`Дисциплина: Методы и технологии машинного обучения`

`Уровень подготовки: бакалавриат`

`Направление подготовки: 01.03.02 Прикладная математика и информатика`

`Семестр: осень 2021/2022`

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

# расширение watermark для вывода информации о версиях пакетов
#  https://github.com/rasbt/watermark
%load_ext watermark
```

# Лабораторная работа №5: Методы, основанные на деревьях решений. Регрессионные деревья. Деревья классификации. Случайный лес. Бустинг.

В практических примерах ниже показано:

- как делать перекодировку признаков в номинальной и порядковой шкалах
- как вырастить дерево и сделать обрезку его ветвей
- как настроить модель бэггинга
- как вырастить случайный лес
- как настроить модель бустинга на деревьях решений
- как подбирать настроечные параметры моделей методом сеточного поиска

Точность всех моделей оценивается методом перекрёстной проверки по 5 блокам.

*Модели*: дерево классификации, бэггинг, случайный лес, бустинг, дерево регрессии
*Данные*: `in-vehicle-coupon-recommendation.csv`. Источник: сайт Калифорнийского университета в Ирвине

In [2]:
```
# выводим информацию о версиях python и пакетов
%watermark -a "aksyuk@github.com" -d -v -p numpy,pandas,matplotlib,sklearn
```

```
Author: aksyuk@github.com

Python implementation: CPython
Python version       : 3.8.8
IPython version      : 7.22.0

numpy     : 1.20.1
pandas    : 1.2.4
matplotlib: 3.3.4
sklearn   : 0.24.1
```

# Указания к выполнению

## Загружаем пакеты

In [3]:

```
# 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
# загрузка файлов по URL
import urllib
# проверка существования файла на диске
from pathlib import Path
# для форматирования результатов с помощью Markdown
from IPython.display import Markdown, display
# перекодировка категориальных переменных
from sklearn.preprocessing import OrdinalEncoder, OneHotEncoder
# хи-квадрат тест на независимость по таблице сопряжённости
from scipy.stats import chi2_contingency
#  для таймера
import time

# загрузка пакетов: данные ---------------------------------------------
from sklearn import datasets

# загрузка пакетов: модели ---------------------------------------------
#  дерево классификации
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, export_text, plot_tree
# перекрёстная проверка и метод проверочной выборки
from sklearn.model_selection import cross_val_score, train_test_split
# для перекрёстной проверки и сеточного поиска
from sklearn.model_selection import KFold, GridSearchCV
# бэггинг
from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
# случайный лес
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
# бустинг
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
#  сводка по точности классификации
from sklearn.metrics import classification_report
```

In [4]:

```
# 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")
```

In [5]:

```
# функция форматирования результатов с использованием Markdown
def printmd(string):
    display(Markdown(string))

# функции для попарной конкатенации элементов двух списков
concat_func_md = lambda x, y: '`' + str(x) + "`:    " + str(
concat_func = lambda x, y: str(x) + ' ' * 4 + str(y)

# функция, которая строит график важности признаков в модели случайного леса
#  источник: https://www.analyseup.com/learn-python-for-data-science/python-rand
def plot_feature_importance(importance, names, model_type) :
    #Create arrays from feature importance and feature names
    feature_importance = np.array(importance)
    feature_names = np.array(names)

    #Create a DataFrame using a Dictionary
    data={'feature_names':feature_names,'feature_importance':feature_importance}
    fi_df = pd.DataFrame(data)

    #Sort the DataFrame in order decreasing feature importance
    fi_df.sort_values(by=['feature_importance'], ascending=False,
                      inplace=True)

    #Define size of bar plot
    plt.figure(figsize=(10,8))
    #Plot Searborn bar chart
    sns.barplot(x=fi_df['feature_importance'], y=fi_df['feature_names'])
    #Add chart labels
    plt.title('Важность признаков в модели: ' + model_type)
    plt.xlabel('Важность признака')
    plt.ylabel('')
```

## Загружаем данные

Набор данных можно загрузить напрямую по ссылке: https://raw.githubusercontent.com/aksyuk/MTML/main/Labs/data/in-vehicle-coupon-recommendation.csv. Справочник к данным доступен по адресу: https://github.com/aksyuk/MTML/blob/main/Labs/data/CodeBook_in-vehicle-coupon-recommendation.md.

Загружаем данные во фрейм и выясняем их размерность. В таблице много строк, поэтому для экономии времени загрузку сделаем в два шага: сначала скачаем таблицу и сохраним в папку `'./data'`, затем прочитаем её во фрейм. Перед скачиванием проверим, нет ли уже такого файла в папке с данными.

In [6]:

```
# путь к локальному файлу для сохранения
localFilePath = './data/in-vehicle-coupon-recommendation.csv'

# проверяем, нет ли уже такого файла на диске
if not Path(localFilePath):
    # загружаем таблицу и превращаем её во фрейм
    fileURL = 'https://raw.githubusercontent.com/aksyuk/MTML/main/Labs/data/in-v
    # скачиваем
```

```
    urllib.request.urlretrieve(fileURL, localFilePath)
    print('Файл', localFilePath,'успешно загружен с адреса ', fileURL, '\n')
else:
    print('Файл', localFilePath,'уже есть на диске\n')

# читаем
DF_raw = pd.read_csv(localFilePath)

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

```
Файл ./data/in-vehicle-coupon-recommendation.csv уже есть на диске

Число строк и столбцов в наборе данных:
 (12684, 26)
```

In [7]:

```
# типы столбцов
DF_raw.dtypes
```

Out[7]:

```
destination             object
passanger               object
weather                 object
temperature              int64
time                    object
coupon                  object
expiration              object
gender                  object
age                     object
maritalStatus           object
has_children             int64
education               object
occupation              object
income                  object
car                     object
Bar                     object
CoffeeHouse             object
CarryAway               object
RestaurantLessThan20    object
Restaurant20To50        object
toCoupon_GEQ5min         int64
toCoupon_GEQ15min        int64
toCoupon_GEQ25min        int64
direction_same           int64
direction_opp            int64
Y                        int64
dtype: object
```

Проблема в том, что, судя по справочнику к данным, все столбцы таблицы являются категориальными. Однако некоторые (бинарные) воспринимаются как `int`, а остальные как `object`. Посмотрим на столбцы типа `int`.

In [8]:

```
# первые 7 строк столбцов типа int64
DF_raw.loc[:, DF_raw.columns[DF_raw.dtypes == 'int64']].head(7)
```

Out[8]:

| | temperature | has_children | toCoupon_GEQ5min | toCoupon_GEQ15min | toCoupon_GEQ25min | direction_ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 55 | 1 | 1 | 0 | 0 | |
| **1** | 80 | 1 | 1 | 0 | 0 | |

| | temperature | has_children | toCoupon_GEQ5min | toCoupon_GEQ15min | toCoupon_GEQ25min | direction_ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **2** | 80 | 1 | 1 | 1 | 0 | |
| **3** | 80 | 1 | 1 | 1 | 0 | |
| **4** | 80 | 1 | 1 | 1 | 0 | |
| **5** | 80 | 1 | 1 | 1 | 0 | |
| **6** | 55 | 1 | 1 | 1 | 0 | |

Функция построения дерева классификации `DecisionTreeClassifier()` требует числовых порядковых значений переменных. Видно, что столбцы типа `int64` либо порядковые ( `temperature` ), либо бинарные (все остальные), их преобразовывать нет необходимости. А вот столбцы типа `object` придётся кодировать вручную.
При этом на этапе предварительного анализа данных нам удобнее будет работать с исходными категориальными столбцами. Поэтому сейчас просто изменим тип столбцов `object` на `category` .

In [9]:
```
# меняем тип столбцов на категориальные
for col in DF_raw.columns[DF_raw.dtypes == 'object'] :
    DF_raw[col] = DF_raw[col].astype('category')
```

Отложим 30% наблюдений для прогноза.

In [10]:
```
# наблюдения для моделирования
DF = DF_raw.sample(frac=0.7, random_state=my_seed)
# отложенные наблюдения
DF_predict = DF_raw.drop(DF.index)
```

# Предварительный анализ данных

## Описательные статистики

Стандартный подсчёт статистик с помощью фунции `describe()` бесполезен для категориальных столбцов, поэтому рассчитаем частоты категорий по каждому столбцу. Для вывода отчёта воспользуемся форматированием на Markdown.

In [11]:
```
# считаем частоты по столбцам, учитывая пропуски
for col in DF.columns:
    freq_col = DF[col].value_counts(dropna=False)
    str_freqs = np.around(freq_col / sum(freq_col), 3).astype(str)
    str_names = freq_col.index.values.astype(str)
    # для вывода в html
    # printmd('**' + col + '**</br>' +
    #         '</br>'.join(list(map(concat_func_md, str_names, str_freqs))))
    # для сохранения в pdf
    print('\n', col, '\n',
          '\n'.join(list(map(concat_func, str_names, str_freqs))))
```

```
 destination
 No Urgent Place    0.496
Home    0.256
Work    0.248

 passanger
 Alone    0.577
Friend(s)    0.261
Partner    0.084
Kid(s)    0.078

 weather
 Sunny    0.793
Snowy    0.111
Rainy    0.097

 temperature
 80    0.514
55    0.303
30    0.183

 time
 6PM    0.254
7AM    0.248
10AM    0.181
2PM    0.161
10PM    0.156

 coupon
 Coffee House    0.316
Restaurant(<20)    0.221
Carry out & Take away    0.189
Bar    0.158
Restaurant(20-50)    0.115

 expiration
 1d    0.559
2h    0.441

 gender
 Female    0.513
Male    0.487

 age
 21    0.211
26    0.204
31    0.158
50plus    0.142
36    0.103
41    0.086
46    0.053
below21    0.044

 maritalStatus
 Married partner    0.402
Single    0.377
Unmarried partner    0.168
Divorced    0.041
Widowed    0.011

 has_children
 0    0.587
1    0.413

 education
```

```
 Some college - no degree    0.341
Bachelors degree    0.337
Graduate degree (Masters or Doctorate)    0.147
Associates degree    0.094
High School Graduate    0.074
Some High School    0.007

 occupation
 Unemployed    0.151
Student    0.124
Computer & Mathematical    0.108
Sales & Related    0.085
Education&Training&Library    0.074
Management    0.064
Arts Design Entertainment Sports & Media    0.052
Office & Administrative Support    0.05
Business & Financial    0.042
Retired    0.04
Food Preparation & Serving Related    0.025
Healthcare Support    0.02
Healthcare Practitioners & Technical    0.019
Community & Social Services    0.019
Legal    0.017
Transportation & Material Moving    0.016
Protective Service    0.015
Architecture & Engineering    0.015
Life Physical Social Science    0.013
Personal Care & Service    0.013
Construction & Extraction    0.011
Installation Maintenance & Repair    0.011
Production Occupations    0.008
Building & Grounds Cleaning & Maintenance    0.004
Farming Fishing & Forestry    0.003

 income
 $25000 - $37499    0.16
$12500 - $24999    0.144
$37500 - $49999    0.143
$100000 or More    0.134
$50000 - $62499    0.128
Less than $12500    0.086
$87500 - $99999    0.072
$62500 - $74999    0.067
$75000 - $87499    0.066

 car
 nan    0.991
do not drive    0.002
Mazda5    0.002
Car that is too old to install Onstar :D    0.002
crossover    0.002
Scooter and motorcycle    0.002

 Bar
 never    0.413
less1    0.27
1~3    0.192
4~8    0.088
gt8    0.03
nan    0.008

 CoffeeHouse
 less1    0.268
1~3    0.256
never    0.234
```

```
4~8    0.135
gt8    0.09
nan    0.017

 CarryAway
 1~3    0.37
4~8    0.335
less1    0.145
gt8    0.126
nan    0.012
never    0.012

 RestaurantLessThan20
 1~3    0.425
4~8    0.284
less1    0.164
gt8    0.099
never    0.018
nan    0.011

 Restaurant20To50
 less1    0.478
1~3    0.26
never    0.17
4~8    0.057
gt8    0.021
nan    0.014

 toCoupon_GEQ5min
 1    1.0

 toCoupon_GEQ15min
 1    0.564
0    0.436

 toCoupon_GEQ25min
 0    0.883
1    0.117

 direction_same
 0    0.784
1    0.216

 direction_opp
 1    0.784
0    0.216

 Y
 1    0.568
0    0.432
```

In [12]:
```
str_freqs.astype(str)
```

Out[12]:
```
1    0.568
0    0.432
Name: Y, dtype: object
```

Обратим внимание на столбцы `car` и `toCoupon_GEQ5min`, которые есть в таблице, но отсутствовали в справочнике к данным. В первом (тип автомобиля) пропущено 99,1% наблюдений, во втором (до ресторана/кофейни, в которую выдан купон, более 5 минут езды) значения во всех наблюдениях одинаковы. Уберём эти столбцы из обучающих и отложенных данных.

In [13]:
```
# выбрасываем стобцы с большинством пропусков или с нулевой дисперсией
#  из обучающей выборки
DF = DF.drop(['car', 'toCoupon_GEQ5min'], axis=1)
#  и из отложенных наблюдений
DF_predict = DF_predict.drop(['car', 'toCoupon_GEQ5min'], axis=1)
```

Ещё раз оценим количество пропусков.

In [14]:
```
# считаем пропуски в столбцах, выводим ненулевые значения
nas = DF.isna().sum()
nas = np.around(nas / DF.shape[0], 3)
nas[nas > 0]
```

Out[14]:
```
Bar                   0.008
CoffeeHouse           0.017
CarryAway             0.012
RestaurantLessThan20  0.011
Restaurant20To50      0.014
dtype: float64
```

Подсчитаем, сколько наблюдений мы потеряем, если выбросим все строки хотя бы с одним пропуском.

In [15]:
```
na_rows = sum([True for idx, row in DF.iterrows() if any(row.isnull())])
print('Из-за пропусков пропадает ', na_rows, ' строк (',
      np.around(na_rows / DF.shape[0] * 100, 1), '%)', sep='')
```

```
Из-за пропусков пропадает 419 строк (4.7%)
```

Выводы по описательным статистикам: доли классов ( `Y` ) сопоставимы, наибольшее количество категорий у объясняющей переменной `occupation` . Строки с пропусками составляют не более 5%, поэтому мы уберём их из обучающей выборки.

In [16]:
```
# выкидываем пропуски из обучащей
DF = DF.dropna()
DF.shape
```

Out[16]:
```
(8460, 24)
```

In [17]:
```
# выкидываем пропуски из отложенных наблюдений
DF_predict = DF_predict.dropna()
DF_predict.shape
```

Out[17]:
```
(3619, 24)
```

# Распределение предикторов внутри классов по зависимой переменной

Все объясняющие переменные являются категориальными, поэтому оценивать их связь с зависимой переменной с помощью корреляционной матрицы некорректно. Вместо этого можно воспользоваться критерием согласия Хи-квадрат, который рассчитывается по таблице

сопряжённости. Нулевая гипотеза теста: распределение долей в таблице сопряжённости случайно, т.е. два показателя независимы друг от друга.
Проведём тест для всех пар "объясняющая переменная" – "зависимая переменная" и выведем те пары, для которых соответствующее критерию p-значение больше 0.05 (т.е. нулевая гипотеза принимается, переменные независимы).

In [18]:
```
for col in DF.columns[:24] :
    con_tab = pd.crosstab(DF[col], DF['Y'])
    c, p, dof, expected = chi2_contingency(con_tab)
    if p > 0.05 :
        print(col, 'и Y',
              '\nH_0: переменные распределены независимо друг от друга',
              '\nP-значение:', np.around(p, 4))
```

```
direction_same и Y
H_0: переменные распределены независимо друг от друга
P-значение: 0.1525
direction_opp и Y
H_0: переменные распределены независимо друг от друга
P-значение: 0.1525
```

Интересный результат: полное совпадение p-значений – объясняется тем, что на самом деле `direction_same` и `direction_opp` противоположны друг другу. Связь между ними функциональная: если направление на ресторан/кофейню, в который предлагается купон, не совпадает с направлением на исходное место назначения ( `direction_same == 0` ), то оно противоположно ( `direction_opp == 1` ), и наоборот. Поэтому в модель имеет смысл включать только одну из этих переменных.

In [19]:
```
# исключаем direction_opp
#  из обучающей выборки
DF = DF.drop(['direction_opp'], axis=1)
#  и из отложенных наблюдений
DF_predict = DF_predict.drop(['direction_opp'], axis=1)
```

# Перекодировка номинальной и порядковой шкалы

Теперь перекодируем признаки так, чтобы воспользоваться функцией классификации на дереве решений. Начнём с тех, которые содержат признаки в номинальной шкале (между позициями нет отношения порядка). Перекодируем их в фиктивные с помощью функции `OneHotEncoder()` .

In [20]:
```
# имена столбцов с номинальными показателями
nom_col_names = ['destination', 'passanger', 'weather', 'coupon', 'gender',
                 'maritalStatus', 'occupation']

# создаём объект кодировщика
one_hot = OneHotEncoder()

# кодируем, результат - массив
recoded = one_hot.fit_transform(DF[nom_col_names]).toarray()

# создаём из результата новый фрейм с фиктивными переменными
```

```
clmns = one_hot.get_feature_names(nom_col_names)
df_dummy_nom = pd.DataFrame(recoded, columns=clmns)

# выводим размерность итога
print(df_dummy_nom.shape)

# смотрим результат
df_dummy_nom.head()
```

```
(8460, 47)
```

Out[20]:

| | destination_Home | destination_No Urgent Place | destination_Work | passanger_Alone | passanger_Friend(s) | passanger |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 0.0 | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | |
| **1** | 0.0 | 1.0 | 0.0 | 1.0 | 0.0 | |
| **2** | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | |
| **3** | 0.0 | 0.0 | 1.0 | 1.0 | 0.0 | |
| **4** | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | |

5 rows × 47 columns

In [21]:

```
# исходник для сравнения
print(DF[nom_col_names].shape)
DF[nom_col_names].head()
```

```
(8460, 7)
```

Out[21]:

| | destination | passanger | weather | coupon | gender | maritalStatus | occupatio |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **5266** | No Urgent Place | Kid(s) | Sunny | Bar | Male | Married partner | Retire |
| **1655** | No Urgent Place | Alone | Sunny | Restaurant(<20) | Male | Unmarried partner | Personal Care & Servic |
| **8097** | Home | Partner | Sunny | Carry out & Take away | Female | Married partner | Education&Training&Librar |
| **9400** | Work | Alone | Rainy | Bar | Male | Single | Unemploye |
| **10457** | Home | Kid(s) | Sunny | Carry out & Take away | Female | Divorced | Office & Administrativ Suppor |

Теперь разбираемся с показателями в порядковой шкале. Для этого воспользуемся `OrdinalEncoder()`. Для начала убедимся, что на этапе исключения пропущенных всё прошло штатно, и значений `'nan'`, которые `OrdinalEncoder()` не умеет обрабатывать, не осталось.

In [22]:

```
# имена столбцов с порядковыми показателями
ord_col_names = ['time', 'expiration', 'age', 'education', 'income',
                 'Bar', 'CoffeeHouse', 'CarryAway', 'RestaurantLessThan20',
                 'Restaurant20To50']

# считаем пропуски в столбцах
```

```
for col in ord_col_names :
    print('Пропусков в столбце', col, ':',
          sum(DF[col].isnull().astype(int)))
```

```
Пропусков в столбце time : 0
Пропусков в столбце expiration : 0
Пропусков в столбце age : 0
Пропусков в столбце education : 0
Пропусков в столбце income : 0
Пропусков в столбце Bar : 0
Пропусков в столбце CoffeeHouse : 0
Пропусков в столбце CarryAway : 0
Пропусков в столбце RestaurantLessThan20 : 0
Пропусков в столбце Restaurant20To50 : 0
```

Всё отлично, пропусков нет, поэтому можно перекодировать все порядковые столбцы в одно действие.

In [23]:

```
# создаём списки с порядком кодировки для каждого столбца
enc_time = ['7AM', '10AM', '2PM', '6PM', '10PM']
enc_expiration = ['2h', '1d']
enc_age = ['below21', '21', '26', '31', '36', '41', '46', '50plus']
enc_education = ['Some High School', 'High School Graduate',
                 'Some college - no degree', 'Associates degree',
                 'Bachelors degree',
                 'Graduate degree (Masters or Doctorate)']
enc_income = ['Less than $12500', '$12500 - $24999', '$25000 - $37499',
              '$37500 - $49999', '$50000 - $62499', '$62500 - $74999',
             '$75000 - $87499', '$87500 - $99999', '$100000 or More']
enc_how_often = ['never', 'less1', '1~3', '4~8', 'gt8']

# перекодировщик
ordinal = OrdinalEncoder(categories=[enc_time, enc_expiration, enc_age,
                                     enc_education, enc_income,
                                     enc_how_often, enc_how_often,
                                     enc_how_often, enc_how_often,
                                     enc_how_often])

# кодируем
df_ord = pd.DataFrame(ordinal.fit_transform(DF[ord_col_names]),
                      columns = ord_col_names)

# выводим размерность итога
print(df_ord.shape)

# результат
df_ord.head()
```

```
(8460, 10)
```

Out[23]:

| | time | expiration | age | education | income | Bar | CoffeeHouse | CarryAway | RestaurantLessThan20 | Res |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 1.0 | 0.0 | 7.0 | 5.0 | 5.0 | 0.0 | 3.0 | 2.0 | 3.0 | |
| **1** | 2.0 | 1.0 | 7.0 | 4.0 | 8.0 | 4.0 | 0.0 | 2.0 | 3.0 | |
| **2** | 4.0 | 0.0 | 7.0 | 2.0 | 4.0 | 1.0 | 0.0 | 3.0 | 2.0 | |
| **3** | 0.0 | 1.0 | 1.0 | 4.0 | 8.0 | 3.0 | 1.0 | 2.0 | 3.0 | |
| **4** | 4.0 | 0.0 | 4.0 | 2.0 | 2.0 | 0.0 | 4.0 | 3.0 | 3.0 | |

In [24]:
```
# исходник для сравнения
print(DF[ord_col_names].shape)
DF[ord_col_names].head()
```

```
(8460, 10)
```

Out[24]:

| | time | expiration | age | education | income | Bar | CoffeeHouse | CarryAway | RestaurantLessTl |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **5266** | 10AM | 2h | 50plus | Graduate degree (Masters or Doctorate) | 62500 — 74999 | never | 4~8 | 1~3 | |
| **1655** | 2PM | 1d | 50plus | Bachelors degree | $100000 or More | gt8 | never | 1~3 | |
| **8097** | 10PM | 2h | 50plus | Some college - no degree | 50000 — 62499 | less1 | never | 4~8 | |
| **9400** | 7AM | 1d | 21 | Bachelors degree | $100000 or More | 4~8 | less1 | 1~3 | |
| **10457** | 10PM | 2h | 36 | Some college - no degree | 25000 — 37499 | never | gt8 | 4~8 | |

Объединим результаты: исходно числовые столбцы, дамми для признаков в номинальной шкале и перекодированные признаки в порядковой шкале – во фрейм под названием `DF_num`.

In [25]:
```
# объединяем результаты перекодировки в один фрейм
DF_num = pd.concat([DF.loc[:, DF.dtypes == 'int64'].reset_index(),
                    df_dummy_nom, df_ord], axis=1)

print('Размерность обучающего фрейма после исключения NaN',
      '\nи перекодировки: ', DF_num.shape)

# результат
DF_num.head()
```

```
Размерность обучающего фрейма после исключения NaN
и перекодировки:  (8460, 64)
```

Out[25]:

| | index | temperature | has_children | toCoupon_GEQ15min | toCoupon_GEQ25min | direction_same | Y | des |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 5266 | 80 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | |
| **1** | 1655 | 55 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | |
| **2** | 8097 | 30 | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | |
| **3** | 9400 | 55 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | |
| **4** | 10457 | 80 | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | |

5 rows × 64 columns

Повторяем перекодировку для фрейма с отложенными наблюдениями `DF_predict`.

In [26]:
```
# перекодировка отложенных наблюдений
#  номинальная шкала ----------------------------------------------------------
#   кодируем, результат – массив
recoded = one_hot.fit_transform(DF_predict[nom_col_names]).toarray()

# создаём из результата новый фрейм с фиктивными переменными
clmns = one_hot.get_feature_names(nom_col_names)
df_dummy_nom = pd.DataFrame(recoded, columns=clmns)

#  порядковая шкала -----------------------------------------------------------
#   кодируем
df_ord = pd.DataFrame(ordinal.fit_transform(DF_predict[ord_col_names]),
                      columns = ord_col_names)

#   объединяем результаты
DF_predict_num = pd.concat([DF_predict.loc[:,
    DF_predict.dtypes == 'int64'].reset_index(),
                            df_dummy_nom, df_ord], axis=1)

print('Размерность фрейма с отложенными наблюдениями после исключения NaN',
      '\nи перекодировки: ', DF_predict_num.shape)

# результат
DF_predict_num.head()
```

```
Размерность фрейма с отложенными наблюдениями после исключения NaN
и перекодировки:  (3619, 64)
```

Out[26]:

| | index | temperature | has_children | toCoupon_GEQ15min | toCoupon_GEQ25min | direction_same | Y | des |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 30 | 80 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| **1** | 33 | 55 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | |
| **2** | 42 | 55 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | |
| **3** | 46 | 80 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| **4** | 49 | 80 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | |

5 rows × 64 columns

# Модель дерева

В этом разделе построим:

- дерево классификации
- дерево классификации с обрезкой ветвей

## Дерево на всех признаках

Построим модель и выведем изображение дерева в виде текста.

In [27]:
```
# выращиваем дерево на всех объясняющих
X = DF_num.drop(['index', 'Y'], axis=1)
y = DF_num['Y']

# классификатор
cls_one_tree = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy',
                                      random_state=my_seed)
tree_full = cls_one_tree.fit(X, y)

# выводим количество листьев (количество узлов)
tree_full.get_n_leaves()
```

Out[27]: 2220

In [28]:
```
# глубина дерева: количество узлов от корня до листа
#  в самой длинной ветви
tree_full.get_depth()
```

Out[28]: 32

Очевидно, дерево получилось слишком большое для отображения в текстовом формате. Графическая визуализация тоже не поможет в данном случае. Посчитаем показатели точности с перекрёстной проверкой.

In [29]:
```
# будем сохранять точность моделей в один массив:
score = list()
score_models = list()

# считаем точность с перекрёстной проверкой, показатель Acc
cv = cross_val_score(estimator=cls_one_tree, X=X, y=y, cv=5,
                     scoring='accuracy')

# записываем точность
score.append(np.around(np.mean(cv), 3))
score_models.append('one_tree')

print('Acc с перекрёстной проверкой',
      '\nдля модели', score_models[0], ':', score[0])
```

```
Acc с перекрёстной проверкой
для модели one_tree : 0.671
```

# Дерево с обрезкой ветвей

Подберём оптимальное количество ветвей, которое максимизирует $Acc$, для экономии времени рассчитанный методом проверочной выборки.

In [30]:
```
# рассчитываем параметры alpha для эффективных вариантов обрезки ветвей
path = cls_one_tree.cost_complexity_pruning_path(X, y)
ccp_alphas, impurities = path.ccp_alphas, path.impurities
print('Всего значений alpha:', len(ccp_alphas))
print('Энтропия листьев для первых 5 значений alpha:', impurities[:5])
```

```
Всего значений alpha: 986
Энтропия листьев для первых 5 значений alpha: [0.00141844 0.00141844 0.00150767
```

```
0.0015969  0.00169793]
```

In [31]:

```
# изображаем на графике
plt.plot(ccp_alphas[:-1], impurities[:-1], marker='o', drawstyle="steps-post")
plt.xlabel("значение гиперпараметра alpha")
plt.ylabel("общая энтропия листьев дерева")
plt.title("Изменение показателя нечистоты узлов с ростом alpha")
plt.show()
```


In [32]:

```
# обучающая и тестовая выборки, чтобы сэкономить время
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                    random_state=my_seed)

# модели
clfs = list()

# таймер
tic = time.perf_counter()
# цикл по значениям alpha
for ccp_alpha in ccp_alphas:
    clf = DecisionTreeClassifier(random_state=my_seed, ccp_alpha=ccp_alpha)
    clf.fit(X_train, y_train)
    clfs.append(clf)

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

```
Расчёты по обрезке дерева заняли 43.63 секунд
```

In [33]:

```
# извлекаем характеристики глубины и точности
#  таймер
tic = time.perf_counter()
node_counts = [clf.tree_.node_count for clf in clfs]
train_scores = [clf.score(X_train, y_train) for clf in clfs]
test_scores = [clf.score(X_test, y_test) for clf in clfs]
#  таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Расчёты показателей точности заняли {toc - tic:0.2f} секунд")
```

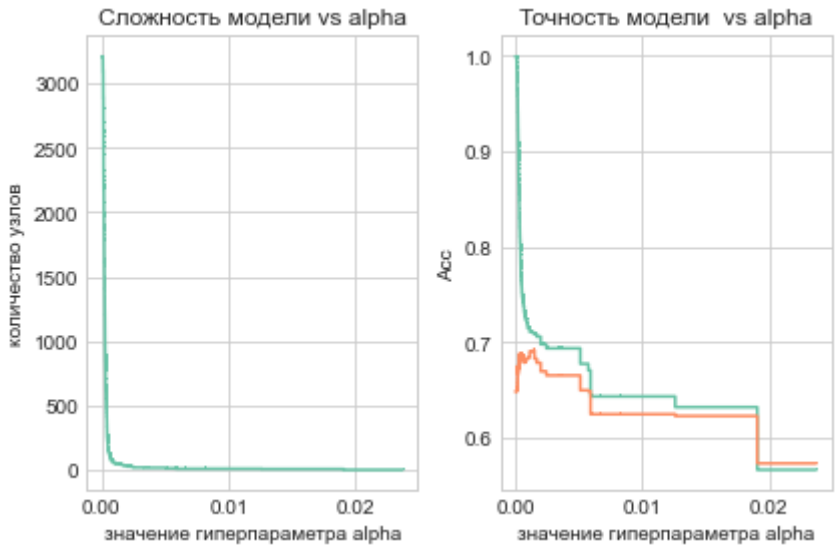
```
Расчёты показателей точности заняли 5.48 секунд
```

In [34]:

```
# изображаем на графике
fig, ax = plt.subplots(1, 2)

# график глубины дерева
ax[0].plot(ccp_alphas, node_counts, marker=',', drawstyle="steps-post")
ax[0].set_xlabel("значение гиперпараметра alpha")
ax[0].set_ylabel("количество узлов")
ax[0].set_title("Сложность модели vs alpha")

# график точности
ax[1].plot(ccp_alphas, train_scores, marker=',', label='train',
           drawstyle="steps-post")
ax[1].plot(ccp_alphas, test_scores, marker=',', label='test',
           drawstyle="steps-post")
ax[1].set_xlabel("значение гиперпараметра alpha")
ax[1].set_ylabel("Acc")
ax[1].set_title("Точность модели  vs alpha")
fig.tight_layout()
```




Находим оптимальный размер дерева по максимуму $Acc$ на тестовой выборке.

In [35]:

```
# оптимальное количество узлов
opt_nodes_num = node_counts[test_scores.index(max(test_scores))]

# считаем точность с перекрёстной проверкой, показатель Acc
cv = cross_val_score(estimator=clfs[opt_nodes_num], X=X, y=y, cv=5,
                     scoring='accuracy')

# записываем точность
score.append(np.around(np.mean(cv), 3))
score_models.append('pruned_tree')

print('Оптимальное количество узлов:', opt_nodes_num,
      '\nсоответствующая Acc на тестовой:', np.around(max(test_scores), 3),
      '\n\nAcc с перекрёстной проверкой',
      '\nдля модели', score_models[1], ':', score[1])
```

```
Оптимальное количество узлов: 45
соответствующая Acc на тестовой: 0.691
```

```
Acc с перекрёстной проверкой
для модели pruned_tree : 0.681
```

Посмотрим на характеристики глубины и сложности построенного дерева с обрезкой ветвей.

In [36]:
```
# выводим количество листьев (количество узлов)
clfs[opt_nodes_num].get_n_leaves()
```

Out[36]:
```
1096
```

In [37]:
```
# глубина дерева: количество узлов от корня до листа
#  в самой длинной ветви
clfs[opt_nodes_num].get_depth()
```

Out[37]:
```
25
```

---

### 🗄 Пример визуализации небольшого дерева

Лучшее дерево с обрезкой по-прежнему слишком велико для визуализации. Для примера нарисуем одно из небольших деревьев с обрезкой и выведем его же в виде текста.

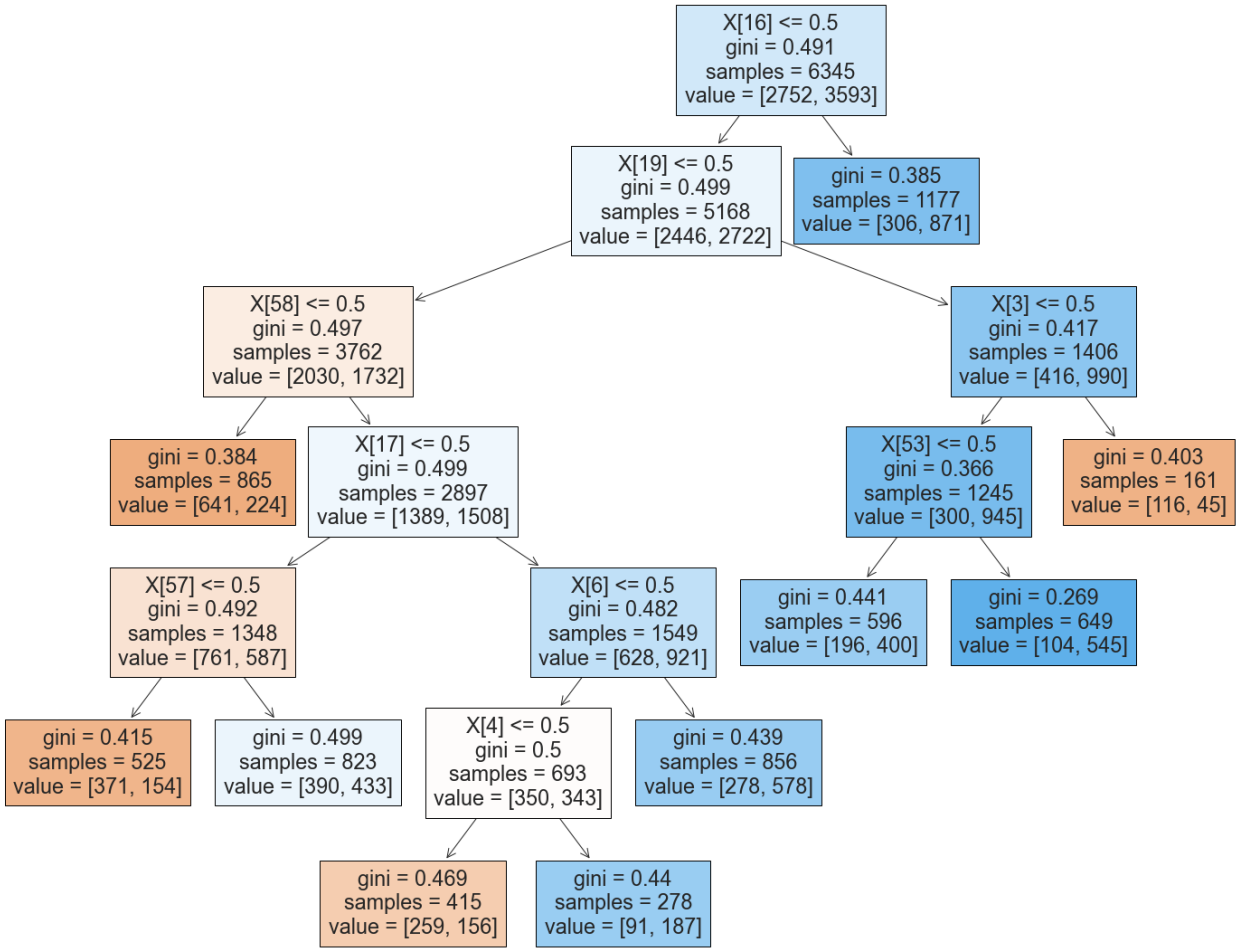
In [38]:
```
# находим деревья с количеством листьев меньше 20
[i for i in node_counts if i < 20]
```

Out[38]:
```
[19, 19, 19, 19, 17, 17, 17, 17, 13, 11, 9, 9, 9, 7, 1, 1]
```

In [39]:
```
# визуализация на схеме НА ПРИМЕРЕ МАЛЕНЬКОГО ДЕРЕВА
nodes_num = 19
print('Количество узлов:', nodes_num,
      '\nТочность дерева на тестовой:',
      np.around(test_scores[node_counts.index(nodes_num)], 3))

fig = plt.figure(figsize=(25,20))
_ = plot_tree(clfs[node_counts.index(nodes_num)], filled=True)
```

```
Количество узлов: 19
Точность дерева на тестовой: 0.665
```




In [40]:

```
# визуализируем дерево в виде текстовой схемы
viz = export_text(clfs[node_counts.index(nodes_num)],
                  feature_names=list(X.columns))
print(viz)
```

```
|--- coupon_Carry out & Take away <= 0.50
|   |--- coupon_Restaurant(<20) <= 0.50
|   |   |--- CoffeeHouse <= 0.50
|   |   |   |--- class: 0
|   |   |--- CoffeeHouse >  0.50
|   |   |   |--- coupon_Coffee House <= 0.50
|   |   |   |   |--- Bar <= 0.50
|   |   |   |   |   |--- class: 0
|   |   |   |   |--- Bar >  0.50
|   |   |   |   |   |--- class: 1
|   |   |   |--- coupon_Coffee House >  0.50
|   |   |   |   |--- destination_No Urgent Place <= 0.50
|   |   |   |   |   |--- direction_same <= 0.50
|   |   |   |   |   |   |--- class: 0
|   |   |   |   |   |--- direction_same >  0.50
|   |   |   |   |   |   |--- class: 1
|   |   |   |   |--- destination_No Urgent Place >  0.50
|   |   |   |   |   |--- class: 1
|   |--- coupon_Restaurant(<20) >  0.50
|   |   |--- toCoupon_GEQ25min <= 0.50
|   |   |   |--- expiration <= 0.50
|   |   |   |   |--- class: 1
|   |   |   |--- expiration >  0.50
|   |   |   |   |--- class: 1
```

```
|   |   |--- toCoupon_GEQ25min >  0.50
|   |   |   |--- class: 0
|--- coupon_Carry out & Take away >  0.50
|   |--- class: 1
```

---

# Бэггинг

Модель бэггинга использует бутстреп, чтобы вырастить $B$ деревьев на выборках с повторами из обучающих данных. Построим модель для $B = 50$ деревьев.

In [41]:
```
# параметр B: количество деревьев
num_trees = 50

# разбиения для перекрёстной проверки
kfold = KFold(n_splits=5, random_state=my_seed, shuffle=True)

# таймер
tic = time.perf_counter()
# модель с бэггингом
tree_bag = BaggingClassifier(base_estimator=cls_one_tree,
                             n_estimators=num_trees,
                             random_state=my_seed)
cv = cross_val_score(tree_bag, X, y, cv=kfold)

# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Обучение модели с бэггингом на {num_trees:0.0f} деревьях",
      " и перекрёстной проверкой ",
      f"заняло {toc - tic:0.2f} секунд", sep='')
```

```
Обучение модели с бэггингом на 50 деревьях и перекрёстной проверкой заняло 7.95 секунд
```

In [42]:
```
# точность
np.around(np.mean(cv), 3)
```

Out[42]:
```
0.746
```

Итак, мы построили модель, выбрав параметр $B$ случайным образом. Воспользуемся функцией `GridSearchCV()`, чтобы перебрать 5 вариантов значений для параметра $B$.

In [43]:
```
# настроим параметры бэггинга с помощью сеточного поиска
param_grid = {'n_estimators' : [10, 20, 30, 40, 50]}

# таймер
tic = time.perf_counter()
clf = GridSearchCV(BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier()),
                   param_grid, scoring='accuracy', cv=kfold)
tree_bag = clf.fit(X, y)
# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Сеточный поиск занял {toc - tic:0.2f} секунд", sep='')
```

```
Сеточный поиск занял 24.56 секунд
```

In [44]:
```
# точность лучшей модели
np.around(tree_bag.best_score_, 3)
```

Out[44]:
```
0.741
```

In [45]:
```
# количество деревьев у лучшей модели
tree_bag.best_estimator_.get_params()['n_estimators']
```

Out[45]:
```
50
```

Таким образом, перебрав несколько вариантов для $B$, мы немного улучшили первоначальную точность модели бэггинга.

In [46]:
```
# записываем точность
score.append(np.around(tree_bag.best_score_, 3))
score_models.append('bagging_GS')

print('Acc с перекрёстной проверкой',
      '\nдля модели', score_models[2], ':', score[2])
```

```
Acc с перекрёстной проверкой
для модели bagging_GS : 0.741
```

# Случайный лес

У модели случайного леса два настроечных параметра: количество деревьев $B$ и количество признаков для построения отдельного дерева $m$. Настроим сеточный поиск для их подбора.

In [47]:
```
# сколько столбцов в обучающих данных (p)
X_m = X.shape[1]
# возьмём значения для m: p, p/2, sqrt(p) и log2(p)
ms = np.around([X_m, X_m / 2, np.sqrt(X_m), np.log2(X_m)]).astype(int)
ms
```

Out[47]:
```
array([62, 31,  8,  6])
```

In [48]:
```
# настроим параметры случайного леса с помощью сеточного поиска
param_grid = {'n_estimators' : [10, 20, 30, 40, 50],
              'max_features' : ms}

# таймер
tic = time.perf_counter()
clf = GridSearchCV(RandomForestClassifier(DecisionTreeClassifier()),
                   param_grid, scoring='accuracy', cv=kfold)
random_forest = clf.fit(X, y)
# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Сеточный поиск занял {toc - tic:0.2f} секунд", sep='')
```

```
Сеточный поиск занял 44.06 секунд
```

In [49]:
```
# точность лучшей модели
np.around(random_forest.best_score_, 3)
```

Out[49]:
```
0.749
```

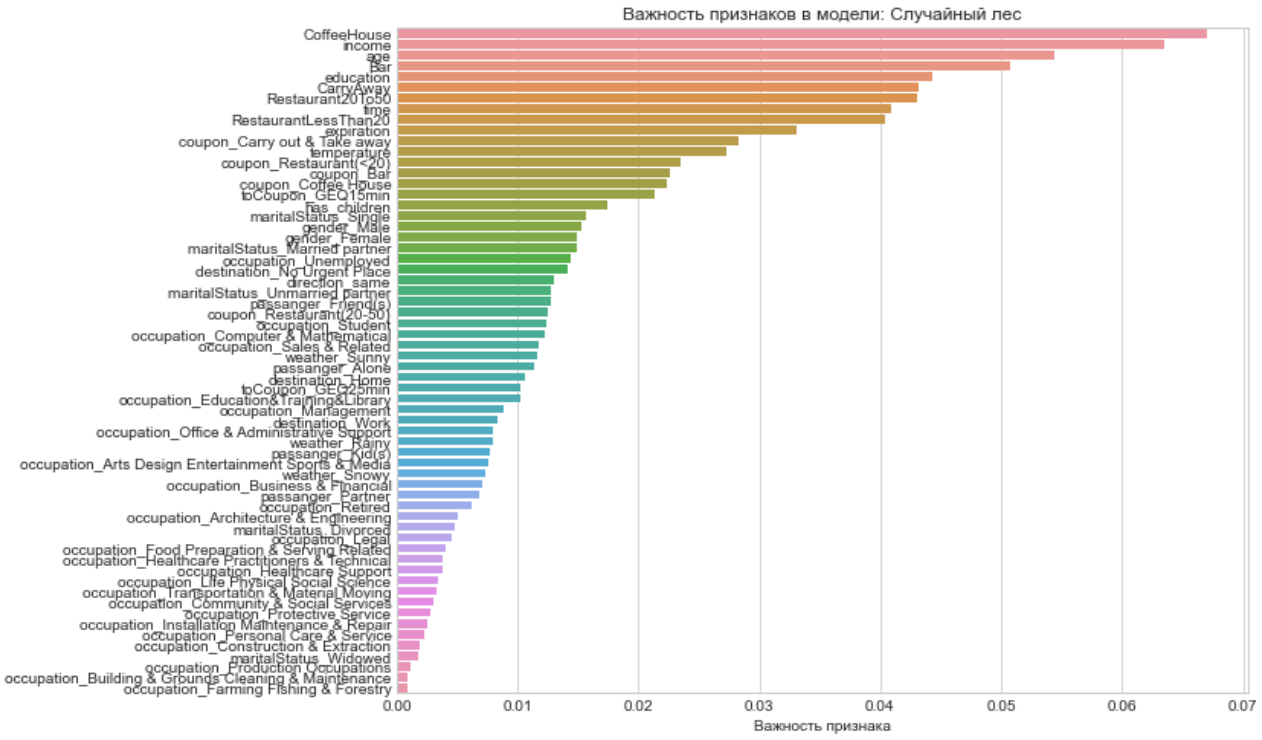
In [50]:
```
# количество деревьев у лучшей модели
random_forest.best_estimator_.get_params()['n_estimators']
```

Out[50]:
```
50
```

In [51]:
```
# количество объясняющих у лучшей модели
random_forest.best_estimator_.get_params()['max_features']
```

Out[51]:
```
8
```

In [52]:
```
# рисуем график относительной важности каждого признака
plot_feature_importance(random_forest.best_estimator_.feature_importances_,
                        X.columns, 'Случайный лес')
```




In [53]:
```
# записываем точность
score.append(np.around(random_forest.best_score_, 3))
score_models.append('random_forest_GS')

print('Acc с перекрёстной проверкой',
      '\nдля модели', score_models[3], ':', score[3])
```

```
Acc с перекрёстной проверкой
для модели random_forest_GS : 0.749
```

# Бустинг

Подберём сеточным поиском настроечные параметры модели:

- $B$ число деревьев,
- $\lambda$ – скорость обучения,
- $d$ – глубина взаимодействия предикторов.

In [54]:
```
# обучаем модель с параметрами по умолчанию
clf_tst = GradientBoostingClassifier(n_estimators=100, learning_rate=1.0,
                                     max_depth=1, random_state=my_seed)
cv = cross_val_score(clf_tst, X, y, cv=kfold, scoring='accuracy')
np.around(np.mean(cv), 3)
```

Out[54]:
```
0.688
```

In [55]:
```
# настроим параметры бустинга с помощью сеточного поиска
param_grid = {'n_estimators' : [10, 20, 30, 40, 50],
              'learning_rate' : np.linspace(start=0.01, stop=0.25, num=15),
              'max_depth' : [1, 2]}

# таймер
tic = time.perf_counter()
clf = GridSearchCV(GradientBoostingClassifier(),
                   param_grid, scoring='accuracy', cv=kfold)
boost_tree = clf.fit(X, y)
# таймер
toc = time.perf_counter()
print(f"Сеточный поиск занял {toc - tic:0.2f} секунд", sep='')
```

```
Сеточный поиск занял 119.72 секунд
```

In [56]:
```
# точность лучшей модели
np.around(boost_tree.best_score_, 3)
```

Out[56]:
```
0.712
```

In [57]:
```
# параметры лучшей модели
print('n_estimators:',
      boost_tree.best_estimator_.get_params()['n_estimators'],
      '\nlearning_rate:',
      boost_tree.best_estimator_.get_params()['learning_rate'],
      '\nmax_depth:',
      boost_tree.best_estimator_.get_params()['max_depth'])
```

```
n_estimators: 50
learning_rate: 0.23285714285714287
max_depth: 2
```

In [58]:
```
# записываем точность
score.append(np.around(boost_tree.best_score_, 3))
score_models.append('boost_tree_GS')

print('Acc с перекрёстной проверкой',
      '\nдля модели', score_models[4], ':', score[4])
```

```
Acc с перекрёстной проверкой
для модели boost_tree_GS : 0.712
```

# Прогноз на отложенные наблюдения по лучшей модели

Ещё раз посмотрим на точность построенных моделей.

In [59]:
```
# сводка по точности моделей
pd.DataFrame({'Модель' : score_models, 'Acc' : score})
```

Out[59]:

| | Модель | Acc |
|---|---|---|
| **0** | one_tree | 0.671 |
| **1** | pruned_tree | 0.681 |
| **2** | bagging_GS | 0.741 |
| **3** | random_forest_GS | 0.749 |
| **4** | boost_tree_GS | 0.712 |

Все модели показывают среднюю точность по показателю $Acc$, при этом самой точной оказывается модель случайного леса. Сделаем прогноз на отложенные наблюдения.

In [60]:
```
# данные для прогноза
X_pred = DF_predict_num.drop(['index', 'Y'], axis=1)
# строим прогноз
y_hat = random_forest.best_estimator_.predict(X_pred)
# характеристики точности
print(classification_report(DF_predict_num['Y'], y_hat))
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           0       0.73      0.67      0.69      1547
           1       0.77      0.81      0.79      2072

    accuracy                           0.75      3619
   macro avg       0.75      0.74      0.74      3619
weighted avg       0.75      0.75      0.75      3619
```

# Упражнение 4

1. Данные своего варианта из упражнения 3 (на регуляризацию и снижение размерности) разделить на выборку для построения моделей (85%) и отложенные наблюдения (15%). Отложенные наблюдения использовать только для прогноза по лучшей модели.

2. Построить модель дерева с обрезкой ветвей и оптимизировать её параметр $T$ с помощью перекрёстной проверки. Указать, чему равно оптимальное значение параметра. Представить дерево графически, если его размер позволяет.

3. Построить модель методом, указанным в варианте (см. таблицу ниже), оптимизировав её параметры с помощью перекрёстной проверки. Для сеточного поиска взять не менее 7 различных значений для каждого настроечного параметра. Указать оптимальные значения параметров.

4. Выбрать наиболее точную модель из полученных в пунктах 2 и 3.

5. Сделать по ней прогноз на отложенные наблюдения, оценить точность этого прогноза.

6. Сравнить точность на отложенных наблюдениях с точностью моделей из упражнения 4 (сами модели из того упражнения перестраивать не надо).

# 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.

**Метод для задания 3**

1. Бэггинг.
2. Случайный лес.
3. Бустинг.
4. Бэггинг.
5. Случайный лес.
6. Бустинг.
7. Бэггинг.
8. Случайный лес.
9. Бустинг.
10. Бэггинг.
11. Случайный лес.
12. Бустинг.
13. Бэггинг.
14. Случайный лес.
15. Бустинг.
16. Бэггинг.
17. Случайный лес.
18. Бустинг.
19. Бэггинг.
20. Случайный лес.

# Источники

1. Джеймс Г., Уиттон Д., Хасти Т., Тибширани Р. Введение в статистическое обучение с примерами на языке R. Пер. с англ. С.Э. Мастицкого – М.: ДМК Пресс, 2016 – 450 с.
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. *Tong Wang*, *Cynthia Rudin*, *Finale Doshi-Velez*, *Yimin Liu*, *Erica Klampfl*, *Perry MacNeille* A Bayesian Framework for Learning Rule Sets for Interpretable Classification / Journal of Machine Learning Research 18 (2017) 1-37. URL: https://jmlr.org/papers/volume18/16-003/16-003.pdf
4. *George Pipis* How to Run the Chi-Square Test in Python / medium.com. URL: https://medium.com/swlh/how-to-run-chi-square-test-in-python-4e9f5d10249d
5. *Bernd Klein* What are Decision Trees? / python-course.eu. URL: https://www.python-course.eu/Decision_Trees.php
6. Pruning decision trees - tutorial / kaggle.com. URL: https://www.kaggle.com/arunmohan003/pruning-decision-trees-tutorial
7. Post pruning decision trees with cost complexity pruning / scikit-learn.org. URL: https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/tree/plot_cost_complexity_pruning.html
8. *Piotr Płoński* Visualize a Decision Tree in 4 Ways with Scikit-Learn and Python / mljar.com. URL: https://mljar.com/blog/visualize-decision-tree/
9. Random Forest Feature Importance Plot / www.analyseup.com. URL: https://www.analyseup.com/learn-python-for-data-science/python-random-forest-feature-importance-plot.html