000	30.495000	1.000000
75%	16328.508137	9.700663	51.000000	34.717500	2.000000
max	62592.873090	11.044407	64.000000	53.130000	5.000000

Отметим, как сильно логарифмирование повлияло на масштаб значений зависимой переменной. Проведём формальные тесты на нормальность.

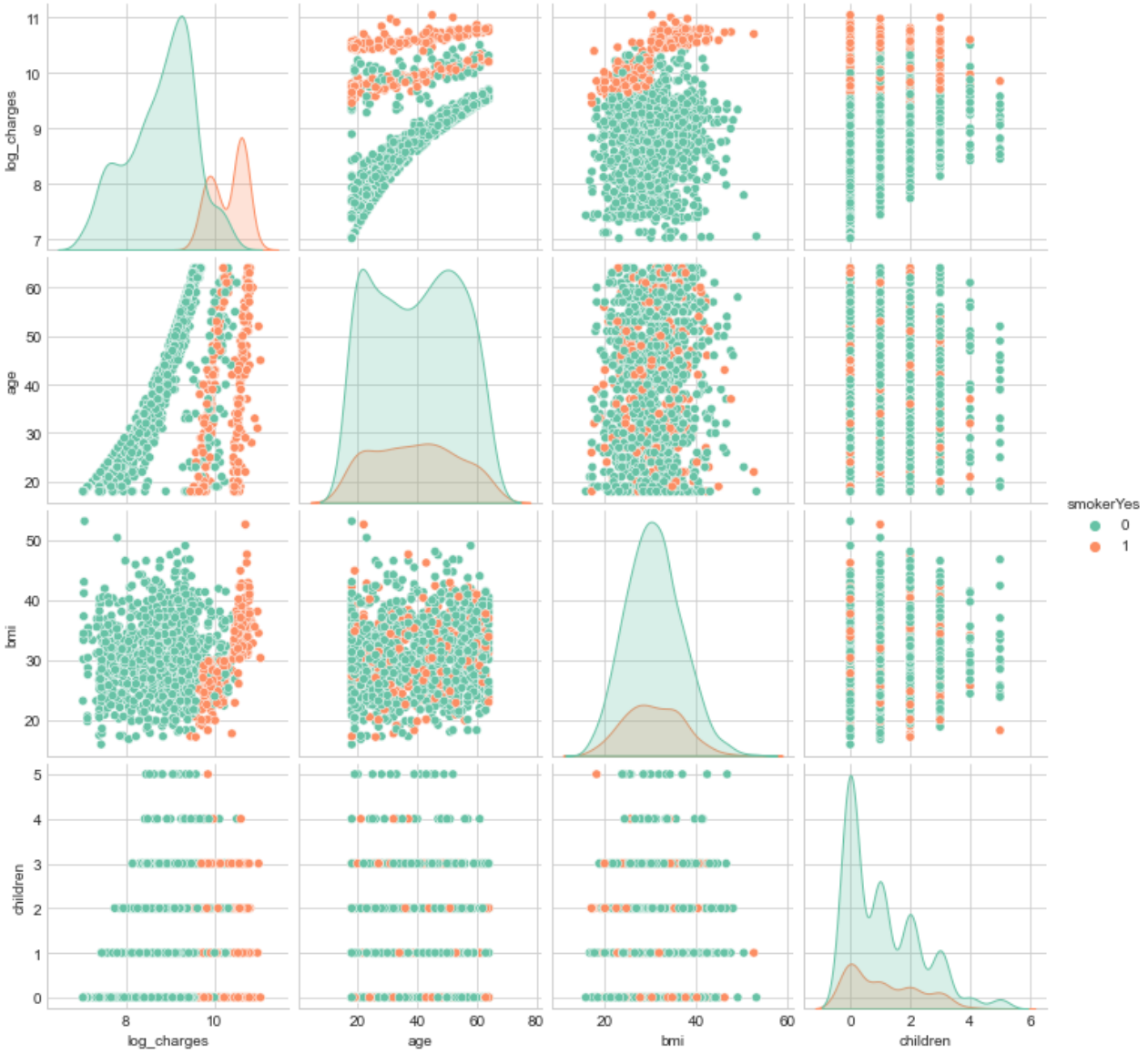
In [28]:
```
# тестируем на нормальность
for col in ['charges', 'log_charges']:
    stat, p = shapiro(DF[col])
    print(col, 'Statistics=%.2f, p=%.4f' % (stat, p))
    # интерпретация
    alpha = 0.05
    if p > alpha:
        print('Распределение нормально (H0 не отклоняется)\n')
    else:
        print('Распределение не нормально (H0 отклоняется)\n')
```

```
charges Statistics=0.81, p=0.0000
Распределение не нормально (H0 отклоняется)

log_charges Statistics=0.98, p=0.0000
Распределение не нормально (H0 отклоняется)
```

Тест Шапиро-Уилка показывает, что после логарифмирования `log_charges` по-прежнему не распределена нормально, однако функция плотности на графике ниже выглядит более нормальной, чем была у `charges`. Логарифмирование меняет взаимосвязи между переменными, и, судя по графикам разброса, в нашем случае некоторые стали нелинейными. Тем не менее, корреляционные матрицы имеют ту же структуру.

In [29]:
```
# матричный график разброса с цветом по smokerYes
sns.pairplot(DF[['log_charges', 'age', 'bmi', 'children',
                 'smokerYes']], hue='smokerYes')
plt.show()
```



In [30]:

```
# корреляционная матрица по классу не курильщиков
corr_mat = DF.loc[DF['smokerYes'] == 0][['log_charges', 'age',
                                         'bmi', 'children']].corr()
corr_mat.style.background_gradient(cmap='coolwarm').set_precision(2)
```

Out[30]:

	log_charges	age	bmi	children
log_charges	1.00	0.80	0.08	0.26
age	0.80	1.00	0.11	0.06
bmi	0.08	0.11	1.00	0.03
children	0.26	0.06	0.03	1.00

In [31]:

```
# корреляционная матрица по классу курильщиков
corr_mat = DF.loc[DF['smokerYes'] == 1][['log_charges', 'age',
                                         'bmi', 'children']].corr()
corr_mat.style.background_gradient(cmap='coolwarm').set_precision(2)
```

Out[31]:

	log_charges	age	bmi	children

	log_charges	age	bmi	children
log_charges	1.00	0.39	0.80	0.01
age	0.39	1.00	0.05	0.07
bmi	0.80	0.05	1.00	-0.06
children	0.01	0.07	-0.06	1.00

Строим модели регрессии

Спецификация моделей

По итогам предварительного анализа данных можно предложить следующие спецификации линейных регрессионных моделей:

1. `fit_lm_1` : $\hat{charges} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot smokerYes + \hat{\beta}_2 \cdot age + \hat{\beta}_3 \cdot bmi$
2. `fit_lm_2` : $\hat{charges} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot smokerYes + \hat{\beta}_2 \cdot age \cdot smokerYes + \hat{\beta}_3 \cdot bmi$
3. `fit_lm_3` : $\hat{charges} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot smokerYes + \hat{\beta}_2 \cdot bmi \cdot smokerYes + \hat{\beta}_3 \cdot age$
4. `fit_lm_4` :
   $\hat{charges} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot smokerYes + \hat{\beta}_2 \cdot bmi \cdot smokerYes + \hat{\beta}_3 \cdot age \cdot smokerYes$
5. `fit_lm_1_log` : то же, что `fit_lm_1` , но для зависимой $\hat{log\_charges}$
6. `fit_lm_2_log` : то же, что `fit_lm_2` , но для зависимой $\hat{log\_charges}$
7. `fit_lm_3_log` : то же, что `fit_lm_3` , но для зависимой $\hat{log\_charges}$
8. `fit_lm_4_log` : то же, что `fit_lm_4` , но для зависимой $\hat{log\_charges}$

Кроме того, добавим в сравнение модели зависимости `charges` и `log_sharges` от всех объясняющих переменных: `fit_lm_0` и `fit_lm_0_log` соответственно.

Обучение и интерпретация

Создаём матрицы значений объясняющих переменных (X) и вектора значений зависимой (y) для всех моделей.

In [32]:
```
# данные для моделей 1, 5
df1 = DF[['charges', 'smokerYes', 'age', 'bmi']]

# данные для моделей 2, 6
df2 = DF[['charges', 'smokerYes', 'age', 'bmi']]
df2.loc[:, 'age_smokerYes'] = df2.loc[:, 'age'] * df2.loc[:, 'smokerYes']
df2 = df2.drop(['age'], axis=1)

# данные для моделей 3, 7
df3 = DF[['charges', 'smokerYes', 'age', 'bmi']]
df3.loc[:, 'bmi_smokerYes'] = df3.loc[:, 'bmi'] * df3.loc[:, 'smokerYes']
df3 = df3.drop(['bmi'], axis=1)

# данные для моделей 4, 8
df4 = DF[['charges', 'smokerYes', 'age', 'bmi']]
```

```
df4.loc[:, 'age_smokerYes'] = df4.loc[:, 'age'] * df4.loc[:, 'smokerYes']
df4.loc[:, 'bmi_smokerYes'] = df4.loc[:, 'bmi'] * df4.loc[:, 'smokerYes']
df4 = df4.drop(['age', 'bmi'], axis=1)

# данные для моделей 9, 10
df0 = DF.drop(['log_charges', 'region'], axis=1)
```

```
C:\Users\user\anaconda3\lib\site-packages\pandas\core\indexing.py:1597: SettingW
ithCopyWarning:
A value is trying to be set on a copy of a slice from a DataFrame.
Try using .loc[row_indexer,col_indexer] = value instead

See the caveats in the documentation: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stab
le/user_guide/indexing.html#returning-a-view-versus-a-copy
  self.obj[key] = value
C:\Users\user\anaconda3\lib\site-packages\pandas\core\indexing.py:1676: SettingW
ithCopyWarning:
A value is trying to be set on a copy of a slice from a DataFrame.
Try using .loc[row_indexer,col_indexer] = value instead

See the caveats in the documentation: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stab
le/user_guide/indexing.html#returning-a-view-versus-a-copy
  self._setitem_single_column(ilocs[0], value, pi)
```

Построим модели от всех объясняющих переменных на всех наблюдениях `DF`, чтобы проинтерпретировать параметры. В модели для зависимой переменной `charges` интерпретация стандартная:

1. Константа – базовый уровень зависимой переменной, когда все объясняющие равны 0.
2. Коэффициент при объясняющей переменной X показывает, на сколько своих единиц измерения изменится Y, если X увеличится на одну свою единицу измерения.

In [33]:
```
lm = skl_lm.LinearRegression()

# модель со всеми объясняющими, y
X = df0.drop(['charges'], axis=1)
y = df0.charges.values.reshape(-1, 1)
fit_lm_0 = lm.fit(X, y)
print('модель fit_lm_0:\n',
      'константа ', np.around(fit_lm_0.intercept_, 3),
      '\n объясняющие ', list(X.columns.values),
      '\n коэффициенты ', np.around(fit_lm_0.coef_, 3))
```

```
модель fit_lm_0:
 константа  [-11888.329]
 объясняющие  ['age', 'sexFemale', 'bmi', 'children', 'smokerYes', 'region_north
west', 'region_southeast', 'region_southwest']
 коэффициенты  [[  259.625   290.528   324.171   446.331 23783.587  -219.521  -9
59.966
   -856.272]]
```

In [34]:
```
# оценим MSE на обучающей
#  прогнозы
y_pred = fit_lm_0.predict(X)
MSE = sum((y - y_pred.reshape(-1, 1))**2) / len(y)
MSE
```

Out[34]:
```
array([35968901.65408054])
```

С интрпретацией модели на логарифме Y дела обстоят сложнее:

1. Константу сначала надо экспоненциировать, далее интерпретировать как для обычной модели регрессии.
2. Коэффициент при X нужно экспоненциировать, затем вычесть из получившегося числа 1, затем умножить на 100. Результат показывает, на сколько процентов изменится (увеличится, если коэффициент положительный, и уменьшится, если отрицательный) зависимая переменная, если X увеличится на одну свою единицу измерения.

In [35]:
```
# модель со всеми объясняющими, y_log
X = df0.drop(['charges'], axis=1)
y = np.log(df0.charges).values.reshape(-1, 1)
fit_lm_0_log = lm.fit(X, y)
print('модель fit_lm_0_log:\n',
      'константа ', np.around(fit_lm_0_log.intercept_, 3),
      '\n объясняющие ', list(X.columns.values),
      '\n коэффициенты ', np.around(fit_lm_0_log.coef_, 3))
```

```
модель fit_lm_0_log:
 константа  [6.924]
 объясняющие  ['age', 'sexFemale', 'bmi', 'children', 'smokerYes', 'region_north
west', 'region_southeast', 'region_southwest']
 коэффициенты  [[ 0.035  0.086  0.013  0.104  1.538 -0.051 -0.149 -0.114]]
```

In [36]:
```
# пересчёт коэффициентов для их интерпретации
np.round((np.exp(fit_lm_0_log.coef_) - 1) * 100, 1)
```

Out[36]:
```
array([[  3.6,   8.9,   1.3,  11. , 365.6,  -4.9, -13.8, -10.8]])
```

In [37]:
```
# оценим MSE на обучающей
#  прогнозы
y_pred = fit_lm_0_log.predict(X)
MSE_log = sum((np.exp(y) - np.exp(y_pred).reshape(-1, 1))**2) / len(y)
MSE_log
```

Out[37]:
```
array([68062396.99291997])
```

In [38]:
```
print('MSE_train модели для charges меньше MSE_train',
     'модели для log(charges) в ', np.around(MSE_log / MSE, 1), 'раз')
```

```
MSE_train модели для charges меньше MSE_train модели для log(charges) в  [1.9] р
аз
```

Оценка точности

LOOCV

Сделаем перекрёстную проверку точности моделей по одному наблюдению.

In [39]:
```
# LeaveOneOut CV
loo = LeaveOneOut()

# модели для y
```

```
scores = list()
# таймер
tic = time.perf_counter()
for df in [df0, df1, df2, df3, df4] :
    loo.get_n_splits(df)
    X = df.drop(['charges'], axis=1)
    y = df.charges
    score = cross_val_score(lm, X, y, cv=loo,
                            scoring='neg_mean_squared_error').mean()
    scores.append(score)

# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Расчёты методом LOOCV заняли {toc - tic:0.2f} секунд")
```

```
Расчёты методом LOOCV заняли 18.44 секунд
```

In [40]:

```
# модели для y_log
scores_log = list()
# таймер
tic = time.perf_counter()
for df in [df0, df1, df2, df3, df4] :
    loo.get_n_splits(df)
    X = df.drop(['charges'], axis=1)
    y = np.log(df.charges)
    score = cross_val_score(lm, X, y, cv=loo, n_jobs=1,
                            scoring='neg_mean_squared_error').mean()
    scores_log.append(score)

# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Расчёты методом LOOCV заняли {toc - tic:0.2f} секунд")
```

```
Расчёты методом LOOCV заняли 18.73 секунд
```

Сравним ошибки для моделей на исходных значениях `charges` с ошибками моделей на логарифме.

In [41]:

```
[np.around(-x, 2) for x in scores]
```

Out[41]:

```
[36576879.42, 36751828.66, 46613497.18, 23782780.05, 34990547.45]
```

In [42]:

```
[np.around(-x, 3) for x in scores_log]
```

Out[42]:

```
[0.197, 0.217, 0.461, 0.204, 0.455]
```

Очевидно, что между собой эти цифры сравнивать нельзя, поскольку процедура `cross_val_score()` при расчёте MSE не делает экспоненциирования Y. Поэтому, если требуется выбрать из всех моделей лучшую, схема работы должна быть следующей:

1. Найти наилучшую модель для Y.
2. Найти наилучшую модель для $log(Y)$.
3. Перестроить их без перекрёстной проверки, оценив MSE методом проверочной выборки.
4. Рассчитать MSE перестроенных моделей вручную и сравнить.

In [43]:
```
# самая точная на charges
fits = ['fit_lm_0', 'fit_lm_1', 'fit_lm_2', 'fit_lm_3', 'fit_lm_4']
print('Наименьшая ошибка на тестовой с LOOCV у модели',
      fits[scores.index(max(scores))],
      ':\nMSE_loocv =', np.around(-max(scores), 0))
```

```
Наименьшая ошибка на тестовой с LOOCV у модели fit_lm_3 :
MSE_loocv = 23782780.0
```

In [44]:
```
# самая точная на log(charges)
fits = ['fit_lm_0_log', 'fit_lm_1_log', 'fit_lm_2_log',
        'fit_lm_3_log', 'fit_lm_4_log']
print('Наименьшая ошибка на тестовой с LOOCV у модели',
      fits[scores_log.index(max(scores_log))],
      ':\nMSE_loocv =', np.around(-max(scores_log), 3))
```

```
Наименьшая ошибка на тестовой с LOOCV у модели fit_lm_0_log :
MSE_loocv = 0.197
```

Перекрёстная проверка по блокам

Теоретически этот метод менее затратен, чем LOOCV. Проверим на наших моделях.

In [45]:
```
# Перекрёстная проверка по 10 блокам
folds = 10

# ядра для разбиений перекрёстной проверкой
r_state = np.arange(my_seed, my_seed + 9)

# модели для y
scores = list()
# таймер
tic = time.perf_counter()
i = 0
for df in [df0, df1, df2, df3, df4] :
    X = df.drop(['charges'], axis=1)
    y = df.charges
    kf_10 = KFold(n_splits=folds, random_state=r_state[i],
                  shuffle=True)
    score = cross_val_score(lm, X, y, cv=kf_10,
                            scoring='neg_mean_squared_error').mean()
    scores.append(score)
    i+=1

# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Расчёты методом CV по 10 блокам заняли {toc - tic:0.2f} секунд")
```

```
Расчёты методом CV по 10 блокам заняли 0.16 секунд
```

In [46]:
```
# Перекрёстная проверка по 10 блокам
folds = 10

# ядра для разбиений перекрёстной проверкой
r_state = np.arange(my_seed, my_seed + 9)

# модели для y
scores_log = list()
# таймер
```

```
tic = time.perf_counter()
i = 0
for df in [df0, df1, df2, df3, df4] :
    X = df.drop(['charges'], axis=1)
    y = np.log(df.charges)
    kf_10 = KFold(n_splits=folds, random_state=r_state[i],
                  shuffle=True)
    score = cross_val_score(lm, X, y, cv=kf_10,
                            scoring='neg_mean_squared_error').mean()
    scores_log.append(score)
    i+=1

# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Расчёты методом CV по 10 блокам заняли {toc - tic:0.2f} секунд")
```

```
Расчёты методом CV по 10 блокам заняли 0.16 секунд
```

In [47]:

```
# самая точная на charges
fits = ['fit_lm_0', 'fit_lm_1', 'fit_lm_2', 'fit_lm_3', 'fit_lm_4']
print('Наименьшая ошибка на тестовой с k-fold10 у модели',
      fits[scores.index(max(scores))],
      ':\nMSE_kf10 =', np.around(-max(scores), 0))
```

```
Наименьшая ошибка на тестовой с k-fold10 у модели fit_lm_3 :
MSE_kf10 = 23764311.0
```

In [48]:

```
# самая точная на log(charges)
fits = ['fit_lm_0_log', 'fit_lm_1_log', 'fit_lm_2_log',
        'fit_lm_3_log', 'fit_lm_4_log']
print('Наименьшая ошибка на тестовой с k-fold10 у модели',
      fits[scores_log.index(max(scores_log))],
      ':\nMSE_kf10 =', np.around(-max(scores_log), 3))
```

```
Наименьшая ошибка на тестовой с k-fold10 у модели fit_lm_0_log :
MSE_kf10 = 0.198
```

Можно убедиться, что оценка MSE методом перекрёстной проверки по 10 блокам даёт результаты, практически идентичные методу LOOCV. При этом скорость у первого метода при 1204 наблюдениях выше на два порядка.

Самой точной среди моделей для `charges` оказалась `fit_lm_3`, а среди моделей для `charges_log` – `fit_lm_0_log`. Оценим точность прогноза по этим моделям на отложенные наблюдения.

In [49]:

```
# прогноз по fit_lm_3
#  модель на всех обучающих наблюдениях
X = df3.drop(['charges'], axis=1)
y = df3.charges.values.reshape(-1, 1)
fit_lm_3  = lm.fit(X, y)

#  значения y на отложенных наблюдениях
y = DF_predict[['charges']].values.reshape(-1, 1)
#  матрица объясняющих на отложенных наблюдениях
X = DF_predict[['smokerYes', 'age', 'bmi']]
X.loc[:, 'bmi_smokerYes'] = X.loc[:, 'bmi'] * X.loc[:, 'smokerYes']
X = X.drop(['bmi'], axis=1)
#  прогнозы
```

```
y_pred = fit_lm_3.predict(X)

# ошибка
MSE = sum((y - y_pred.reshape(-1, 1))**2) / len(y)
print('MSE модели fit_lm_3 на отложенных наблюдениях = %.2f' % MSE)
```

```
MSE модели fit_lm_3 на отложенных наблюдениях = 27756871.38
```

```
C:\Users\user\anaconda3\lib\site-packages\pandas\core\indexing.py:1597: SettingW
ithCopyWarning:
A value is trying to be set on a copy of a slice from a DataFrame.
Try using .loc[row_indexer,col_indexer] = value instead

See the caveats in the documentation: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stab
le/user_guide/indexing.html#returning-a-view-versus-a-copy
  self.obj[key] = value
C:\Users\user\anaconda3\lib\site-packages\pandas\core\indexing.py:1676: SettingW
ithCopyWarning:
A value is trying to be set on a copy of a slice from a DataFrame.
Try using .loc[row_indexer,col_indexer] = value instead

See the caveats in the documentation: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stab
le/user_guide/indexing.html#returning-a-view-versus-a-copy
  self._setitem_single_column(ilocs[0], value, pi)
```

In [50]:

```
# прогноз по fit_lm_log_0
# модель
X = df0.drop(['charges'], axis=1)
y = np.log(df0.charges).values.reshape(-1, 1)
fit_lm_0_log = lm.fit(X, y)

#  значения y на отложенных наблюдениях
y = np.log(DF_predict[['charges']].values.reshape(-1, 1))
#  матрица объясняющих на отложенных наблюдениях
X = DF_predict.drop(['charges', 'region'], axis=1)

#  прогнозы
y_pred = fit_lm_0_log.predict(X)

# ошибка
MSE_log = sum((np.exp(y) - np.exp(y_pred).reshape(-1, 1))**2) / len(y)
print('MSE модели fit_lm_0_log на отложенных наблюдениях = %.2f' % MSE_log)
```

```
MSE модели fit_lm_0_log на отложенных наблюдениях = 79934529.87
```

Очевидно, на выборке для прогноза точнее модель `fit_lm_3`:

$$\hat{charges} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot smokerYes + \hat{\beta}_2 \cdot bmi \cdot smokerYes + \hat{\beta}_3 \cdot age$$

In [51]:

```
print('модель fit_lm_3:\n',
      'константа ', np.around(fit_lm_3.intercept_, 3),
      '\n объясняющие ', list(df3.drop(['charges'], axis=1).columns.values),
      '\n коэффициенты ', np.around(fit_lm_3.coef_, 3))
```

```
модель fit_lm_3:
 константа  [6.924]
 объясняющие  ['smokerYes', 'age', 'bmi_smokerYes']
 коэффициенты  [[ 0.035  0.086  0.013  0.104  1.538 -0.051 -0.149 -0.114]]
```

Упражнение 2

1. Данные своего варианта (см. таблицу ниже) разделить на выборку для построения моделей (80%) и отложенные наблюдения (20%). Оставить в таблице только указанные в варианте переменные. Отложенные наблюдения использовать только в задании 6.

2. Провести предварительный анализ данных с помощью описательных статистик и графиков из этой лабораторной.

3. Прологарифмировать Y на нормальность. Если он распределён не по нормальному закону, прологарифмировать и снова провести анализ взаимосвязей переменных.

4. Составить список возможных спецификаций моделей множественной регрессии (на исходной Y и на логарифме Y).

5. Оценить параметры моделей из списка. Оценить точность моделей методом перекрёстной проверки, указанным в варианте. Найти самую точную из моделей для Y. Найти самую точную из моделей для $log(Y)$.

6. Сделать прогноз с помощью самых точных моделей на отложенные наблюдения. Рассчитать MSE_{test} вручную и выбрать одну наиболее точную модель. Проинтерпретировать её параметры.

Варианты

Номер варианта – номер студента в списке. Студент под номером 21 берёт вариант 1, под номером 22 – 2, и т.д.

В качестве ядра генератора случайных чисел (в частности, для разделения данных на выборку для построения моделей и отложенные наблюдения) используйте номер своего варианта.

Наборы данных и справочники к ним выложены в репозитории с материалами к курсу.

Номер варианта	**Данные**	**Зависимая переменная**	**Объясняющие переменные**	
			непрерывные	дискретные (факторы)
1	`Boston_for_lab`	`medv`	`zn, indus`	`tax_over_400`
2	`Boston_for_lab`	`medv`	`rm, nox`	`tax_over_400`
3	`Boston_for_lab`	`medv`	`rm, dis`	`tax_over_400`
4	`Boston_for_lab`	`medv`	`rm, indus`	`tax_over_400`
5	`Boston_for_lab`	`medv`	`indus, crim`	`tax_over_400`
6	`Auto_for_lab`	`mpg`	`displacement, acceleration`	`cyl_over_4`
7	`Auto_for_lab`	`mpg`	`horsepower, weight`	`cyl_over_4`
8	`Auto_for_lab`	`mpg`	`displacement, weight`	`cyl_over_4`
9	`Auto_for_lab`	`mpg`	`horsepower,`	`cyl_over_4`

			acceleration	
10	Carseats	Sales	Price, Advertising	ShelveLoc
11	Carseats	Sales	Price, CompPrice	ShelveLoc
12	Carseats	Sales	Price, Population	ShelveLoc
13	Carseats	Sales	Price, Income	ShelveLoc
14	College_for_lab	Grad_Rate	Top10perc, F_Undergrad	Private
15	College_for_lab	Grad_Rate	Top25perc, F_Undergrad	Private
16	College_for_lab	Grad_Rate	Accept, Expend	Private
17	College_for_lab	Grad_Rate	Accept, Top10perc	Private
18	College_for_lab	Grad_Rate	Expend, Top25perc	Private
19	College_for_lab	Grad_Rate	Expend, P_Undergrad	Private
20	College_for_lab	Grad_Rate	Accept, F_Undergrad	Private

Источники

1. *James G., Witten D., Hastie T. and Tibshirani R.* An Introduction to Statistical Learning with Applications in R. URL: http://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/ISLR%20First%20Printing.pdf
2. Рашка С. Python и машинное обучение: крайне необходимое пособие по новейшей предсказательной аналитике, обязательное для более глубокого понимания методологии машинного обучения / пер. с англ. А.В. Логунова. – М.: ДМК Пресс, 2017. – 418 с.: ил.
3. Interpreting Log Transformations in a Linear Model / virginia.edu. URL: https://data.library.virginia.edu/interpreting-log-transformations-in-a-linear-model/
4. Python Timer Functions: Three Ways to Monitor Your Code / realpython.com. URL: https://realpython.com/python-timer/