

## Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

# «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

івный исследовательский университ (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

#### ФАКУЛЬТЕТ ИНФОРМАТИКА И СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ

КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И СЕТИ (ИУ6)

НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ **09.04.01 Информатика и вычислительная техника** МАГИСТЕРСКАЯ ПРОГРАММА **09.04.01/12 Интеллектуальный анализ больших** данных в системах поддержки принятия решений

## ОТЧЕТ по домашней работе № 2\_

Название: Выбор модели

Дисциплина: Методы машинного обучения

Студент	ИУ6-23М		М.А. Гейне
	(Группа)	(Подпись, дата)	(И.О. Фамилия)
Преподаватель			С.Ю. Папулин
		(Подпись, дата)	(И.О. Фамилия)

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ЗАДАНИЕ	2
Цель работы	2
Вариант	2
Задание 1. Реализация собственных классов и функций	2
Задание 2. Регрессия и кросс-валидация	3
Задание 3. Классификация и кросс-валидация	4
Решение задания 1	6
Выводы	12
Решение задания 2	13
Использование run_holdout	14
Использование run_cross_val	19
Выводы	25
Решение задания 3	26
Использование run_holdout	28
Использование кросс-валидации	33
Выводы	39
ВЫВОДЫ	40

## ЗАДАНИЕ

## Цель работы

- —реализация собственных классов совместимых с библиотекой sklearn
- —использование полиномиальной трансформации в моделях регрессии и классификации
- —использование регуляризации в моделях регрессии и классификации
- —выбор гиперпараметров и интерпретация кривых обучения

## Вариант

Чтобы узнать свой вариант, введите Вашу фамилию в соответствующее поле ниже и запустите ячейку:

## Задание 1. Реализация собственных классов и функций

Набор данных: Reg\_A5.csv

⚠ Замечание. 1) Нельзя пользоваться готовыми реализациями sklearn; 2) чтобы избежать случая с вырожденной матрицей при оценке параметров добавьте небольшую регуляризацию по умолчанию или используйте 1stsq из пакета numpy или др. способ; 3) используйте random\_state=0

1) Реализуйте класс, предназначенный для оценки параметров линейной регрессии с регуляризацией совместимый с sklearn. Передаваемые параметры: 1) коэффициент регуляризации (alpha). Использовать метод наименьших квадратов с регуляризацией.

- 2) Реализуйте класс для стандартизации признаков в виде трансформации совместимый с sklearn. Передаваемые параметры: 1) has\_bias (содержит ли матрица вектор единиц), 2) apply\_mean (производить ли центровку)
- 3) Использую класс Pipeline, выполнить обучение линейной регрессии для всего набора данных с коэффициентом регуляризации равным 0.01. Выведите значения параметров обученной модели. Отобразите исходные данные и график функции предсказания.
- 4) Реализуйте функции для расчета мѕ и к^2 при отложенной выборке (run\_holdout) и кросс-валидации (run\_cross\_val). Для кросс-валидации используйте только класс кғоld. Выходными значениями должны быть мѕ и к^2 для обучающей и тестовой частей.

Шаблон кода:

```
def run_holdout(model, X, y, train_size, random_state) -> dict:
    ...
    return scores

def run_cross_val(model, X, y, n_splits, shuffle, random_state) -> dict:
    ...
    return scores
```

- 5) Выведите значения мse и R^2, полученные посредством функций run\_holdout и run\_cross\_val. Использовать следующие параметры:
- train\_size=0.75,
- n\_splits=4,
- shuffle=True,
- random\_state=0

## Задание 2. Регрессия и кросс-валидация

Набор данных: Reg\_A5.csv

## **Л** Замечание:

— Используйте ранее реализованные классы и функции

- Разбейте исходные данные на обучающее и тестовое подмножества в соотношении 70 на 30, random\_state=0
- Для выбора гиперпараметров используйте два подхода: 1) с отложенной выборкой, 2) с кросс-валидацией
- Параметры разбиения для выбора гиперпараметров используйте те, что в п.4 задания 1

Дано множество наблюдений (см. набор данных к заданию), модель - линейная регрессия (без регуляризации, с нормализацией). Найти степень полинома с минимальной ошибкой на проверочном подмножестве, определить среднеквадратическую ошибку на тестовом подмножестве (степень полинома от 1 до 25). Сделать заключение о влиянии степени полинома регуляризации.

#### Построить:

- диаграмму разброса исходных данных
- график зависимости среднеквадратической ошибки (мse) от степени полинома для обучающего и проверочного подмножеств
- график зависимости коэффициента детерминации (R^2) от степени полинома для обучающего и проверочного подмножеств
- функцию регрессии (наилучший случай) + исходные данные

## Задание 3. Классификация и кросс-валидация

Набор данных:

— Cl\_A5\_V1.csv

## **Л** Замечание:

- Используйте класс логистической регрессии из sklearn со следующими параметрами:
  - penalty='12'
  - fit\_intercept=True
  - max iter=100

- C=1e5
- solver='liblinear'
- random\_state=12345
- Разбейте исходные данные на обучающее и тестовое подмножества в соотношении 70 на 30, random\_state=0
- Для выбора гиперпараметров используйте два подхода: 1) с отложенной выборкой, 2) с кросс-валидацией
- Для кросс-валидации можно использовать функцию cross\_validate из sklearn
- Параметры разбиения для выбора гиперпараметров используйте те, что в п.5 задания 1

Дано множество наблюдений (см. набор данных к заданию), классификатор - логистическая регрессия. Найти степень полинома с минимальной ошибкой на проверочном подмножестве, определить долю правильных классификаций на тестовом подмножестве. Сделать заключение о влиянии степени полинома регуляризации.

## Построить:

- диаграмму разброса исходных данных
- график зависимости доли правильных классификаций от степени полинома для обучающего и проверочного подмножеств
- график зависимости доли правильных классификаций от количества итераций для обучающего и проверочного подмножеств для наилучшего случая
- результат классификации для наилучшего случая (степень полинома)
   для обучающего и тестового подмножеств

#### Решение задания 1

Подключим ряд библиотек, необходимых для работы с математикой, с исходными данными и визуализации. Также импортируем из sklearn набор базовых классов для трансформеров и регрессоров, базовые средства валидации данных и функции проверки совместимости классов с sklearn.

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

from sklearn.base import BaseEstimator, RegressorMixin, TransformerMixin
from sklearn.utils.validation import check_X_y, check_array, check_is_fitted
from sklearn.utils.estimator_checks import check_estimator
from sklearn.base import is_regressor
```

Загружаем исходные данные задания и разбиваем на выходные параметры и целевые значения.

```
TASK1 = './data/Reg A5.csv'
df = pd.read csv(TASK1)
df.head()
         Χ
                    Υ
0 3.856603 9.209759
1 0.103760 10.409240
2 3.168241 7.643742
3 3.744019 8.453341
4 2.492535 9.317824
X = df[['X']]
X.head()
         Χ
0 3.856603
1 0.103760
2 3.168241
3 3.744019
4 2.492535
y = df["Y"]
y.head()
     9.209759
1
    10.409240
2
     7.643742
3
     8.453341
     9.317824
Name: Y, dtype: float64
```

Реализуем собственный класс линейной регрессии с регуляризацией. Для оценки параметров воспользуемся формулой  $\omega = (X^TX + \alpha A)^{-1}X^Ty$ , где A - это единичная матрица размера (p+1)\*(p+1) с A(0,0)=0 (p - количество признаков в таблице). Будем считать, что во входной таблице признаков отсутствует вектор единиц для организации смещения, поэтому он будет добавляться ко всем входным данным.

```
class CustomLinearRegression(BaseEstimator, RegressorMixin):
 def __init__(self, alpha=0.000001):
   self.alpha = alpha
 def fit(self, X, y):
   X, y = check_X_y(X, y)
   n_samples, n_features = X.shape
   self.n features in = n features
   X = np.hstack((np.ones((n samples, 1)), X))
   A = np.ones((n_features + 1, n_features + 1))
   A[0, 0] = 0 # Не применять регуляризацию к вектору 1
    self.coef = np.linalg.lstsq(X.T @ X + self.alpha *A, X.T @ y, rcond= None)[0]
   return self
 def predict(self, X):
   check is fitted(self, 'coef ')
   X = check\_array(X)
   X = np.hstack((np.ones((X.shape[0], 1)), X))
   return X @ self.coef
print(f"Is CustomLinearRegresssion class compatible with sklearn:
{check_estimator(CustomLinearRegression()) == None}")
print(f"Is CustomLinearRegresssion class a regressor:
{is regressor(CustomLinearRegression())}")
Is CustomLinearRegresssion class compatible with sklearn: True
Is CustomLinearRegresssion class a regressor: True
     Реализуем класс для стандартизации признаков в соответствии с заданием.
class CustomTransformer(BaseEstimator, TransformerMixin):
 def __init__(self, has_bias=False, apply_mean=True):
    self.has bias = has bias
   self.apply mean = apply mean
 def fit(self, X, y):
   X, y = check_X y(X, y)
```

```
if self.apply_mean:
      self.mean_ = np.mean(X, axis=0)
      self.mean = np.zeros(X.shape[1])
    if self.has_bias:
      self.scale_ = np.std(X[:, 1:], axis=0)
    else:
      self.scale_ = np.std(X, axis=0)
    return self
 def transform(self, X):
    check_is_fitted(self, ['scale_', 'mean_'])
   X = check\_array(X)
    if self.has bias:
     X_scaled = (X[:, 1:] - self.mean_) / self.scale_
      return np.hstack((X[:, 0][:, np.newaxis], X_scaled))
    else:
     X_std = (X - self.mean_) / self.scale_
     return X std
print(f"Is CustomTransformer class compatible with sklearn;
{check_estimator(CustomTransformer()) == None}")
```

#### Is CustomTransformer class compatible with sklearn: True

Организуем модель, объединяющую в себе созданные классы преобразования и регрессии, с помощью класса Pipeline из sklearn.

```
from sklearn.pipeline import Pipeline

pipeline = Pipeline([
         ("standartization", CustomTransformer()),
         ("regression", CustomLinearRegression(alpha=0.01))
])
```

Полученная модель была обучена на всех доступных исходных данных. Её коэффициенты приведены ниже.

```
# Обучение
pipeline.fit(X, y)

# Параметры модели
print(f'w = {pipeline.named_steps["regression"].coef_}')

w = [ 9.44893449 -0.40413065]
```

Линия регрессии и множество исходных наблюдений приведены на рисунке

```
1.
```

```
# Отображение наблюдений и линии регрессии
plt.figure(1, figsize=[8, 4])

xx = np.linspace(X[:].min(),X[:].max(), 2).reshape(-1,1)

pipeline.predict(xx)

plt.subplot(1,1,1)
plt.scatter(X[:], y, color="grey", label="Sample", zorder=2)
plt.plot(xx, pipeline.predict(xx), "-", color="green", label="Regression")
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$")
plt.legend()
plt.grid(True)
```

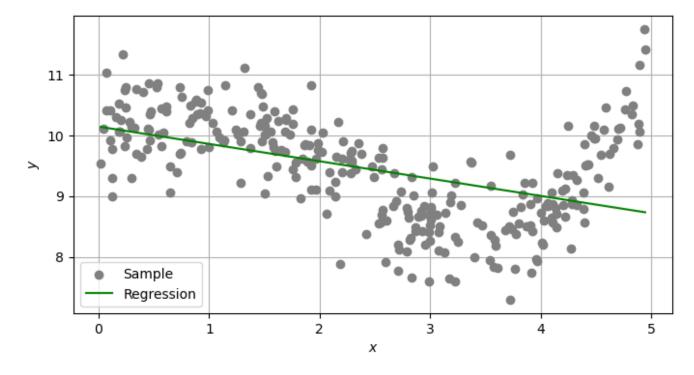


Рисунок 1 – Линия регрессии и исходные данные

Как видно из рисунка 1, линия регрессии соответствует характеру исходных данных в среднем, однако передаёт только линейную зависимость значений. Можно заметить, что регрессия не отражает рост значений на отрезке X = [4,5] или падение значений на отрезке X = [2,4].

Определим функции для разбиения множеств на обучающие и тестовые; для полсчёта MSE и R^2.

```
from sklearn.utils import shuffle

def custom_split(X, y, train_size, random_state):

# Перемешать данные
X, y = shuffle(X, y, random_state=random_state)

# Разбиение на train u test
split_idx = int(train_size * len(X))
X_train, y_train = X[:split_idx], y[:split_idx]
X_test, y_test = X[split_idx:], y[split_idx:]
return X_train, X_test, y_train, y_test

def score_mse(true, prediction):
    return sum((true - prediction):
    return 1 - sum((prediction - true)**2) / sum((true - true.mean())**2)
```

Определим функцию для организации обучения и оценки с отложенной выборкой. Поступившие на вход данные разбиваются в заданной пропорции, после чего модель обучается на тренировочной части. Оценки приводятся как для проверочного множества, так и для тренировочного.

```
def run_holdout(model, X, y, train_size, random_state=None):
 # Разбиение на train и test
 X_train, X_test, y_train, y_test = custom_split(X, y, train_size, random_state)
 # Обучение на train
 model.fit(X train, y train)
 # Предсказание на train
 y train pred = model.predict(X train)
 # Предсказание на test
 y test pred = model.predict(X test)
 # Подсчёт MSE и R^2 на train и test
 mse_train = score_mse(y_train, y_train_pred)
 mse test = score mse(y test, y test pred)
 r2_train = score_r2(y_train, y_train_pred)
  r2_test = score_r2(y_test, y_test_pred)
 # Подготовка оценок в виде словаря
  scores = {'mse train': mse train,
```

Определим функцию для обучения модели и её оценки с кросс-валидацией. Исходное множество разбивается на заданное количество частей, после проводится обучение и оценка для различных сочетаний полученных частей: одна из частей выбирается проверочной, остальные - тренировочными. Полученные множества оценок усредняются и возвращаются в качестве результата кроссвалидации.

```
from sklearn.model selection import KFold
def run_cross_val(model, X, y, n_splits, shuffle, random_state=None):
 kf = KFold(n_splits=n_splits, shuffle=shuffle, random_state=random_state)
 # Массивы для хранения оценок каждого split
 mse train scores = []
 mse test scores = []
  r2 train scores = []
  r2 test scores = []
 # Разбиваем данные
  splits = kf.split(X,y)
 for train index, test index in splits:
   X_train, X_test = X.iloc[train_index], X.iloc[test_index]
   y train, y test = y.iloc[train index], y.iloc[test index]
   model.fit(X train, y train)
    # Предсказания на train u test
   y train pred = model.predict(X train)
   y_test_pred = model.predict(X_test)
    # Подсчёт MSE и R^2 на train и test
    mse_train = score_mse(y_train, y_train_pred)
   mse_test = score_mse(y_test, y_test_pred)
    r2_train = score_r2(y_train, y_train_pred)
    r2_test = score_r2(y_test, y_test_pred)
   mse train scores.append(mse train)
    mse_test_scores.append(mse_test)
    r2_train_scores.append(r2_train)
    r2 test scores.append(r2 test)
    scores = {'mse_train': np.mean(mse_train_scores),
```

```
'mse_test': np.mean(mse_test_scores),
'r2_train': np.mean(r2_train_scores),
'r2_test': np.mean(r2_test_scores)}
return scores
```

Проведём оценки модели с помошью отложенной выборки и кроссвалидации.

```
run_holdout(pipeline, X, y, train_size=0.75,random_state=0)

{'mse_train': 0.5667278127334847,
    'mse_test': 0.540053853846575,
    'r2_train': 0.21386137771000968,
    'r2_test': 0.2535686428535501}

run_cross_val(pipeline, X, y, n_splits=4, shuffle=True, random_state=0)

{'mse_train': 0.5246793373046686,
    'mse_test': 0.6677933209501827,
    'r2_train': 0.26316703061755176,
    'r2_test': 0.10937997983346548}
```

Можно заметить, что оценки при разных подходах различаются, однако в обоих случаях являются достаточно неудовлетворительными. Это свидетельствует о том, что модель необходимо менять для достижения более точных результатов.

#### Выводы

Реализованы классы линейной регрессии и стандартизации, совместимые с sklearn. Реализованы функции разбиения на тренировочные и проверочные множества, оценки среднеквадратической ошибки MSE и коэффициента детерминации  $R^2$ . Описаны функции для проведения отложенной выборки и кросс-валидации. Получены оценки линейной регрессии на исходном множестве данных и сделан вывод о необходимости выбора иной модели.

#### Решение задания 2

Разобьём выборку на обучающее и тестовое подмножества в соотношении 70 на 30.

```
X_train, X_test, y_train, y_test = custom_split(X, y, train_size=0.7,
random_state=0)
print(f"X_train size: {len(X_train)}. X_test size: {len(X_test)}.")
X_train size: 210. X_test size: 90.
```

Построим диаграмму разброса исходных данных (рисунок 2).

```
# Отображение наблюдений
plt.figure(2, figsize=[4, 4])

plt.subplot(1,1,1)
plt.scatter(X_train[:], y_train, color="blue", label="Train", zorder=2)
plt.scatter(X_test[:], y_test, color="red", label="Test", zorder=2)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$")
plt.legend()
plt.grid(True)
```

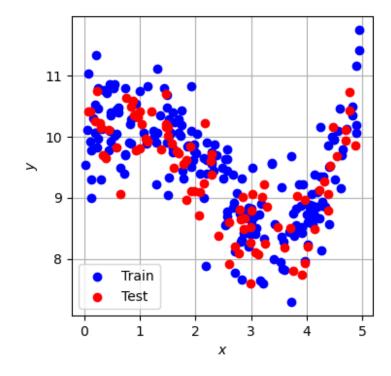


Рисунок 2 – Диаграмма разброса данных

Построим модель, с которой будем работать. По заданию требуется нормализация данных, она будет проведена с помощью класса стандартизации из

задания 1. Затем на этих данных необходимо получать полином заданной степени. Такое преобразование возможно выполнить с помощью класса PolynomialFeatures пакета sklearn. Затем будет проводиться линейная регрессия реализованным ранее классом. По заданию регуляризация не требуется: отключаем её установкой значения alpha в 0.

```
poly_pipe = Pipeline([
    ("normalization", CustomTransformer()),
    ("polynoms", PolynomialFeatures(degree=None, include_bias=False)),
    ("linear_model", CustomLinearRegression(alpha=0))
])
```

Далее обучение происходит на обучающей выборке.

#### Использование run\_holdout

Рассмотрим применение отложенной выборки для поиска наилучшего значения гиперпараметра.

```
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков
scores holdout = []
# степени полинома
degrees = list(range(1, 25+1))
best degree = 0
best_mse = float("inf")
for degree in degrees:
  # Установка очередной степени полинома
  poly pipe.named steps["polynoms"].degree = degree
  # Обучение и получение MSE и R^2
  score = run_holdout(poly_pipe, X_train, y_train, train_size=0.75,
random state=⊘)
  scores_holdout.append(score)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best_mse > score["mse_test"]:
    best_mse = score["mse_test"]
    best_degree = degree
# Итоговая лучшая степень полинома
print(f"Best degree: {best_degree}. Best MSE: {best_mse}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
```

```
poly_pipe.named_steps["polynoms"].degree = best_degree
poly_pipe.fit(X_train, y_train)

print(f"Test MSE:{score_mse(y_test, poly_pipe.predict(X_test))}")

Best degree: 3. Best MSE: 0.20402150696568871.
Test MSE:0.2140594732336837
```

Лучшей степенью полинома была выбрана 3 степень. Ошибка на тестовом множестве составляет 0.214.

Построим графики MSE и  $R^2$  для обучающего и проверочного множеств (рисунок 3).

```
mse train = list(map(lambda score: score["mse train"], scores holdout))
mse_test = list(map(lambda score: score["mse_test"], scores_holdout))
r2 train = list(map(lambda score: score["r2 train"], scores holdout))
r2 test = list(map(lambda score: score["r2 test"], scores holdout))
plt.figure(3, figsize=[10, 6])
plt.subplot(1,2,1)
plt.title("$MSE$")
plt.plot(degrees, mse_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(degrees, mse_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$MSE$")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.subplot(1,2,2)
plt.title("$R^2$")
plt.plot(degrees, r2_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(degrees, r2_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$R^2$")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight layout()
plt.show()
```

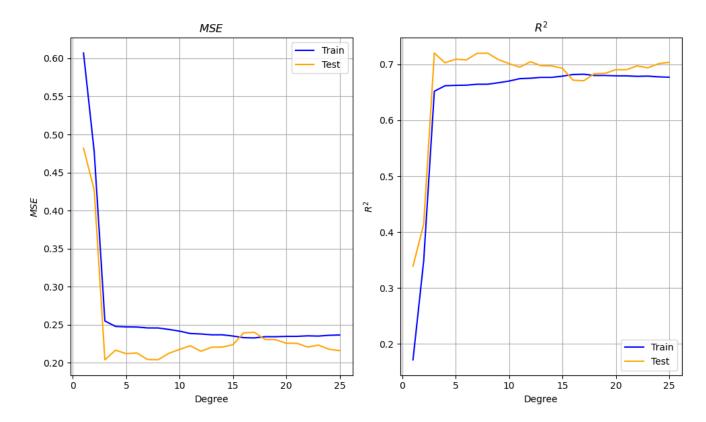


Рисунок 3 – Зависимость MSE и R<sup>2</sup> от степени полинома (отложенная выборка)

На графиках показано, что при малых степенях полинома ошибка на обоих множествах достаточно высока, однако к 3 степени ошибка на тестовом множестве достигает своего минимума. При увеличении степени полинома ошибка на тренировочном множестве продолжает уменьшаться, однако она возрастает на тестовом множестве. После 20 степени ошибки на обоих множествах сильно возрастают, что говорит о слишком большой гибкости и переобучении модели.

Аналогичная картина наблюдается и с коэффициентом детерминации  $R^2$ : к 3 степени полинома он практически достигает своего максимума на проверочном множестве, однако далее наблюдается его падение.

Рассмотрим, как влияет степень коэффициента регуляризации на точность. Для этого зафиксируем степень полинома равной 3, но при этом проверим оценки при различных коэффициентах регуляризации.

# массив для хранения оценок и построения по ним графиков scores\_holdout = []

```
# степени регуляризации
alphas = [10, 1, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001]
best_alpha = float("inf")
best mse = float("inf")
for alpha in alphas:
  # Установка очередной степени полинома
  poly_pipe.named_steps["linear_model"].alpha = alpha
  # Обучение и получение MSE и R^2
  score = run_holdout(poly_pipe, X_train, y_train, train_size=0.75,
random state=∅)
  scores_holdout.append(score)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best mse > score["mse test"]:
    best_mse = score["mse_test"]
    best alpha = alpha
# Итоговая лучшая степень регуляризации
print(f"Best alpha: {best alpha}. Best MSE: {best mse}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
poly pipe.named steps["linear model"].alpha = best alpha
poly pipe.fit(X train, y train)
print(f"Test MSE:{score_mse(y_test, poly_pipe.predict(X_test))}")
Best alpha: 1e-07. Best MSE: 0.2040215072162628.
Test MSE:0.21405947299314454
mse train = list(map(lambda score: score["mse train"], scores holdout))
mse_test = list(map(lambda score: score["mse_test"], scores_holdout))
r2 train = list(map(lambda score: score["r2 train"], scores holdout))
r2_test = list(map(lambda score: score["r2_test"], scores_holdout))
plt.figure(4, figsize=[10, 6])
plt.subplot(1,2,1)
plt.title("$MSE$")
plt.plot(alphas, mse_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(alphas, mse_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$MSE$")
plt.xscale("log")
plt.legend()
plt.grid(True)
```

```
plt.subplot(1,2,2)
plt.title("$R^2$")
plt.plot(alphas, r2_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(alphas, r2_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$R^2$")
plt.xscale("log")
plt.legend()
plt.legend()
plt.grid(True)
```

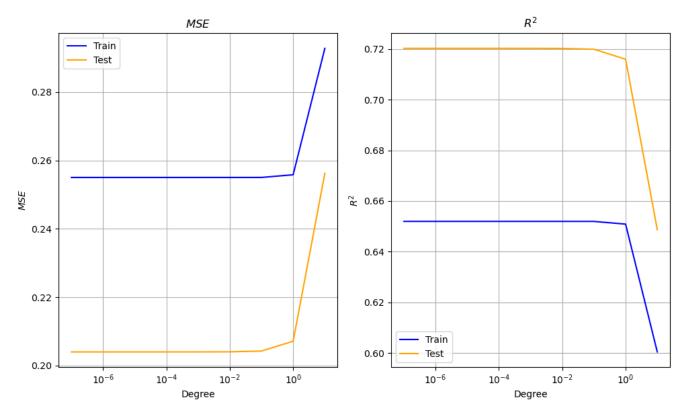


Рисунок 4 — Зависимость MSE и R^2 от степени регуляризации (отложенная выборка)

Из графиков (рисунок 4) можно сделать вывод, что регуляризация с малым значением практически не влияет на величину ошибки, но с её ростом величина ошибки может начать возрастать.

Рассмотрим функцию регрессии в наилучшем случае и сравним с исходными данными (рисунок 5).

```
# Отображение наблюдений и линии регрессии
plt.figure(5, figsize=[8, 4])

xx = np.linspace(X[:].min(),X[:].max(), num=100).reshape(-1,1)

plt.subplot(1,1,1)
plt.scatter(X[:], y, color="grey", label="Sample", zorder=2)
plt.plot(xx, poly_pipe.predict(xx), "-", color="green", label="Regression")
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$")
plt.legend()
plt.grid(True)
```

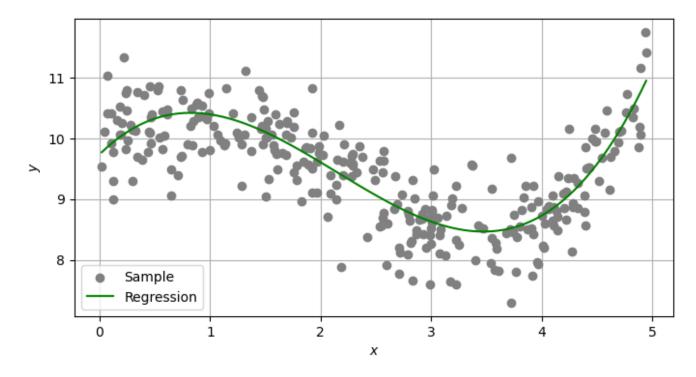


Рисунок 5 – Линия регрессии полинома 3 степени (отложенная выборка)

На графике показано, что функция регрессии принимает вид кривой, которая повторяет характер исходных данных.

## Использование run\_cross\_val

Повторим обучение, но уже не с отложенной выборкой, а с кроссвалилацией.

```
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков scores_cv = []
# степени полинома degrees = list(range(1, 25+1))
```

```
best degree = 0
best mse = float("inf")
poly pipe.named steps["linear model"].alpha = 0
for degree in degrees:
  # Установка очередной степени полинома
  poly pipe.named steps["polynoms"].degree = degree
  # Обучение и получение MSE и R^2
  score = run_cross_val(poly_pipe, X_train, y_train, n_splits=4, shuffle=True,
random_state=0)
  scores cv.append(score)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best mse > score["mse test"]:
    best mse = score["mse test"]
    best_degree = degree
# Итоговая лучшая степень полинома
print(f"Best degree: {best degree}. Best MSE: {best mse}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
poly_pipe.named_steps["polynoms"].degree = best_degree
poly pipe.fit(X train, y train)
print(f"Test MSE:{score_mse(y_test, poly_pipe.predict(X_test))}")
Best degree: 7. Best MSE: 0.21191353268258326.
Test MSE:0.21880004140096046
```

По результатам кросс-валидации следует выбрать полином 7 степени. Ошибка на тестовом множестве при этом немного выше, чем при использовании полинома 3 степени, но различие незначительно.

Построим графики MSE и  $R^2$  (рисунок 6).

```
mse_train = list(map(lambda score: score["mse_train"], scores_cv))
mse_test = list(map(lambda score: score["mse_test"], scores_cv))
r2_train = list(map(lambda score: score["r2_train"], scores_cv))
r2_test = list(map(lambda score: score["r2_test"], scores_cv))

plt.figure(6, figsize=[13, 8])

plt.subplot(1,2,1)
plt.title("$MSE$")
plt.plot(degrees, mse_train, "-", color="blue", label="Train")
```

```
plt.plot(degrees, mse_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$MSE$")
plt.legend()
plt.grid(True)

plt.subplot(1,2,2)
plt.title("$R^2$")
plt.plot(degrees, r2_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(degrees, r2_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$R^2$")
plt.legend()
plt.grid(True)

plt.tight_layout()
plt.show()
```

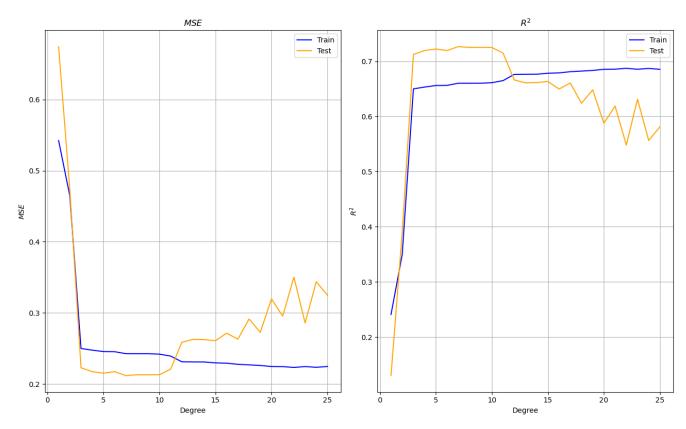


Рисунок 6 – Зависимость MSE и R<sup>2</sup> от степени полинома (кросс-валидация)

Как и в случае с отложенной выборкой, при кросс-валидации наблюдается резкий рост ошибки в районе 24 степени полинома.

Поведение ошибок и коэффициента детерминации аналогично поведению при отложенной выборке. При этом на графиках видно, что ошибка на

проверочном множестве достигает минимума именно при 7 степени полинома, в отличие от графиков кросс-валидации.

Рассмотрим влияние коэффициента регуляризации.

```
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков
scores cv = []
# степени регуляризации
alphas = [10, 1, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001]
best_alpha = float("inf")
best mse = float("inf")
for alpha in alphas:
  # Установка очередной степени полинома
  poly pipe.named steps["linear model"].alpha = alpha
  # Обучение и получение MSE и R^2
  score = run_cross_val(poly_pipe, X_train, y_train, n_splits=4, shuffle=True,
random state=∅)
  scores cv.append(score)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best mse > score["mse test"]:
    best mse = score["mse test"]
    best_alpha = alpha
# Итоговая лучшая степень регуляризации
print(f"Best alpha: {best alpha}. Best MSE: {best mse}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
poly_pipe.named_steps["linear_model"].alpha = best_alpha
poly pipe.fit(X train, y train)
print(f"Test MSE:{score_mse(y_test, poly_pipe.predict(X_test))}")
Best alpha: 0.1. Best MSE: 0.20868704696242676.
Test MSE:0.2204024828910193
mse_train = list(map(lambda score: score["mse_train"], scores_holdout))
mse test = list(map(lambda score: score["mse test"], scores holdout))
r2_train = list(map(lambda score: score["r2_train"], scores_holdout))
r2 test = list(map(lambda score: score["r2 test"], scores holdout))
plt.figure(7, figsize=[10, 6])
plt.subplot(1,2,1)
plt.title("$MSE$")
```

```
plt.plot(alphas, mse_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(alphas, mse_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$MSE$")
plt.xscale("log")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.subplot(1,2,2)
plt.title("$R^2$")
plt.plot(alphas, r2_train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(alphas, r2_test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("$R^2$")
plt.xscale("log")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

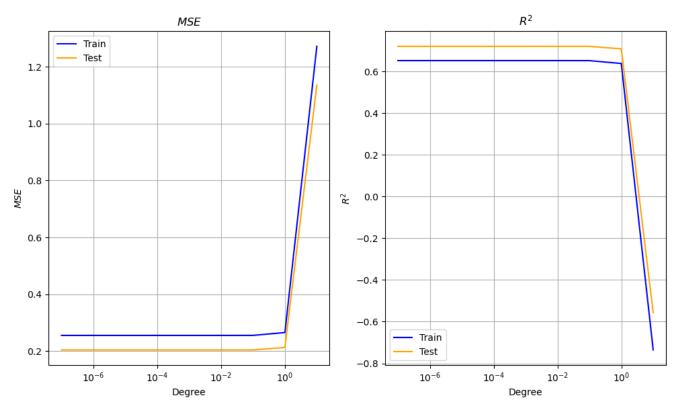


Рисунок 7 – Зависимость MSE и R^2 от степени регрессии (кросс-валидация)

Графики кросс-валидации (рисунок 7) отражают те же выводы, что были сделаны при отложенной выборке.

Рассмотрим функцию регрессии и сравним её с исходными данными (рисунок 8).

```
# Отображение наблюдений и линии регрессии
plt.figure(8, figsize=[8, 4])

xx = np.linspace(X[:].min(),X[:].max(), num=100).reshape(-1,1)

plt.subplot(1,1,1)
plt.scatter(X[:], y, color="grey", label="Sample", zorder=2)
plt.plot(xx, poly_pipe.predict(xx), "-", color="green", label="Regression")
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$")
plt.legend()
plt.grid(True)
```

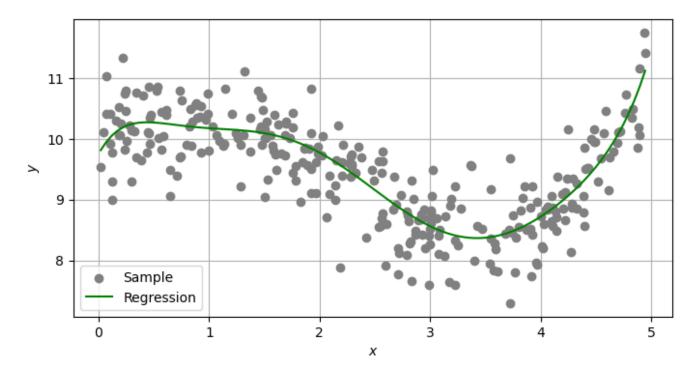


Рисунок 8 – Линия регрессии полинома 7 степени (кросс-валидация)

На графике видно, что кривая всё ещё повторяет характер исходных данных. В целом график похож на тот, что был получен ранее при отложенной выборке, однако при 0 <= X <= 2 кривая имеет немного другую форму. Возможно, такая форма даже точнее отражает характер исходных данных.

#### Выводы

Использование полинома позволяет получить более гибкую функцию на том же наборе данных. В обоих случаях полученная функция намного точнее повторяет характер исходных данных.

При использовании отложенной выборки был выбран полином 3 степени. При использовании кросс-валидации - полином 7 степени. Использование 3 степени даёт чуть меньшую ошибку на тестовом множестве, чем 7 степени, однако разница не столь велика. При этом визуально полином 7 степени чуть точнее следует исходным данным.

В общем случае с увеличением степени полинома ошибки возрастают, а коэффициент детерминации снижается. Это свидетельствует о том, что модель слишком гибкая и склонна к сильному переобучению.

Коэффициент регуляризации при больших значениях ухудшает качество модели, т.к. ошибка увеличивается.

## Решение задания 3

Импортируем класс логистической регрессии.

from sklearn.linear\_model import LogisticRegression

Загрузим набор данных для варианта 1.

Разделим исходные данные на входные параметры X и выходные y.

```
X = df[['X1', 'X2']]
X.head()
                    X2
         X1
0 11.145485 4.790697
1 3.094885 4.787600
2 8.577163 3.914841
   9.427682 5.266742
3
   3.514624 6.213900
y = df["Y"]
y.head()
0
     0
1
     1
2
     0
3
     0
     1
Name: Y, dtype: int64
```

Построим модель, с которой будем работать. Как и в прошлом задании, для входных данных необходимо получать полином заданной степени, для чего будет использован класс PolynomialFeatures пакета sklearn. Затем будет проводиться логистическая регрессия классом LogisticRegression с заданными парматерами.

```
max_iter=100,
                                      C=1e5,
                                      solver='liblinear',
                                      random state=12345
                                      ))
1)
      Разобьём данные в пропорции 70/30.
X_train, X_test, y_train, y_test = custom_split(X, y, train_size=0.7,
random state=0)
print(f"X train size: {len(X train)}. X test size: {len(X test)}.")
X train size: 350. X test size: 150.
      Построим диаграмму разброса (рисунок 9).
y arr train = np.asarray(y train)
y_one_indx_train = np.argwhere(y_arr_train==1).flatten()
y_zero_indx_train = np.argwhere(y_arr_train==0).flatten()
y_arr_test = np.asarray(y_test)
y_one_indx_test = np.argwhere(y_arr_test==1).flatten()
y_zero_indx_test = np.argwhere(y_arr_test==0).flatten()
plt.figure(9, figsize=[8, 6])
plt.subplot(1,1,1)
plt.scatter(X_train.iloc[y_zero_indx_train]['X1'],
X_train.iloc[y_zero_indx_train]['X2'], color="blue", label="$y_{true_{train}} =
0$")
plt.scatter(X_test.iloc[y_zero_indx_test]['X1'],
X_test.iloc[y_zero_indx_test]['X2'], color="blue", marker="x",
label="$y_{true_{test}} = 0$")
plt.scatter(X_train.iloc[y_one_indx_train]['X1'],
X_train.iloc[y_one_indx_train]['X2'], color="red", label="$y_{true_{train}} = 1$")
plt.scatter(X test.iloc[y one indx test]['X1'],
X_test.iloc[y_one_indx_test]['X2'], color="red", marker="x",
label="$y {true {test}} = 1$")
plt.xlabel("$x_1$")
plt.ylabel("$x_2$")
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()
```

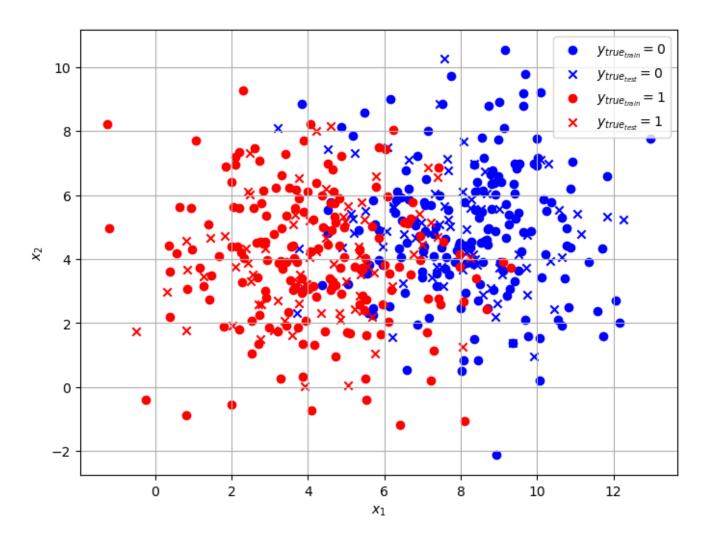


Рисунок 9 – Диаграмма разброса данных

## Использование run\_holdout

Рассмотрим применение отложенной выборки для поиска наилучшего значения гиперпараметра. Изменим функцию, чтобы получать новые оценки: точность модели на обучающем и проверочных множествах.

```
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков
scores_holdout = []
# степени полинома
degrees = list(range(1, 25+1))
best degree = 0
best score = -float("inf")
for degree in degrees:
  # Установка очередной степени полинома
  log pipe.named steps["polynoms"].degree = degree
  # Обучение и получение точности
  score = run_holdout_class(log_pipe, X_train, y_train, train_size=0.75,
random state=0)
  scores_holdout.append(score)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best score < score["test"]:</pre>
    best score = score["test"]
    best_degree = degree
# Итоговая лучшая степень полинома
print(f"Best degree: {best degree}. Best accuracy: {best score}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
log_pipe.named_steps["polynoms"].degree = best_degree
log_pipe.fit(X_train, y_train)
print(f"Test accuracy:{log_pipe.score(X_test, y_test)}")
Best degree: 12. Best accuracy: 0.89772727272727.
Test accuracy:0.84
```

Обучение с отложенной выборкой показало, что полином 12 степени даёт наименьшую ошибку на проверочном множестве. Однако на тестовом множестве точность немного ниже.

Построим график зависимости доли правильных классификаций от степени полинома для обучающего и проверочного подмножеств (рисунок 10).

```
train = list(map(lambda score: score["train"], scores_holdout))
test = list(map(lambda score: score["test"], scores_holdout))
plt.figure(10, figsize=[8, 4])
```

```
plt.subplot(1,1,1)
plt.title("Accuracy from poly degree")
plt.plot(degrees, train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(degrees, test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("Accuracy")
plt.legend()
plt.grid(True)

plt.tight_layout()
plt.show()
```

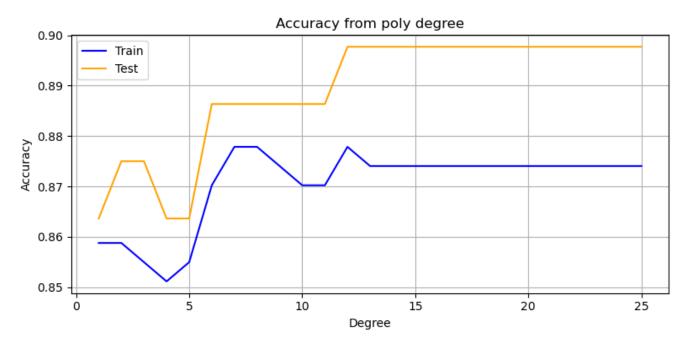


Рисунок 10 – Зависимость точности от степени полинома (отложенная выборка)

Как видно из графика, при увеличении степени полинома точность растёт. Однако по достижении 12 степени рост точности прекращается.

Рассмотрим зависимость точности от количества итераций (рисунок 11). Рассмотрим 15 значений итераций в диапазоне от 10 до 150.

```
iterations = np.linspace(10,150, num=15)

# массив для хранения оценок и построения по ним графиков
scores_holdout_iter = []

log_pipe.named_steps["polynoms"].degree = best_degree

for iter in iterations:
    # Установка количества итераций
    log_pipe.named_steps["regression"].max_iter = iter
```

```
# Обучение и сохранение оценок
  score = run_holdout_class(log_pipe, X_train, y_train, train_size=0.75,
random state=⊘)
  scores_holdout_iter.append(score)
train = list(map(lambda score: score["train"], scores_holdout_iter))
test = list(map(lambda score: score["test"], scores holdout iter))
plt.figure(11, figsize=[8, 4])
plt.subplot(1,1,1)
plt.title("Accuracy from n/o iterations")
plt.plot(iterations, train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(iterations, test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("Accuracy")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

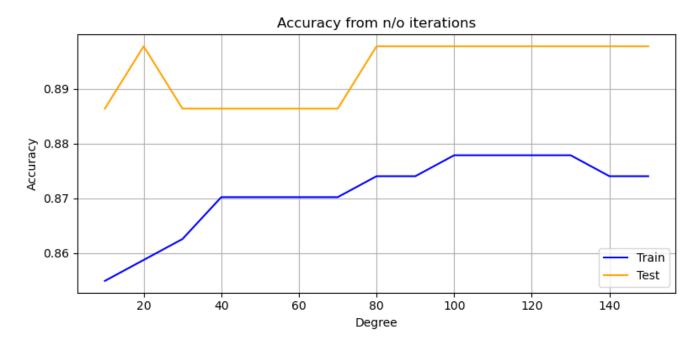


Рисунок 11 — Зависимость точности от количества итераций (отложенная выборка) Из графика видно, что с ростом числа итераций точность модели растёт. Однако, после 100 итераций точность в значительной степени не возрастает.

Построим результат классификации для наилучшего случая (12 степень полинома) для обучающего и тестового подмножеств (рисунок 12).

from matplotlib.colors import ListedColormap

```
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве с наилучшей степенью полинома
log_pipe.named_steps["polynoms"].degree = 12
log pipe.fit(X train, y train)
cmap = ListedColormap(["blue", "red"])
step = 0.01
x1_min = np.min([X_train["X1"].min(), X_test["X1"].min()])
x1_max = np.max([X_train["X1"].max(), X_test["X1"].max()])
x2_min = np.min([X_train["X2"].min(), X_test["X2"].min()])
x2_{max} = np.max([X_{train}]X2"].max(), X_{test}[X2"].max()])
x1_min = x1_min - (0.1*np.abs(x1_min))
x1_max = x1_max + (0.1*np.abs(x1_max))
x2 min = x2 min - (0.1*np.abs(x2 min))
x2 max = x2 max + (0.1*np.abs(x2 max))
xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x1_min, x1_max, step),
                      np.arange(x2 min, x2 max, step))
points = np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()]
Z = log_pipe.predict(points)
Z = Z.reshape(xx.shape)
plt.figure(12, figsize=[12, 4])
# plt.suptitle(title, fontsize=16)
plt.subplot(1,2,1)
plt.title("Train data")
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=cmap, alpha=.5)
scatter = plt.scatter(X_train[["X1"]], X_train[["X2"]], c=y_train, cmap=cmap,
s=80, alpha=0.5, label="True")
plt.scatter(X_train[["X1"]], X_train[["X2"]], c=log_pipe.predict(X_train),
cmap=cmap, s=20, label="Predicted")
plt.xlabel("X1")
plt.ylabel("X2")
plt.xlim(x1_min, x1_max)
plt.ylim(x2 min, x2 max)
plt.legend()
```

```
plt.grid(True)

plt.subplot(1,2,2)
plt.title("Test data")
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=cmap, alpha=.5)
scatter = plt.scatter(X_test[["X1"]], X_test["X2"], c=y_test, cmap=cmap, s=80,
alpha=0.5, label="True")
plt.scatter(X_test[["X1"]], X_test[["X2"]], c=log_pipe.predict(X_test), cmap=cmap,
s=20, label="Predicted")
plt.xlabel("X1")
plt.ylabel("X2")
plt.xlim(x1_min, x1_max)
plt.ylim(x2_min, x2_max)
plt.legend()
plt.grid(True)
```



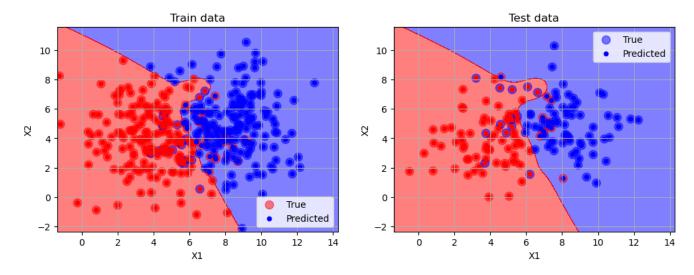


Рисунок 12 – Результаты классификации

Эти графики показывают, что основную часть данных удаётся правильно классифицировать, но существует немалое количество ошибок.

## Использование кросс-валидации

Повторим поиск значения гипермараметра и обучение модели, но уже с использованием кросс-валидации.

from sklearn.model\_selection import cross\_validate

```
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков scores\_cv = []
```

```
cv = KFold(n_splits=4, shuffle=True, random_state=0)
# степени полинома
degrees = list(range(1, 25+1))
best degree = 0
best score = -float("inf")
for degree in degrees:
  # Установка очередной степени полинома
  log pipe.named steps["polynoms"].degree = degree
  # Обучение и получение точности
  score = cross validate(log pipe, X train, y train, cv=cv,
return_train_score=True)
  score avg = {
    "train_score": score["train_score"].mean(),
    "test_score": score["test_score"].mean()
  }
  scores cv.append(score avg)
  # Если новые результаты лучше прежних
  if best_score < score_avg["test_score"]:</pre>
    best score = score avg["test score"]
    best degree = degree
# Итоговая лучшая степень полинома
print(f"Best degree: {best degree}. Best accuracy: {best score}.")
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве
log pipe.named steps["polynoms"].degree = best degree
log_pipe.fit(X_train, y_train)
print(f"Test accuracy:{log_pipe.score(X_test, y_test)}")
Best degree: 10. Best accuracy: 0.8599137931034483.
Test accuracy:0.84
```

Обучение с кросс-валидацией показало, что лучше всего подходит полином 10 степени. Точность на проверочном множестве немного выше точности на тестовом множестве, но различие не столь высоко, как при использовании полинома 12 степени.

Построим график зависимости доли правильных классификаций от степени полинома для обучающего и проверочного подмножеств (рисунок 13).

```
train = list(map(lambda score: score["train_score"], scores_cv))
test = list(map(lambda score: score["test_score"], scores_cv))

plt.figure(13, figsize=[8, 4])

plt.subplot(1,1,1)
plt.title("Accuracy from poly degree")
plt.plot(degrees, train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(degrees, test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("Accuracy")
plt.legend()
plt.grid(True)

plt.tight_layout()
plt.show()
```

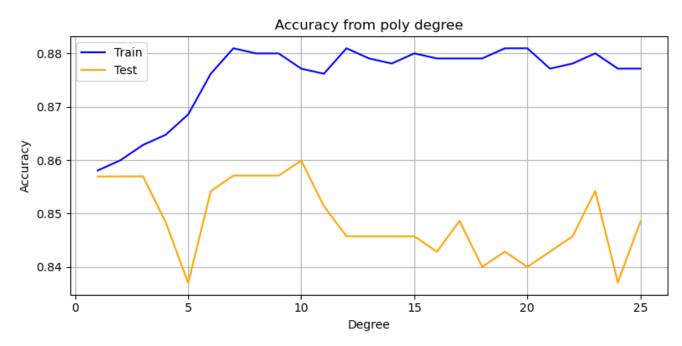


Рисунок 13 – Зависимость точности от степени полинома (кросс-валидация)

Из графика следует, что точность на тренировочном множестве выше, чем на проверочном. С увеличением степени полинома точность на обоих множествах в основном растёт, однако после 10 степени полинома точность на проверочном множестве падает, а на тренировочном остаётся практически без изменений.

Рассмотрим зависимость точности от количества итераций (рисунок 14). Рассмотрим 15 значений итераций в диапазоне от 10 до 150.

```
iterations = np.linspace(10,150, num=15)
# массив для хранения оценок и построения по ним графиков
scores cv iter = []
log pipe.named steps["polynoms"].degree = best degree
for iter in iterations:
  # Установка количества итераций
  log pipe.named steps["regression"].max iter = iter
  # Обучение и сохранение оценок
  score = cross_validate(log_pipe, X_train, y_train, cv=cv,
return train score=True)
  score_avg = {
    "train_score": score["train_score"].mean(),
    "test_score": score["test_score"].mean()
  scores_cv_iter.append(score_avg)
train = list(map(lambda score: score["train_score"], scores_cv_iter))
test = list(map(lambda score: score["test_score"], scores_cv_iter))
plt.figure(14, figsize=[8, 4])
plt.subplot(1,1,1)
plt.title("Accuracy from n/o iterations")
plt.plot(iterations, train, "-", color="blue", label="Train")
plt.plot(iterations, test, "-", color="orange", label="Test")
plt.xlabel("Degree")
plt.ylabel("Accuracy")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

#### Accuracy from n/o iterations

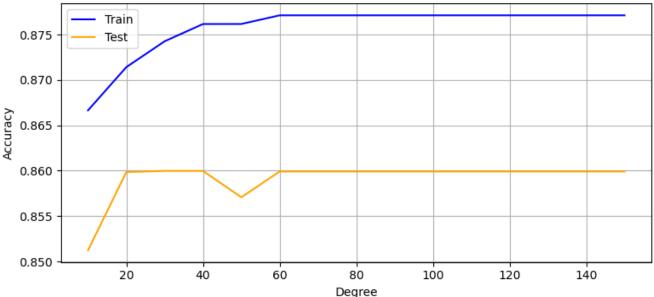


Рисунок 14 – Зависимость точности от количества итераций (кросс-валидация)

Из графика следует, что увеличение количества итераций позволяет увеличить точность, но после 60 итераций оценки точности практически не изменяются.

Построим результат классификации для наилучшего случая (10 степень полинома) для обучающего и тестового подмножеств (рисунок 15).

```
# Повторное обучение на всем обучающем подмножестве с наилучшей степенью полинома log_pipe.named_steps["polynoms"].degree = 10 log_pipe.fit(X_train, y_train)

cmap = ListedColormap(["blue", "red"])

step = 0.01

x1_min = np.min([X_train["X1"].min(), X_test["X1"].min()])
x1_max = np.max([X_train["X1"].max(), X_test["X1"].max()])

x2_min = np.min([X_train["X2"].min(), X_test["X2"].min()])
x2_max = np.max([X_train["X2"].max(), X_test["X2"].max()])

x1_min = x1_min - (0.1*np.abs(x1_min))
x1_max = x1_max + (0.1*np.abs(x2_min))
x2_min = x2_min - (0.1*np.abs(x2_min))
x2_max = x2_max + (0.1*np.abs(x2_max))
```

```
xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x1_min, x1_max, step),
                      np.arange(x2_min, x2_max, step))
points = np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()]
Z = log_pipe.predict(points)
Z = Z.reshape(xx.shape)
plt.figure(15, figsize=[12, 4])
# plt.suptitle(title, fontsize=16)
plt.subplot(1,2,1)
plt.title("Train data")
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=cmap, alpha=.5)
scatter = plt.scatter(X_train[["X1"]], X_train[["X2"]], c=y_train, cmap=cmap,
s=80, alpha=0.5, label="True")
plt.scatter(X_train[["X1"]], X_train[["X2"]], c=log_pipe.predict(X_train),
cmap=cmap, s=20, label="Predicted")
plt.xlabel("X1")
plt.ylabel("X2")
plt.xlim(x1_min, x1_max)
plt.ylim(x2 min, x2 max)
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.subplot(1,2,2)
plt.title("Test data")
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=cmap, alpha=.5)
scatter = plt.scatter(X_test[["X1"]], X_test["X2"], c=y_test, cmap=cmap, s=80,
alpha=0.5, label="True")
plt.scatter(X_test[["X1"]], X_test[["X2"]], c=log_pipe.predict(X_test), cmap=cmap,
s=20, label="Predicted")
plt.xlabel("X1")
plt.ylabel("X2")
plt.xlim(x1_min, x1_max)
plt.ylim(x2_min, x2_max)
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

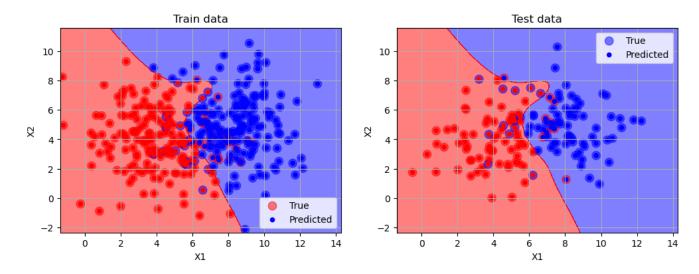


Рисунок 15 – Результаты классификации

Граница разделения классов хоть и различается с полиномом 12 степени, но на количество ошибочных классификаций она эти отличия практически не повлияли.

#### Выводы

Эксперименты показывают, что отложенная выборка и кросс-валидация дают разные решения, однако точность этих решений существенно не различается.

Оба подхода демонстрируют, что увеличение степени полинома в определённых пределах даёт прирост к точности предсказаний. Использование слишком больших степеней приводит к снижению точности на проверочных множествах, что свидетельствует о переобучении моделей.

Также рассмотрено влияние количества итераций при обучении на точность модели. Установлено, что с ростом числа итераций точность возрастает, однако при достижении некоторого порога точность перестаёт расти.

## ВЫВОДЫ

Реализованы классы линейной регрессии и стандартизации, совместимые с sklearn. Реализованы функции для организации отложенной выборки и кроссвалидации. Проведено обучение модели линейной регрессии со стандартизацией и регуляризацией при использовании отложенной выборки и кроссвалидации. Экспериментально получено, что кроссвалидация позволяет получить оценки лучше, чем отложенная выборка.

Изучены базовые метрики линейной регрессии и логистической регрессии. Для линейной регрессии использовались среднеквадратическая ошибка MSE и коэффициент детерминации  $R^2$ . Для логистической регрессии используется Accuracy (точность).

Изучены способы выбора гиперпараметров с использованием отложенной выборки и кросс-валидации. Установлено, что методы дают разные оценки и рекомендуют различающиеся параметры, однако существенной разницы в точности на тестовом множестве не наблюдается.