

Дисциплина: Методы и технологии машинного обучения

Уровень подготовки: бакалавриат

Направление подготовки: 01.03.02 Прикладная математика и информатика

Семестр: осень 2021/2022

Лабораторная работа №1: Оценка точности модели с непрерывной зависимой переменной

В практических примерах ниже показано:

- как делить данные на выборки (обучающую и тестовую);
- как считать MSE: среднеквадратическую ошибку модели;
- как меняются MSE на тестовой и обучающей выборках с изменением гибкости (числа степеней свободы) модели.

Модели: сглаживающие сплайны.

Данные: сгенерированные.

Рассмотрим пример из лекции: как меняется поведение ошибок на тестовой и обучающей выборках при различном числе степеней свободы, если функция зависимости отклика Y от единственного признака X известна. Сгенерируем X и Y :

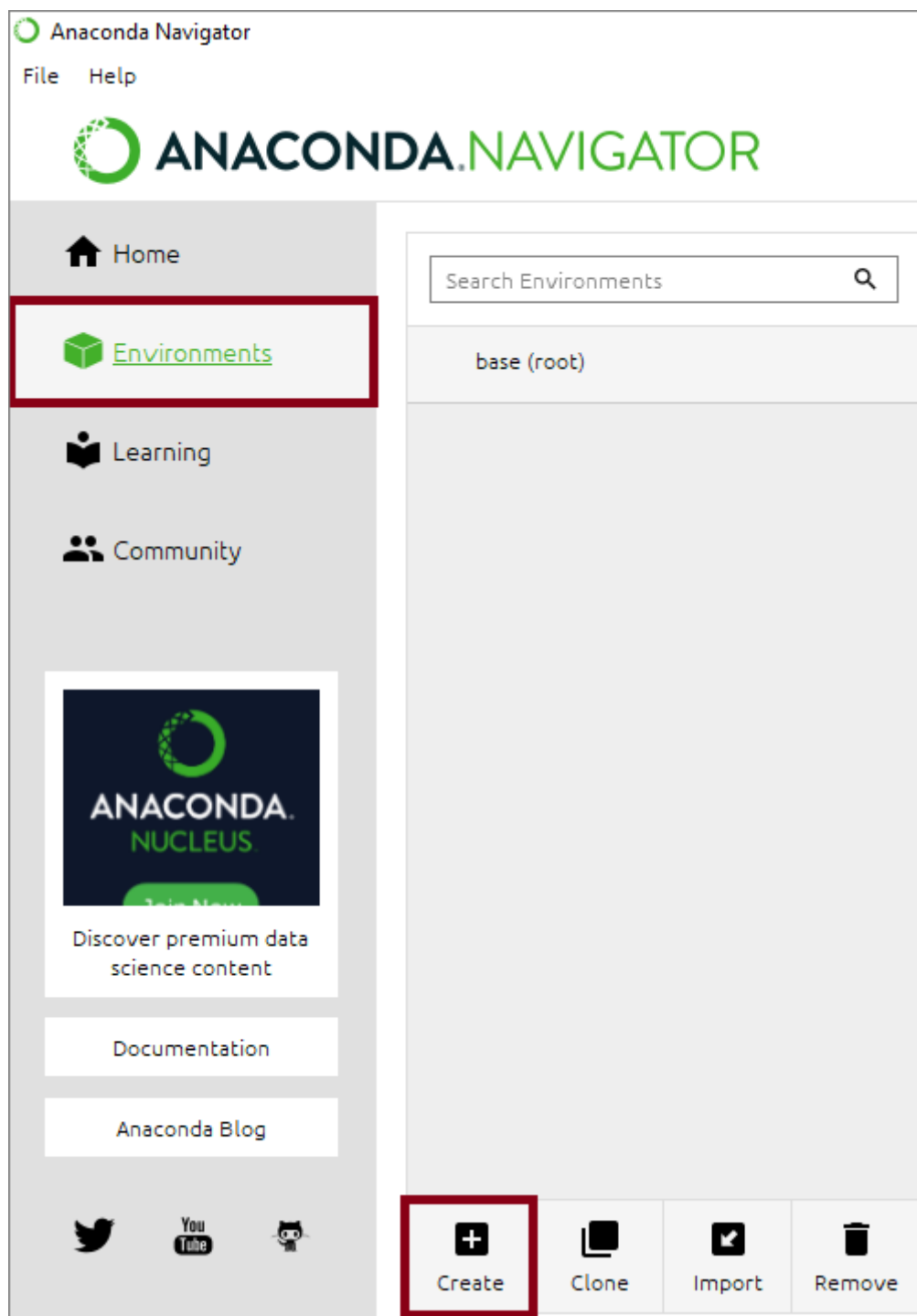
- $X \sim U(5, 105)$
- $Y = f(X) + \epsilon$, где $f(X) = 4 - 0.02X + 0.0055X^2 - 4.9 \cdot 10^{-5} \cdot X^3$; $\epsilon \sim N(0, 1)$.

Технические подробности

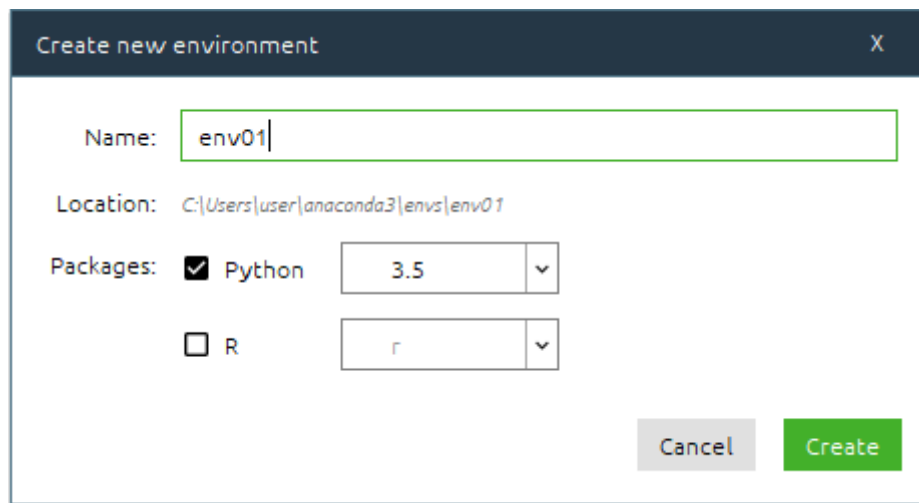
В данном скрипте мы используем для сглаживания функцию `smooth.spline()` из библиотеки языка статистической обработки данных R. Для того чтобы запускать функции R в Python нам нужен пакет `rpy2`, который не работает в версии Python 3.8; для него необходима версия 3.5. На этом примере мы научимся создавать в Anaconda новое рабочее окружение, устанавливая в него нужную версию Python и все необходимые для работы пакеты.

Шаг 1: создать в навигаторе новое рабочее окружение и сделать его активным

В меню Anaconda выбрать "Environments", затем нажать кнопку "Create" под списком доступных рабочих окружений.



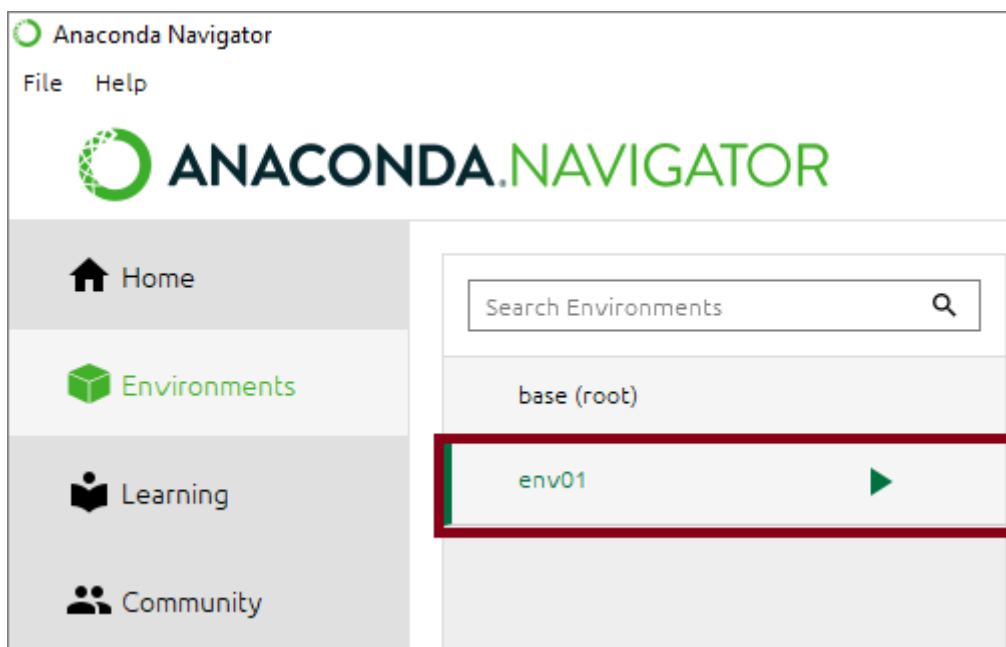
По умолчанию существует только окружение "base" с самой свежей версией Python. Назовём новое окружение "env01".



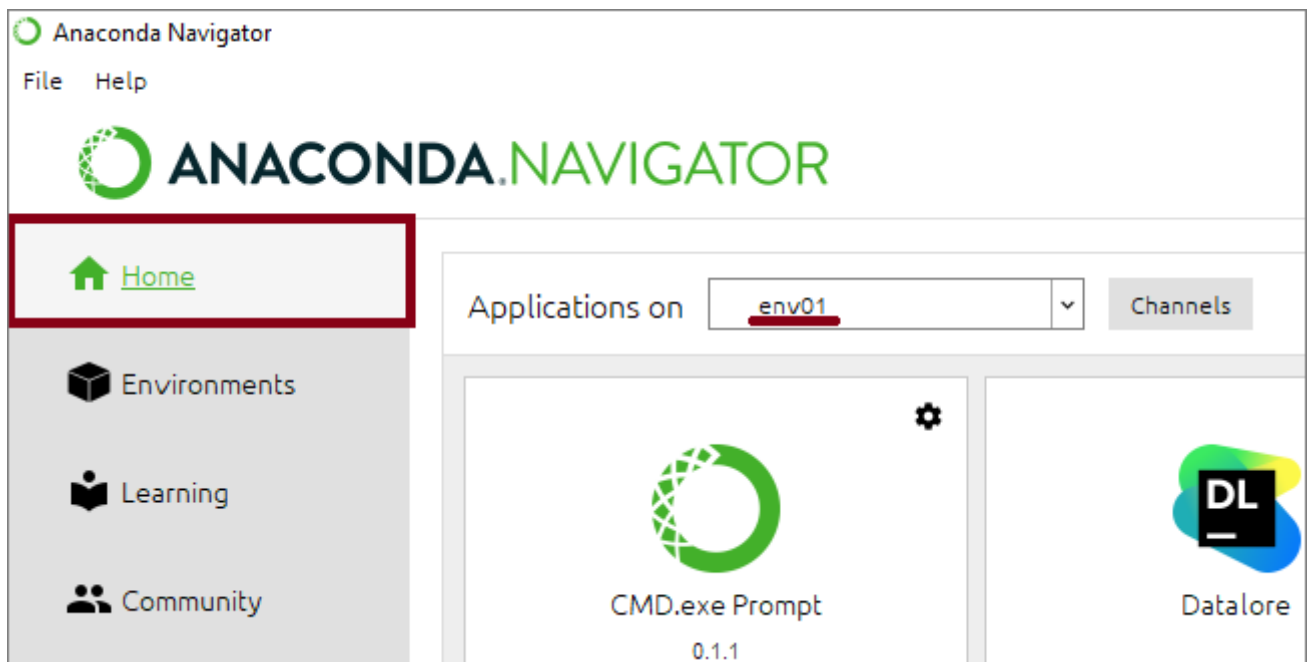
A dialog box titled "Create new environment" with a close button (X) in the top right corner. It contains the following fields and controls:

- Name:** A text input field containing "env01".
- Location:** A text field showing the path "C:\Users\user\anaconda3\envs\env01".
- Packages:** Two rows of controls. The first row has a checked checkbox for "Python" and a dropdown menu showing "3.5". The second row has an unchecked checkbox for "R" and a dropdown menu showing "r".
- Buttons:** "Cancel" and "Create" buttons at the bottom right.

Двойной щелчок по новому окружению в списке делает его активным.

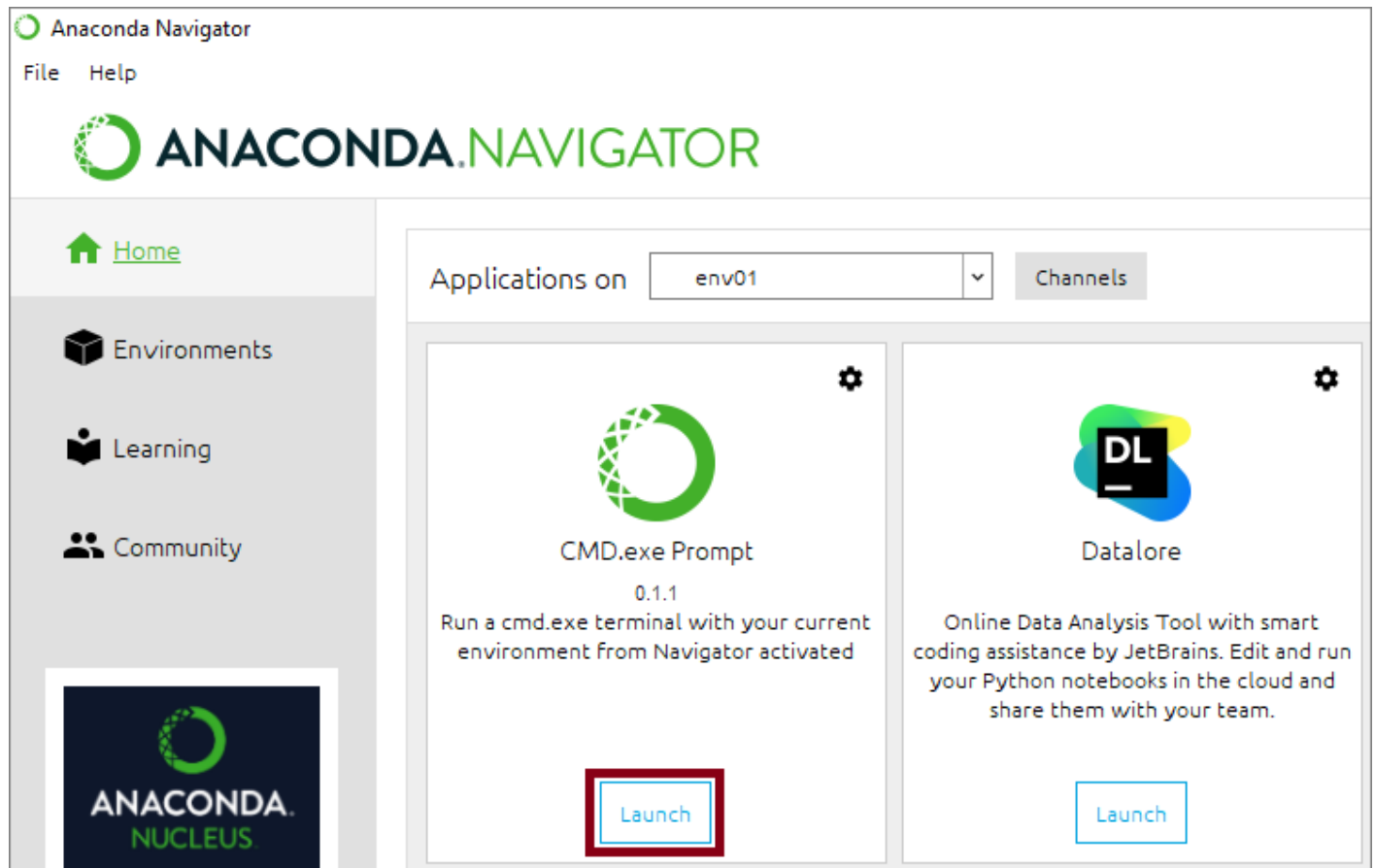


После чего следует вернуться в домашний раздел (пункт меню "Home"). Имя нового окружения появится над списком приложений.



Шаг 2: Установить необходимые пакеты

Для выполнения лабораторной нам понадобятся пакеты: `numpy` (для генерации случайных чисел), `matplotlib` (для построения графиков), `rpy2` (для использования функций из R), `pandas` (для работы со фреймами данных). Установим их через консоль, открыв приложение CMD.exe Prompt.



Чтобы установить пакет `numpy` через консоль, введём в открывшееся окно команду:

```
conda install numpy
```

```
C:\Windows\system32\cmd.exe - conda install numpy - conda install matplotlib - conda install pandas - conda install rpy2 - conda install scipy
(env01) C:\Users\user>conda install numpy
Collecting package metadata (current_repodata.json): done
Solving environment: failed with initial frozen solve. Retrying with flexible solve.
Solving environment: failed with repodata from current_repodata.json, will retry with next repodata source.
Collecting package metadata (repodata.json): done
Solving environment: done

## Package Plan ##

environment location: C:\Users\user\anaconda3\envs\env01

added / updated specs:
- numpy
```

В процессе нужно будет подтвердить установку пакетов вводом `y`.

```
C:\Windows\system32\cmd.exe - conda install numpy - conda install matplotlib - conda install pandas - conda install rpy2 - conda install scipy
Proceed ([y]/n)? y

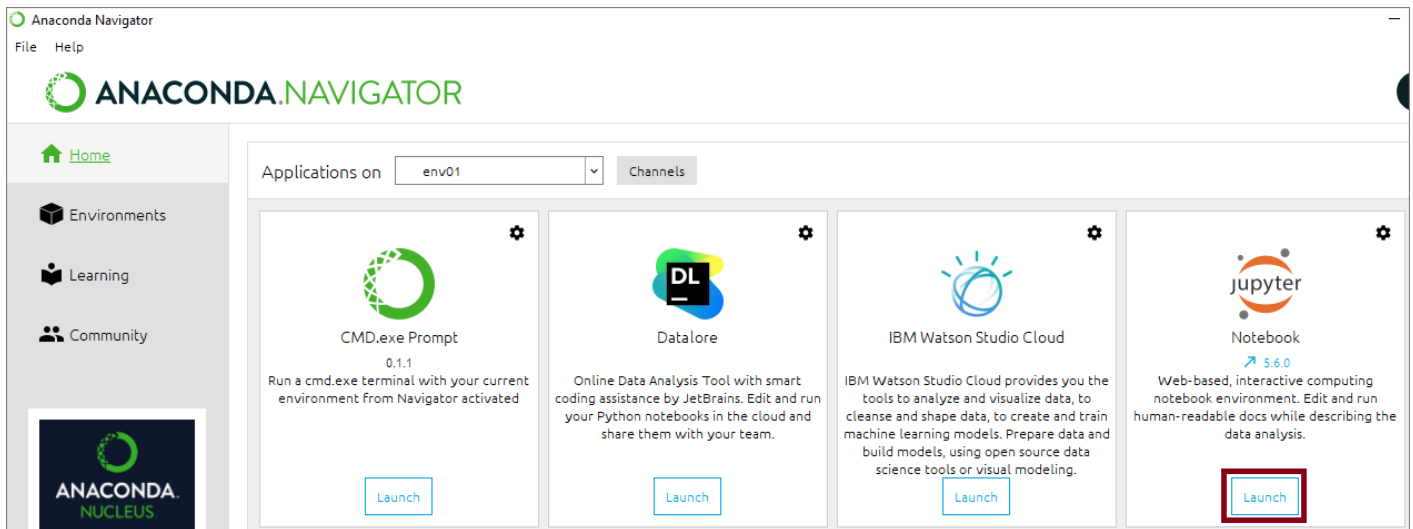
Downloading and Extracting Packages
numpy-base-1.15.2 | 3.2 MB | ##### | 100%
tbb4py-2018.0.5 | 70 KB | ##### | 100%
mkl-2018.0.3 | 112.6 MB | ##### | 100%
mkl_fft-1.0.6 | 103 KB | ##### | 100%
numpy-1.15.2 | 47 KB | ##### | 100%
intel-openmp-2021.3. | 2.0 MB | ##### | 100%
tbb-2021.3.0 | 141 KB | ##### | 100%
mkl_random-1.0.1 | 223 KB | ##### | 100%
Preparing transaction: done
Verifying transaction: done
Executing transaction: done

(env01) C:\Users\user>conda install matplotlib
Collecting package metadata (current_repodata.json): done
Solving environment: failed with initial frozen solve. Retrying with flexible solve.
Solving environment: failed with repodata from current_repodata.json, will retry with next repodata source.
Collecting package metadata (repodata.json): done
Solving environment: done
```

Остальные пакеты устанавливаются аналогично.

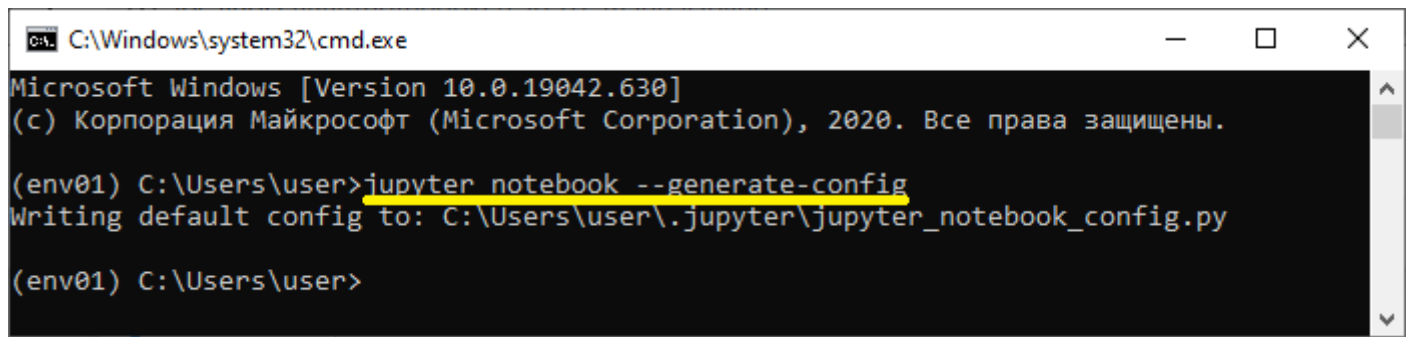
Шаг 3: Запуск jupyter

Откроем интерактивный редактор скриптов "jupyter":



Редактор открывается в системном браузере по умолчанию, в директории пользователя. Удобнее установить другую директорию по умолчанию, чтобы видеть не все файлы, а только нужные скрипты. Вернёмся в окно консоли и запустим команду: `jupyter notebook --generate-config`, чтобы

сгенерировать скрипт с настройками.



```
C:\Windows\system32\cmd.exe
Microsoft Windows [Version 10.0.19042.630]
(c) Корпорация Майкрософт (Microsoft Corporation), 2020. Все права защищены.

(env01) C:\Users\user>jupyter notebook --generate-config
Writing default config to: C:\Users\user\.jupyter\jupyter_notebook_config.py

(env01) C:\Users\user>
```

Найдём сгенерированный скрипт в папке, указанной в консоли после слов `Writing default config to` . Этот файл можно открыть в блокноте. Заменяем строку:

```
#c.NotebookApp.notebook_dir = ''
```

на строку:

```
c.NotebookApp.notebook_dir = ' <папка с документами пользователя> \Py-work'
```

Здесь необходимо заменить "<папка с документами пользователя>" на расположение папки с документами на рабочем компьютере. Сохраним файл с настройками и перезапустим jupyter (кнопка "Quit" в меню "File" в интерфейсе jupyter)

```
In [1]: # загрузка пакетов
import numpy as np
import random
```

```

In [2]: # задаём ядро генератора случайных чисел (внимание: не глобально)
np.random.seed(10111)

# всего наблюдений, доля обучающей выборки
n_all, train_percent = 60, 0.85

# параметры распределения X
x_min, x_max = 5, 105

# генерируем X
x = np.random.uniform(x_min, x_max, n_all)

# генерируем случайный шум
mu, sigma = 0, 1
res = np.random.normal(mu, sigma, n_all)

# отбираем наблюдения в обучающую выборку
in_train = np.random.choice(np.arange(n_all),
                             int(n_all*train_percent), replace=False)

# истинная функция взаимосвязи
def y_func (x) :
    return (4 - 2e-02*x + 5.5e-03*x**2 - 4.9e-05*x**3)

# для графика истинной взаимосвязи
x_line = np.linspace(x_min, x_max, n_all)
y_line = y_func(x_line)

# фактические значения y (с шумом)
y = y_func(x) + res

# создаём векторы с данными для построения графиков
# наблюдения на обучающей выборке
x_train = x[in_train]
y_train = y[in_train]

# наблюдения на тестовой выборке
x_test = np.delete(x, in_train)
y_test = np.delete(y, in_train)

```

Строим графики

Изобразим исходные данные на графике.

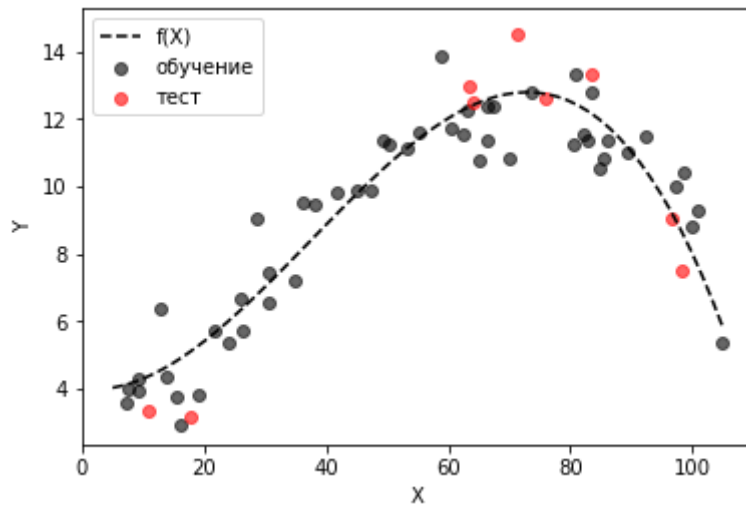
```

In [3]: # загрузка пакетов
import matplotlib.pyplot as plt

```



```
In [4]: # график 1: исходные данные
# обучающая выборка
plt.scatter(x_train, y_train, c='black', label='обучение', alpha=0.6)
# тестовая выборка
plt.scatter(x_test, y_test, c='red', label='тест', alpha=0.6)
# истинная функция взаимосвязи
plt.plot(x_line, y_line, c='black', linestyle='dashed', label='f(X)')
# подписи осей
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Y')
# легенда
plt.legend()
plt.show()
```



Обучаем модели и оцениваем их точность

В качестве модели используем сплайны со степенями свободы от 2 (прямая) до 40 (количество узлов равно 2/3 наблюдений). Строим модели с различным количеством степеней свободы и в каждом случае считаем среднеквадратическую ошибку модели на обучающей и тестовой выборках.

```
In [5]: # загрузка пакетов
from pandas import DataFrame
import rpy2.robj as robjects
```

```

In [6]: # модель натурального сплайна с заданным количеством узлов (df)
my_df = 38

# сохраняем индексы отсортированного по возрастанию x из обучающей выборки
и
x_sorted_index = sorted(range(len(x_train)), key=lambda k: x_train[k])

# равноотстоящие координаты по X для прорисовки сглаженной кривой
x_train_lin = np.linspace(min(x_train), max(x_train), num=300,
                           endpoint=True)

# создаём из данных объекты, понятные R
r_x = robjects.FloatVector(x_train)
r_y = robjects.FloatVector(y_train)

# импортируем нужную функцию из R
r_smooth_spline = robjects.r['smooth.spline']

# строим сглаживающий сплайн
fit = r_smooth_spline(x=r_x, y=r_y, df=my_df)

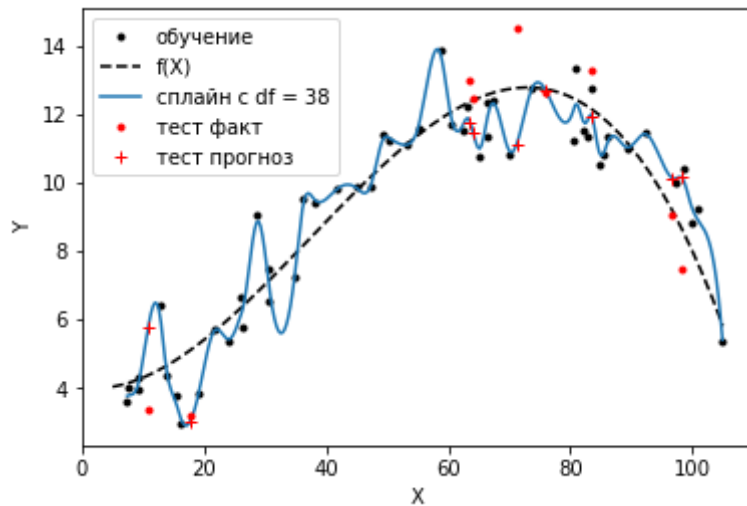
# делаем прогнозы
y_hat_train = np.array(robjects.r['predict'](fit,
      robjects.FloatVector(x_train)).rx2('y'))
y_hat_test = np.array(robjects.r['predict'](fit,
      robjects.FloatVector(x_test)).rx2('y'))
y_lin_plot = np.array(robjects.r['predict'](fit,
      robjects.FloatVector(x_train_lin)).rx2('y'))

# строим график
plt.plot(x_train, y_train, color='black', ls='', marker='.',
      label='обучение')
plt.plot(x_line, y_line, color='black', ls='dashed', marker='',
      label='f(X)')
plt.plot(x_train_lin, y_lin_plot, marker='',
      label='сплайн с df = %s' % my_df)
plt.plot(x_test, y_test, color='red', ls='', marker='.',
      label='тест факт')
plt.plot(x_test, y_hat_test, color='red', ls='', marker='+',
      label='тест прогноз')

# подписи осей
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Y')
# легенда
plt.legend(loc='best')

# считаем MSE
MSE_fit = [sum((y_train - y_hat_train)**2) / len(y_train),
      sum((y_test - y_hat_test)**2) / len(y_test)]

```



Ошибки на обучающей и тестовой выборках составили соответственно:

```
In [7]: # выводим MSE с округлением
np.around(MSE_fit, 2)
```

```
Out[7]: array([0.11, 3.32])
```

```
In [8]: # Теперь строим модели с df от 2 до 40 #####
###

# максимальное число степеней свободы для модели сплайна
max_df = 40

# фрейм данных для сохранения MSE на обучающей и на тестовой
# при разных степенях свободы
MSE_all_dfs = [[0] * 2 for i in range(2, max_df+1)]
MSE_all_dfs = DataFrame(MSE_all_dfs, columns=['MSE_train', 'MSE_test'],
                        index=list(range(2, max_df+1)))

# заполняем фрейм
for i_df in range(2, max_df+1) :

    # обучаем модель
    fit = r_smooth_spline(x=r_x, y=r_y, df=i_df)

    # прогноз на обучающей выборке
    y_train_hat = np.array(robjests.r['predict'](fit,
        robjests.FloatVector(x_train)).rx2('y'))

    # прогноз на тестовой выборке
    y_test_hat = np.array(robjests.r['predict'](fit,
        robjests.FloatVector(x_test)).rx2('y'))

    # считаем MSE
    MSE_all_dfs.loc[i_df, 'MSE_train'] = \
        sum((y_train - y_train_hat)**2) / len(y_train_hat)
    MSE_all_dfs.loc[i_df, 'MSE_test'] = \
        sum((y_test - y_test_hat)**2) / len(y_test_hat)
```

Минимум MSE на тестовой выборке достигается при числе степеней свободы:

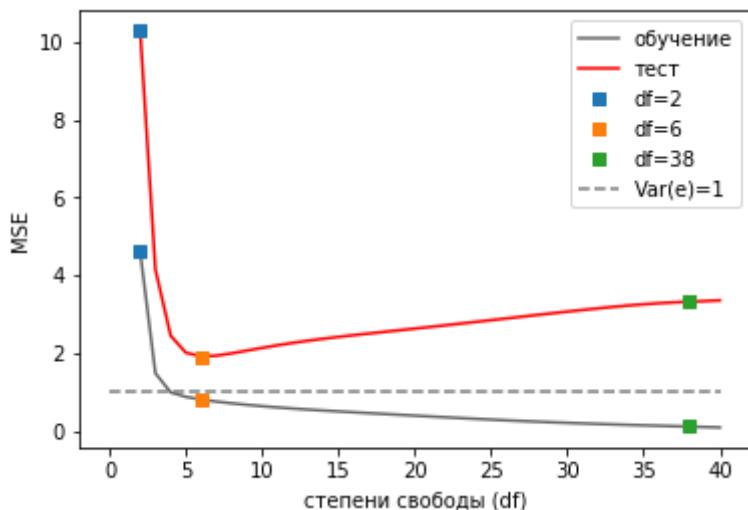
```
In [9]: # фильтруем таблицу по минимальной MSE на тестовой выборке
MSE_all_dfs[MSE_all_dfs['MSE_test'] == min(MSE_all_dfs['MSE_test'])]
```

Out[9]:

	MSE_train	MSE_test
6	0.805512	1.914443

Изобразим на графике динамику MSE на обучающей и тестовой выборках в зависимости от степеней свободы модели.

```
In [10]: # график изменения MSE с увеличением df
plt.plot(MSE_all_dfs.index, MSE_all_dfs['MSE_train'], color='dimgrey',
         marker='', label='обучение')
plt.plot(MSE_all_dfs.index, MSE_all_dfs['MSE_test'], color='red',
         marker='', label='тест')
plt.plot([2, 2], [MSE_all_dfs.iloc[0]['MSE_train'],
                  MSE_all_dfs.iloc[0]['MSE_test']],
         ls='', marker='s', label='df=2')
plt.plot([6, 6], [MSE_all_dfs.iloc[4]['MSE_train'],
                  MSE_all_dfs.iloc[4]['MSE_test']],
         ls='', marker='s', label='df=6')
plt.plot([38, 38], [MSE_all_dfs.iloc[36]['MSE_train'],
                    MSE_all_dfs.iloc[36]['MSE_test']],
         ls='', marker='s', label='df=38')
plt.hlines(1, 0, 40, linestyles='dashed', color='grey', label='Var(e)=1')
# подписи осей
plt.xlabel('степени свободы (df)')
plt.ylabel('MSE')
# легенда
plt.legend(loc='best')
plt.show()
```



Кривая MSE на обучающей выборке стабильно снижается с ростом узлов сплайна. Чем больше наблюдений, через которые прошёл сплайн, тем точнее модель. Это говорит о переобучении. Лучшую модель следуют выбирать по минимуму на кривой MSE на тестовой выборке.

Упражнение 1

1. Завести аккаунт на github.com.
2. **Задача 1.** На данных своего варианта (см. второй столбец таблицы с вариантами) повторить расчёты и построить графики из первой лабораторной. Пояснить выбор наилучшего количества степеней свободы.
3. **Задача 2.** Повторить расчёты, меняя характеристики согласно своему варианту (см. последний столбец таблицы с вариантами). Проанализировать, как меняется MSE при изменении характеристик.
4. Блокнот jupyter с решением разместить github.com, выслать ссылку на репозиторий преподавателю. В репозитории должны лежать:
 5. файл README.md с кратким описанием содержимого репозитория и с ответами на вопросы задач;
 6. блокнот jupyter (файл .ipynb) с решением.

В отчёте с решением должны присутствовать, кроме блоков кода, вводный текст с постановкой задачи и анализ динамики MSE на тестовой и обучающей выборках в вашем варианте.

Варианты

Все условия, не упомянутые в таблице (величина выборки, закон распределения X и т.д.) брать из примеров первой лабораторной.

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 используйте номер своего варианта.

Номер варианта	Функция для задачи 1	Характеристики для задачи 2
1	$f(X) = 13 + 3.5 \cdot \sin\left(\frac{x-30}{9}\right)$	$n_{all} = 600, n_{all} = 550, n_{all} = 500$
2	$f(X) = 17 + 0.02 \cdot x - 0.005 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$	$train_percent = 0.9,$ $train_percent = 0.85,$ $train_percent = 0.8$
3	$f(X) = 19 - 0.05 \cdot x$	$sigma = 2, sigma = 3, sigma = 4$
4	$f(X) = 11 + 3.5 \cdot \sin\left(\frac{x-30}{9}\right)$	$train_percent = 0.3,$ $train_percent = 0.25,$ $train_percent = 0.2$
5	$f(X) = 15 + 0.02 \cdot x - 0.005 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$	$sigma = 0.5, sigma = 1, sigma = 1.5$
6	$f(X) = 21 - 0.05 \cdot x$	$n_{all} = 450, n_{all} = 400, n_{all} = 350$
7	$f(X) = 5 + 3.5 \cdot \sin\left(\frac{x-30}{9}\right)$	$sigma = 5.5, sigma = 6, sigma = 6.5$

$$8 \quad f(X) = 15 + 0.02 \cdot x - 0.005 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$$

$$n_{all} = 300, n_{all} = 250, n_{all} = 200$$

$$9 \quad f(X) = 20 - 0.05 \cdot x$$

$$\begin{aligned} \text{train_percent} &= 0.5, \\ \text{train_percent} &= 0.45, \\ \text{train_percent} &= 0.4 \end{aligned}$$

$$10 \quad f(X) = 6 + 3.5 \cdot \cos\left(\frac{x-30}{12}\right)$$

$$n_{all} = 150, n_{all} = 100, n_{all} = 50$$

$$11 \quad f(X) = 25 + 0.02 \cdot x - 0.003 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$$

$$\begin{aligned} \text{train_percent} &= 0.2, \\ \text{train_percent} &= 0.15, \\ \text{train_percent} &= 0.1 \end{aligned}$$

$$12 \quad f(X) = 18 - 0.1 \cdot x$$

$$\sigma = 2.5, \sigma = 2, \sigma = 1.5$$

$$13 \quad f(X) = 25 + 0.02 \cdot x - 0.003 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$$

$$n_{all} = 600, n_{all} = 550, n_{all} = 500$$

$$14 \quad f(X) = 7 + 3.5 \cdot \cos\left(\frac{x-30}{12}\right)$$

$$\begin{aligned} \text{train_percent} &= 0.9, \\ \text{train_percent} &= 0.85, \\ \text{train_percent} &= 0.8 \end{aligned}$$

$$15 \quad f(X) = 16 - 0.1 \cdot x$$

$$\sigma = 2, \sigma = 3, \sigma = 4$$

$$16 \quad f(X) = 25 + 0.02 \cdot x - 0.003 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$$

$$\begin{aligned} \text{train_percent} &= 0.3, \\ \text{train_percent} &= 0.25, \\ \text{train_percent} &= 0.2 \end{aligned}$$

$$17 \quad f(X) = 9 + 3.5 \cdot \cos\left(\frac{x-30}{12}\right)$$

$$n_{all} = 450, n_{all} = 400, n_{all} = 350$$

$$18 \quad f(X) = 12 + 3.5 \cdot \sin\left(\frac{x-30}{9}\right)$$

$$\sigma = 6, \sigma = 7, \sigma = 8$$

$$19 \quad f(X) = 15 + 0.02 \cdot x - 0.005 \cdot (x - 45)^2 + 0.00006 \cdot (x - 54)^3$$

$$\sigma = 6, \sigma = 7, \sigma = 8$$

$$20 \quad f(X) = 14 - 0.05 \cdot x$$

$$n_{all} = 850, n_{all} = 900, n_{all} = 950$$

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> (https://drive.google.com/file/d/15PdWDMf9hkfP8mrCzqI_cNiX2eckLDRw/view?usp=sharing).
2. Python SciPy UnivariateSpline vs R smooth.spline / stackoverflow.com. URL: <https://stackoverflow.com/questions/56667657/python-scipy-univariatespline-vs-r-smooth-spline> (<https://stackoverflow.com/questions/56667657/python-scipy-univariatespline-vs-r-smooth-spline>).
3. Jupyter Notebook для начинающих: учебник / webdevblog.ru <https://webdevblog.ru/jupyter-notebook-dlya-nachinajushhih-uchebnik/> (<https://webdevblog.ru/jupyter-notebook-dlya-nachinajushhih-uchebnik/>).