Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Факультет «Информатика и системы управления»

Кафедра «Системы обработки информации и управления»

Курс «Технологии машинного обучения»

Отчет по лабораторной работе № 3
«Подготовка обучающей и тестовой выборки, кросс-валидация и подбор гиперпараметров на примере метода ближайших соседей»

Выполнил:

студент группы ИУ5-65Б

Герасименко А.В.

Подпись и дата:

Проверил:

преподаватель каф. ИУ5

Гапанюк Ю.Е.

Подпись и дата:

г. Москва, 2021 г.

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

Цель лабораторной работы

Изучение способов подготовки выборки и подбора гиперпараметров на примере метода ближайших соседей.

Задание

1. Выберите набор данных (датасет) для решения задачи классификации или регрессии.
2. С использованием метода train_test_split разделите выборку на обучающую и тестовую.
3. Обучите модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оцените качество модели с помощью подходящих для задачи метрик.
4. Произведите подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и/или RandomizedSearchCV и кросс-валидации, оцените качество оптимальной модели. Желательно использование нескольких стратегий кросс-валидации.
5. Сравните метрики качества исходной и оптимальной моделей.

Загрузка данных

In [1]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
from typing import Dict, Tuple
from scipy import stats
from sklearn.datasets import load_wine
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate
from sklearn.model_selection import GridSearchCV, RandomizedSearchCV
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
from sklearn.metrics import plot_confusion_matrix
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score, f1_score, classi
from sklearn.metrics import confusion_matrix
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, mean_s
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")

wine = load_wine()
for x in wine:
    print(x)
```

```
data
target
```

```
frame
target_names
DESCR
```

In [2]:
```
data = pd.DataFrame(data= np.c_[wine['data'], wine['target']],
                    columns= wine['feature_names'] + ['target'])
```

Вывод верхних 5 строчек датасета

In [3]:
```
data.head()
```

Out[3]:

	alcohol	malic_acid	ash	alcalinity_of_ash	magnesium	total_phenols	flavanoids	nonflavanoic
0	14.23	1.71	2.43	15.6	127.0	2.80	3.06	
1	13.20	1.78	2.14	11.2	100.0	2.65	2.76	
2	13.16	2.36	2.67	18.6	101.0	2.80	3.24	
3	14.37	1.95	2.50	16.8	113.0	3.85	3.49	
4	13.24	2.59	2.87	21.0	118.0	2.80	2.69	

Разделение выборки на обучающую и тестовую с использованием метода train_test_split

In [4]:
```
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(wine.data, wine.target,
```

In [5]:
```
# Размер обучающей выборки
X_train.shape, Y_train.shape
```

Out[5]:
```
((133, 13), (133,))
```

In [6]:
```
# Размер тестовой выборки
X_test.shape, Y_test.shape
```

Out[6]:
```
((45, 13), (45,))
```

Функция train_test_split разделила исходную выборку таким образом, чтобы в обучающей и тестовой частях сохранились все классы.

In [7]:
```
np.unique(Y_train)
```

Out[7]:
```
array([0, 1, 2])
```

In [8]:
```
np.unique(Y_test)
```

Out[8]:
```
array([0, 1, 2])
```

In [9]:
```
def class_proportions(array: np.ndarray) -> Dict[int, Tuple[int, float]]:
    """
    Вычисляет пропорции классов
    array - массив, содержащий метки классов
    """
    # Получение меток классов и количества меток каждого класса
    labels, counts = np.unique(array, return_counts=True)
    # Превращаем количество меток в процент их встречаемости
    # делим количество меток каждого класса на общее количество меток
    counts_perc = counts/array.size
    # Теперь sum(counts_perc)==1.0
    # Создаем результирующий словарь,
    # ключом словаря является метка класса,
    # а значением словаря процент встречаемости метки
    res = dict()
    for label, count2 in zip(labels, zip(counts, counts_perc)):
        res[label] = count2
    return res

def print_class_proportions(array: np.ndarray):
    """
    Вывод пропорций классов
    """
    proportions = class_proportions(array)
    if len(proportions)>0:
        print('Метка \t Количество \t Процент встречаемости')
    for i in proportions:
        val, val_perc = proportions[i]
        val_perc_100 = round(val_perc * 100, 2)
        print('{} \t {} \t \t {}%'.format(i, val, val_perc_100))
```

In [10]:
```
print_class_proportions(wine.target)

# Функция train_test_split разделила исходную выборку таким образом,
# чтобы в обучающей и тестовой частях сохранились пропорции классов.
```

```
Метка     Количество      Процент встречаемости
0         59              33.15%
1         71              39.89%
2         48              26.97%
```

In [11]:
```
# Для обучающей выборки
print_class_proportions(Y_train)
```

```
Метка     Количество      Процент встречаемости
0         41              30.83%
1         54              40.6%
2         38              28.57%
```

In [12]:
```
# Для тестовой выборки
print_class_proportions(Y_test)
```

```
Метка     Количество      Процент встречаемости
0         18              40.0%
1         17              37.78%
2         10              22.22%
```

Обучение модели ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K

In [13]:
```
# 3 ближайших соседа
# Метрика accuracy вычисляет процент (долю в диапазоне от 0 до 1) правильно
cl1_1 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
cl1_1.fit(X_train, Y_train)
target1_0 = cl1_1.predict(X_train)
target1_1 = cl1_1.predict(X_test)
accuracy_score(Y_train, target1_0), accuracy_score(Y_test, target1_1)
```

Out[13]:
```
(0.8646616541353384, 0.6888888888888889)
```

In [14]:
```
# 7 ближайших соседей
# Метрика accuracy вычисляет процент (долю в диапазоне от 0 до 1) правильно
cl1_2 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
cl1_2.fit(X_train, Y_train)
target2_0 = cl1_2.predict(X_train)
target2_1 = cl1_2.predict(X_test)
accuracy_score(Y_train, target2_0), accuracy_score(Y_test, target2_1)
```

Out[14]:
```
(0.7669172932330827, 0.6444444444444445)
```

Построение модели с использованием кросс-валидации

In [15]:
```
scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=3), wine.data, wi

# Значение метрики accuracy для 3 фолдов
scores
```

Out[15]:
```
array([0.61666667, 0.57627119, 0.79661017])
```

In [16]:
```
# Усредненное значение метрики accuracy для 3 фолдов
np.mean(scores)
```

Out[16]:
```
0.6631826741996233
```

In [17]:
```
# использование метрики precision
scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=3),
                         wine.data, wine.target, cv=3,
                         scoring='precision_weighted')
scores, np.mean(scores)
```

Out[17]:
```
(array([0.61631579, 0.59473992, 0.78926159]), 0.6667724311739814)
```

In [18]:
```
# функция cross_validate позволяет использовать для оценки несколько метрик
scoring = {'precision': 'precision_weighted',
           'jaccard': 'jaccard_weighted',
           'f1': 'f1_weighted'}

scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=3),
                        wine.data, wine.target, scoring=scoring,
                        cv=3, return_train_score=True)
scores
```

Out[18]:
```
{'fit_time': array([0., 0., 0.]),
 'score_time': array([0.0156188 , 0.03124356, 0.01560211]),
 'test_precision': array([0.61631579, 0.59473992, 0.78926159]),
 'train_precision': array([0.84432192, 0.87868395, 0.78719633]),
 'test_jaccard': array([0.44786325, 0.41520347, 0.66077488]),
```

```
'train_jaccard': array([0.72223627, 0.78003999, 0.65344998]),
'test_f1': array([0.60380952, 0.57731661, 0.78515946]),
```

Подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации

In [19]:
```
n_range = np.array(range(3,57,3))
tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
tuned_parameters
```

Out[19]:
```
[{'n_neighbors': array([ 3,  6,  9, 12, 15, 18, 21, 24, 27, 30, 33, 36, 39,
42, 45, 48, 51,
        54])}]
```

In [20]:
```
%%time
clf_gs = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5, scori
clf_gs.fit(X_train, Y_train)
```

```
Wall time: 564 ms
```

Out[20]:
```
GridSearchCV(cv=5, estimator=KNeighborsClassifier(),
             param_grid=[{'n_neighbors': array([ 3,  6,  9, 12, 15, 18, 21,
24, 27, 30, 33, 36, 39, 42, 45, 48, 51,
       54])}],
             scoring='accuracy')
```

In [21]:
```
clf_gs.cv_results_
```

Out[21]:
```
{'mean_fit_time': array([0.00312467, 0.00625453, 0.        , 0.00312428, 0.
00312424,
        0.        , 0.        , 0.006249  , 0.        , 0.00312209,
        0.        , 0.        , 0.        , 0.0044302 , 0.00312443,
        0.        , 0.        , 0.        ]),
 'std_fit_time': array([0.00624933, 0.00766021, 0.        , 0.00624857, 0.0
0624847,
        0.        , 0.        , 0.00765343, 0.        , 0.00624418,
        0.        , 0.        , 0.        , 0.00614004, 0.00624886,
        0.        , 0.        , 0.        ]),
 'mean_score_time': array([0.        , 0.00311832, 0.00443697, 0.00312691,
0.00312438,
        0.00312433, 0.0044292 , 0.        , 0.00312643, 0.        ,
        0.001302  , 0.00937481, 0.00312409, 0.00625587, 0.00312395,
        0.00624857, 0.00442619, 0.00937696]),
 'std_score_time': array([0.        , 0.00623665, 0.00615026, 0.00625381,
0.00624876,
        0.00624866, 0.00614316, 0.        , 0.00625286, 0.        ,
        0.00260401, 0.0076545 , 0.00624819, 0.00766184, 0.0062479 ,
        0.0076529 , 0.00613903, 0.01250175]),
 'param_n_neighbors': masked_array(data=[3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24, 27, 3
0, 33, 36, 39, 42,
                    45, 48, 51, 54],
              mask=[False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False],
        fill_value='?',
             dtype=object),
 'params': [{'n_neighbors': 3},
  {'n_neighbors': 6},
  {'n_neighbors': 9},
  {'n_neighbors': 12},
  {'n_neighbors': 15},
  {'n_neighbors': 18},
  {'n_neighbors': 21},
  {'n_neighbors': 24},
```

```
  {'n_neighbors': 27},
  {'n_neighbors': 30},
  {'n_neighbors': 33},
  {'n_neighbors': 36},
  {'n_neighbors': 39},
  {'n_neighbors': 42},
  {'n_neighbors': 45},
  {'n_neighbors': 48},
  {'n_neighbors': 51},
  {'n_neighbors': 54}],
 'split0_test_score': array([0.77777778, 0.7037037 , 0.62962963, 0.6296296
3, 0.59259259,
        0.7037037 , 0.74074074, 0.74074074, 0.77777778, 0.77777778,
        0.66666667, 0.81481481, 0.81481481, 0.77777778, 0.85185185,
        0.81481481, 0.81481481, 0.81481481]),
 'split1_test_score': array([0.62962963, 0.66666667, 0.7037037 , 0.6666666
7, 0.77777778,
        0.77777778, 0.77777778, 0.74074074, 0.7037037 , 0.74074074,
        0.74074074, 0.74074074, 0.74074074, 0.74074074, 0.74074074,
        0.74074074, 0.74074074, 0.74074074]),
 'split2_test_score': array([0.74074074, 0.77777778, 0.74074074, 0.7407407
4, 0.81481481,
        0.74074074, 0.74074074, 0.74074074, 0.7037037 , 0.74074074,
        0.74074074, 0.74074074, 0.74074074, 0.74074074, 0.74074074,
        0.74074074, 0.74074074, 0.74074074]),
 'split3_test_score': array([0.69230769, 0.69230769, 0.65384615, 0.6538461
5, 0.65384615,
        0.61538462, 0.61538462, 0.65384615, 0.65384615, 0.65384615,
        0.65384615, 0.65384615, 0.65384615, 0.65384615, 0.65384615,
        0.65384615, 0.65384615, 0.65384615]),
 'split4_test_score': array([0.76923077, 0.69230769, 0.65384615, 0.5384615
4, 0.65384615,
        0.80769231, 0.76923077, 0.73076923, 0.76923077, 0.76923077,
        0.73076923, 0.73076923, 0.65384615, 0.73076923, 0.73076923,
        0.73076923, 0.73076923, 0.65384615]),
 'mean_test_score': array([0.72193732, 0.70655271, 0.67635328, 0.64586895,
0.6985755 ,
        0.72905983, 0.72877493, 0.72136752, 0.72165242, 0.73646724,
        0.70655271, 0.73618234, 0.72079772, 0.72877493, 0.74358974,
        0.73618234, 0.73618234, 0.72079772]),
 'std_test_score': array([0.0549673 , 0.0376241 , 0.04022445, 0.06526393,
0.08368797,
        0.06672022, 0.05862027, 0.03398085, 0.0461644 , 0.04391533,
        0.03819152, 0.05105521, 0.06099129, 0.04075767, 0.06317467,
        0.05105521, 0.05105521, 0.06099129]),
 'rank_test_score': array([ 9, 14, 17, 18, 16,  6,  7, 11, 10,  2, 15,  3,
12,  7,  1,  3,  3,
```

In [22]:
```
# Лучшая модель
clf_gs.best_estimator_
```

Out[22]:
```
KNeighborsClassifier(n_neighbors=45)
```

In [23]:
```
# Лучшее значение метрики
clf_gs.best_score_
```

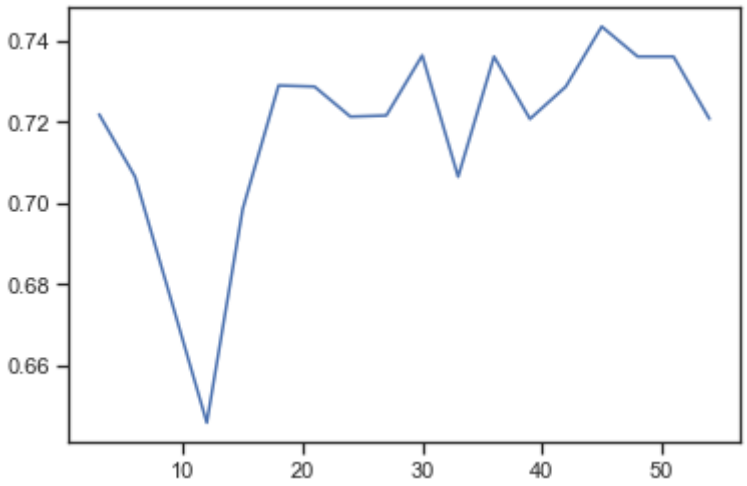
Out[23]:
```
0.7435897435897435
```

In [24]:
```
# Лучшее значение параметров
clf_gs.best_params_
```

Out[24]:
```
{'n_neighbors': 45}
```

In [25]:
```
# Изменение качества на тестовой выборке в зависимости от К-соседей
plt.plot(n_range, clf_gs.cv_results_['mean_test_score'])
```

Out[25]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x1ead7652400>]



Таким образом, оптимальный гиперпараметр K = 45.

Сравнение метрики качества исходной и оптимальной моделей

Accuracy

Метрика вычисляет процент (долю в диапазоне от 0 до 1) правильно определенных классов.

Эту метрику обычно переводят как "точность", но перевод не является удачным, потому что совпадает с переводом для другой метрики - "precision".

Чтобы не сталкиваться с неточностями перевода, названия метрик можно не переводить.

In [26]:
```
# Y_test - эталонное значение классов из исходной (тестовой) выборки
# target* - предсказанное значение классов

# 3 ближайших соседа
accuracy_score(Y_test, target1_1)
```

Out[26]: 0.6888888888888889

In [27]:
```
# 7 ближайших соседей
accuracy_score(Y_test, target2_1)
```

Out[27]: 0.6444444444444445

In [28]:
```
# Y_train - значение классов из тренировочной выборки
# target* - предсказанное значение классов

# 3 ближайших соседа
accuracy_score(Y_train, target1_0)
```

Out[28]: 0.8646616541353384

In [29]:
```
# 7 ближайших соседей
accuracy_score(Y_train, target2_0)
```

Out[29]: 0.7669172932330827

Метрика "Accuracy" показывает точность по всем классам, но точность может быть различной для различных классов. Это очень серьезная проблема, которая часто возникает на несбалансированных выборках.

In [30]:
```
def accuracy_score_for_classes(
    y_true: np.ndarray,
    y_pred: np.ndarray) -> Dict[int, float]:
    """
    Вычисление метрики accuracy для каждого класса
    y_true - истинные значения классов
    y_pred - предсказанные значения классов
    Возвращает словарь: ключ - метка класса,
    значение - Accuracy для данного класса
    """
    # Для удобства фильтрации сформируем Pandas DataFrame
    d = {'t': y_true, 'p': y_pred}
    df = pd.DataFrame(data=d)
    # Метки классов
    classes = np.unique(y_true)
    # Результирующий словарь
    res = dict()
    # Перебор меток классов
    for c in classes:
        # отфильтруем данные, которые соответствуют
        # текущей метке класса в истинных значениях
        temp_data_flt = df[df['t']==c]
        # расчет accuracy для заданной метки класса
        temp_acc = accuracy_score(
            temp_data_flt['t'].values,
            temp_data_flt['p'].values)
        # сохранение результата в словарь
        res[c] = temp_acc
    return res

def print_accuracy_score_for_classes(
    y_true: np.ndarray,
    y_pred: np.ndarray):
    """
    Вывод метрики accuracy для каждого класса
    """
    accs = accuracy_score_for_classes(y_true, y_pred)
    if len(accs)>0:
        print('Метка \t Accuracy')
    for i in accs:
        print('{} \t {}'.format(i, accs[i]))
```

In [31]:
```
# 3 ближайших соседа
print_accuracy_score_for_classes(Y_test, target1_1)
```

```
Метка     Accuracy
0         0.8333333333333334
1         0.7058823529411765
2         0.4
```

Accuracy для классов 0 составляет 83%, 1 составляет 71%, но для класса 2 только 40%.

In [32]:
```
# 7 ближайших соседей
print_accuracy_score_for_classes(Y_test, target2_1)
```

```
Метка     Accuracy
0         0.7777777777777778
1         0.5882352941176471
2         0.5
```

Accuracy для классов 0 составляет 78%, 1 составляет 59%, но для класса 2 только 50%.

Обучим нашу модель на найденном лучшем параметре и проведем сравнение

In [33]:
```
# Обучение модели и оценка качества с учетом подобранных гиперпараметров
clf_gs.best_estimator_.fit(X_train, Y_train)
target3_0 = clf_gs.best_estimator_.predict(X_train)
target3_1 = clf_gs.best_estimator_.predict(X_test)
```

In [34]:
```
# Новое качество модели
accuracy_score(Y_train, target3_0), accuracy_score(Y_test, target3_1)
```

Out[34]: (0.7368421052631579, 0.6888888888888889)

In [35]:
```
# Качество модели до подбора гиперпараметров (7)
accuracy_score(Y_train, target2_0), accuracy_score(Y_test, target2_1)
```

Out[35]: (0.7669172932330827, 0.6444444444444445)

In [36]:
```
# Качество модели до подбора гиперпараметров (3)
accuracy_score(Y_train, target1_0), accuracy_score(Y_test, target1_1)
```

Out[36]: (0.8646616541353384, 0.6888888888888889)