РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ

Факультет физико-математических и естественных наук

Кафедра математического моделирования и искусственного интеллекта

ОТЧЕТ ПО КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЕ № 1

Дисциплина: Методы машинного обучения

студент: Чичкина Ольга Константиновна

Группа: НПИбд-01-21

Москва 2024

Вариант 17

Контрольная работа 1 – Вариант 17

1. Набор данных: wine_quality
2. Независимая переменная: features/density
3. Зависимая переменная: features/total sulfur dioxide
4. Визуализация для независимой переменной – эмпирическая плотность распределения
5. Визуализация для зависимой переменной – столбчатая диаграмма
6. Показатель качества регрессии – MSE (mean squared error)

1

Загрузка и предварительный анализ данных

```
import tensorflow as tf
import tensorflow_datasets as tfds
import numpy as np
import pandas as pd
import keras
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.linear_model import LinearRegression, Ridge, Lasso
from sklearn.metrics import r2_score
from tensorflow.keras.models import Sequential
from tensorflow.keras.layers import Dense
from tensorflow.keras.regularizers import l1, l2
from tensorflow import keras
```

```
# Загрузка набора данных
ds = tfds.load('wine_quality', split='train')
```

```
df = tfds.as_dataframe(ds)
```

```
df.head()
```

ures/density	features/fixed acidity	features/free sulfur dioxide	features/pH	features/residual sugar	fe
1.00080	7.6	44.0	3.22	18.35	
0.99110	6.3	35.0	3.38	1.20	
0.99076	5.2	6.0	3.51	1.10	

0.99076	5.3	6.0	3.51	1.10
0.99672	6.6	20.0	3.08	10.70
0.99016	5.9	57.0	3.09	3.80

Next steps: View recommended plots

```
df.shape
```

```
(4898, 12)
```

```
df.corr()
```

	features/alcohol	features/chlorides	features/citric acid	featur
features/alcohol	1.000000	-0.360189	-0.075729	
features/chlorides	-0.360189	1.000000	0.114364	
features/citric acid	-0.075729	0.114364	1.000000	
features/density	-0.780138	0.257211	0.149503	
features/fixed acidity	-0.120881	0.023086	0.289181	
features/free sulfur dioxide	-0.250104	0.101392	0.094077	
features/pH	0.121432	-0.090439	-0.163748	
features/residual sugar	-0.450631	0.088685	0.094212	
features/sulphates	-0.017433	0.016763	0.062331	
features/total sulfur dioxide	-0.448892	0.198910	0.121131	
features/volatile acidity	0.067718	0.070512	-0.149472	
quality	0.435575	-0.209934	-0.009209	

```
corr_matrix = df.corr()
corr_matrix.apply('abs')
```

	features/alcohol	features/chlorides	features/citric acid	featur
features/alcohol	1.000000	0.360189	0.075729	
features/chlorides	0.360189	1.000000	0.114364	
features/citric acid	0.075729	0.114364	1.000000	
features/density	0.780138	0.257211	0.149503	
features/fixed acidity	0.120881	0.023086	0.289181	
features/free sulfur dioxide	0.250104	0.101392	0.094077	
features/pH	0.121432	0.090439	0.163748	
features/residual sugar	0.450631	0.088685	0.094212	
features/sulphates	0.017433	0.016763	0.062331	
features/total sulfur dioxide	0.448892	0.198910	0.121131	
features/volatile acidity	0.067718	0.070512	0.149472	
quality	0.435575	0.209934	0.009209	

пары признаков с наиболее низкой и наиболее высокой корреляцией.

```
min_corr = corr_matrix.apply('abs').idxmin(axis = 1)
min_df = pd.concat([min_corr, corr_matrix.apply('abs').min()], axis=1)
min_df.columns = ['Пары с минимальной корреляцией', 'Значение']
min_df
```

	Пары с минимальной корреляцией	Значение
features/alcohol	features/sulphates	0.017433
features/chlorides	features/sulphates	0.016763
features/citric acid	quality	0.009209
features/density	features/volatile acidity	0.027114
features/fixed acidity	features/sulphates	0.017143
features/free sulfur dioxide	features/pH	0.000618
features/pH	features/free sulfur dioxide	0.000618
features/residual sugar	features/sulphates	0.026664
features/sulphates	features/chlorides	0.016763
features/total sulfur dioxide	features/pH	0.002321
features/volatile acidity	features/fixed acidity	0.022697
quality	features/free sulfur dioxide	0.008158

Next steps: View recommended plots

```
max_corr = corr_matrix.apply('abs').replace({1:0}).idxmax(axis = 1)
max_df = pd.concat([max_corr, corr_matrix.apply('abs').replace({1:0}).max()], axis=1)
max_df.columns = ['Пары с максимальной корреляцией', 'Значение']
max_df
```

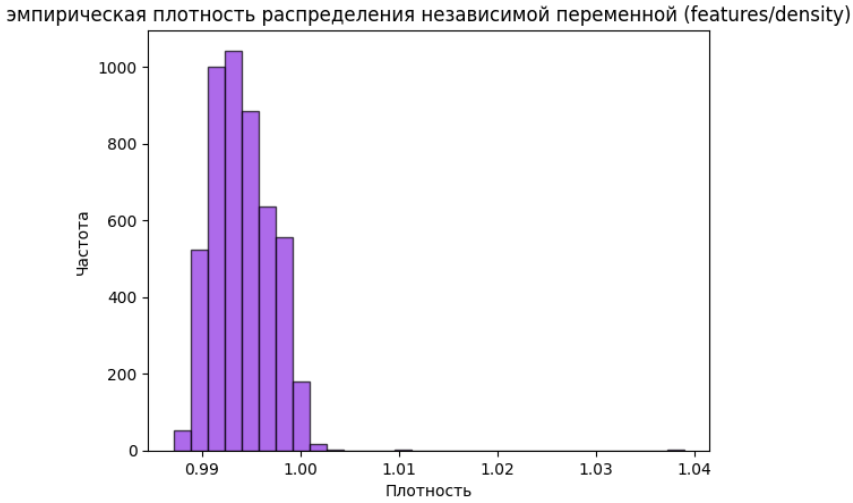
	Пары с максимальной корреляцией	Значение
features/alcohol	features/density	0.780138
features/chlorides	features/alcohol	0.360189
features/citric acid	features/fixed acidity	0.289181
features/density	features/residual sugar	0.838967
features/fixed acidity	features/pH	0.425858
features/free sulfur dioxide	features/total sulfur dioxide	0.615501
features/pH	features/fixed acidity	0.425858
features/residual sugar	features/density	0.838967
features/sulphates	features/pH	0.155951
features/total sulfur dioxide	features/free sulfur dioxide	0.615501
features/volatile acidity	quality	0.194723
quality	features/alcohol	0.435575

Next steps: View recommended plots

2

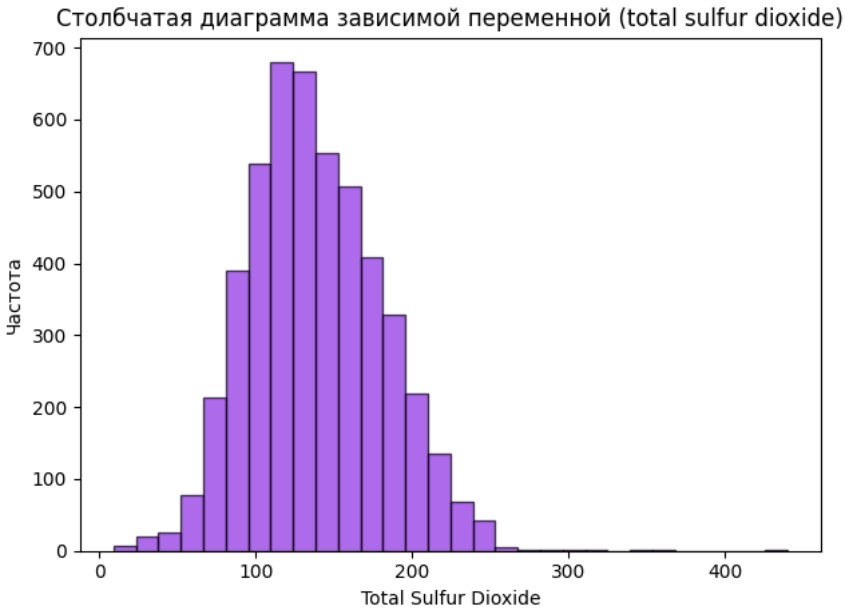
визуализация независимой переменной

```
plt.subplot(1, 1, 1)
df['features/density'].plot(kind='hist', bins=30, color='blueviolet', edgecolor='black', alpha= 0.7)
plt.title('эмпирическая плотность распределения независимой переменной (features/density)')
plt.xlabel('Плотность')
plt.ylabel('Частота')
plt.show()
```



визуализация зависимой переменной

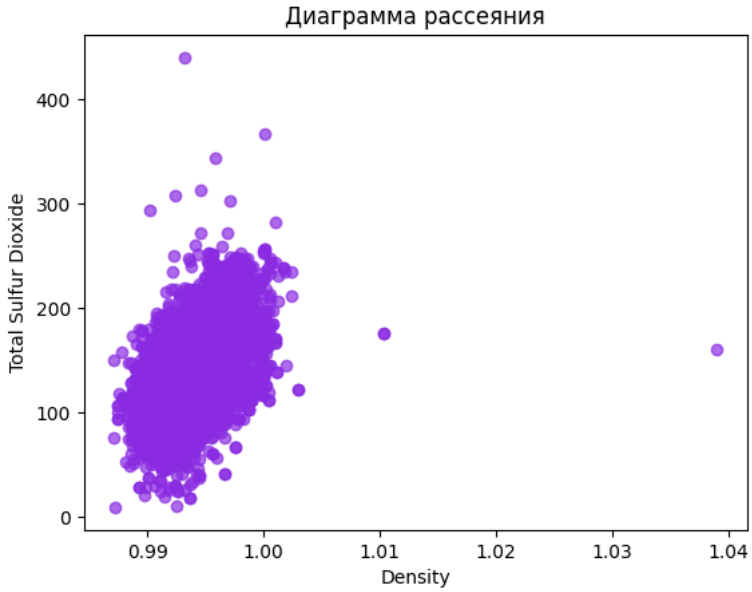
```
plt.subplot(1, 1, 1)
plt.hist(df['features/total sulfur dioxide'], bins=30, color='blueviolet', edgecolor='black', alpha=0.7)
plt.title('Столбчатая диаграмма зависимой переменной (total sulfur dioxide)')
plt.xlabel('Total Sulfur Dioxide')
plt.ylabel('Частота')
plt.tight_layout()
plt.show()
```



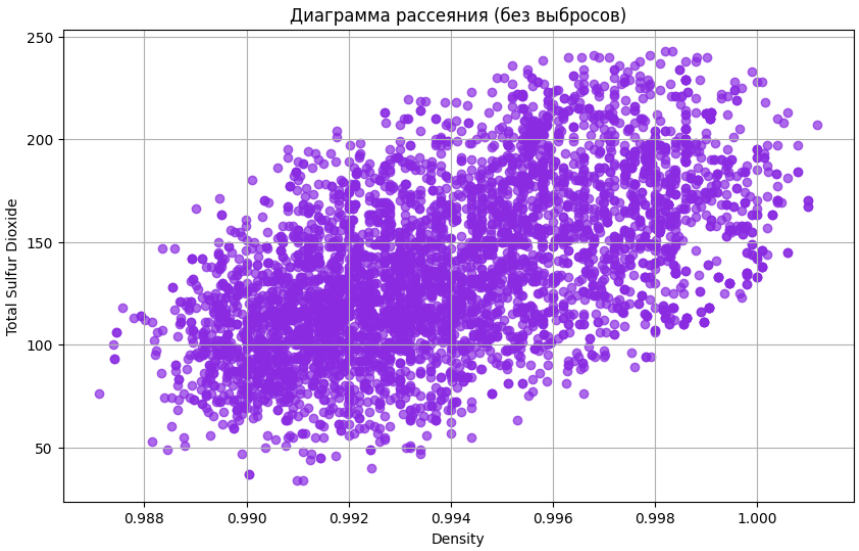
3

диаграмма рассеяния

```
# Построение диаграммы рассеяния

plt.scatter(x=df['features/density'], y=df['features/total sulfur dioxide'], color='blueviolet', alpha= 0.7)
plt.title('Диаграмма рассеяния')
plt.xlabel('Density')
plt.ylabel('Total Sulfur Dioxide')
plt.show()
```




```
from scipy.spatial.distance import mahalanobis
clear = df.drop(df[((df['features/density']<6.5) & (df['features/total sulfur dioxide']<=3))|(df['features/density']>=6.9) &
clear.dropna(inplace=True)

# Вычисление средних значений
mean_features = np.mean(df['features/density'])
mean_target = np.mean(df['features/total sulfur dioxide'])

# Вычисление ковариационной матрицы
cov_matrix = np.cov(np.vstack((df['features/density'], df['features/total sulfur dioxide'])), rowvar=True)

# Вычисление квадратов расстояний Махаланобиса
distances = [mahalanobis([f, t], [mean_features, mean_target], np.linalg.inv(cov_matrix)) for f, t in zip(df['features/densit

# Определение выбросов (исключение точек, расположенных дальше определенного порога)
threshold = 2.5  # Вы можете настроить этот порог по вашему усмотрению
outliers_indices = np.array(distances) < threshold

# Фильтрация данных
filtered_features = df['features/density'][outliers_indices]
filtered_target = df['features/total sulfur dioxide'][outliers_indices]

# Построение обновленной диаграммы рассеяния
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(filtered_features, filtered_target, color='blueviolet', alpha=0.7)
plt.title('Диаграмма рассеяния (без выбросов)')
plt.xlabel('Density')
plt.ylabel('Total Sulfur Dioxide')
plt.grid(True)
plt.show()
```



4

Построение парной линейной регрессии

```
# Преобразование данных для обучения модели
X_train = filtered_features.values.reshape(-1, 1)
y_train = filtered_target.values

# Создание и обучение модели линейной регрессии
linear_model = LinearRegression()
linear_model.fit(X_train, y_train)
linear_pred = linear_model.predict(X_train)

# Предсказание на тестовых данных
y_pred_linear = linear_model.predict(X_train)

# Вычисление R^2
r2_linear = r2_score(y_train, y_pred_linear)
print(f"R^2 для парной линейной регрессии: {r2_linear}")
```

```
R^2 для парной линейной регрессии: 0.3185569160877727
```

Нейронная сеть с одним нейроном

```
# Создание нейронной сети
nn = keras.Sequential([
    keras.layers.Dense(1, input_shape=(1,))
])

# Компиляция нейронной сети
nn.compile(optimizer='adam', loss='mean_squared_error')

# Обучение нейронной сети
nn.fit(x=filtered_features.values.reshape(-1, 1), y=filtered_target.values, epochs=100)

# Предсказание с помощью нейронной сети
nn_pred = nn.predict(filtered_features.values.reshape(-1, 1))
```

```
Epoch 1/100
150/150 [==============================] - 2s 3ms/step - loss: 20728.4980
Epoch 2/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 20645.9219
Epoch 3/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 20563.5645
Epoch 4/100
```

```
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 20481.5820
Epoch 5/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 20399.7871
Epoch 6/100
150/150 [==============================] - 1s 5ms/step - loss: 20318.2324
Epoch 7/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 20236.9062
Epoch 8/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 20155.8945
Epoch 9/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 20075.1699
Epoch 10/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 19994.5449
Epoch 11/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 19914.1387
Epoch 12/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 19834.0449
Epoch 13/100
150/150 [==============================] - 1s 3ms/step - loss: 19754.1543
Epoch 14/100
150/150 [==============================] - 1s 5ms/step - loss: 19674.4961
Epoch 15/100
150/150 [==============================] - 1s 4ms/step - loss: 19595.0371
Epoch 16/100
150/150 [==============================] - 1s 5ms/step - loss: 19515.7422
Epoch 17/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 19436.7031
Epoch 18/100
150/150 [==============================] - 1s 4ms/step - loss: 19357.8828
Epoch 19/100
150/150 [==============================] - 1s 4ms/step - loss: 19279.2012
Epoch 20/100
150/150 [==============================] - 1s 4ms/step - loss: 19200.6758
Epoch 21/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 19122.4258
Epoch 22/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 19044.4004
Epoch 23/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 18966.6035
Epoch 24/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 18888.9297
Epoch 25/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 18811.4121
Epoch 26/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 18734.0684
Epoch 27/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 18656.9609
Epoch 28/100
150/150 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 18580.0293
Epoch 29/100
150/150 [==============================] - 0s 2ms/step - loss: 18503.2676
```

```
nn_r2 = r2_score(filtered_target, nn_pred)
print(f"R^2 для нейронной сети: {nn_r2}")
```

```
R^2 для нейронной сети: -7.560059431930867
```

сравнение результатов

```
if r2_linear > nn_r2:
    print("Линейная регрессия дала лучший результат.")
elif r2_linear < nn_r2:
    print("Нейронная сеть дала лучший результат.")
else:
    print("Обе модели показали одинаковый результат.")
```

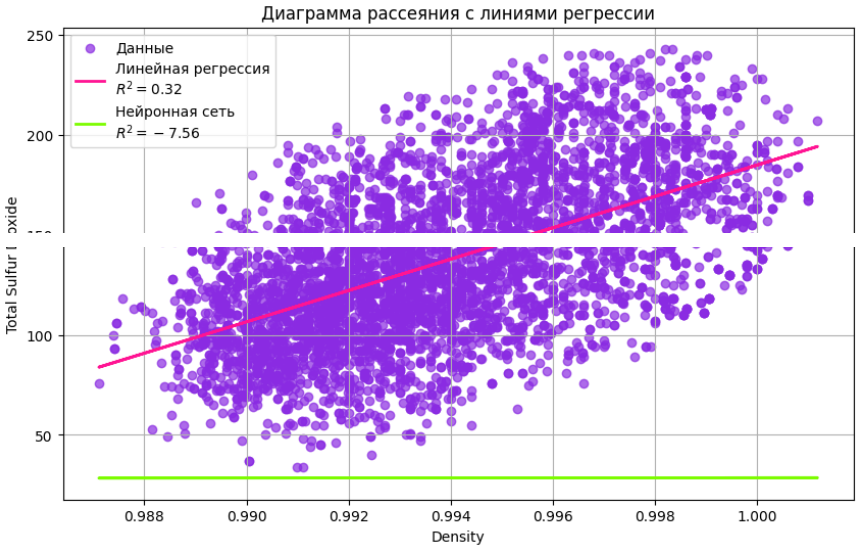
```
Линейная регрессия дала лучший результат.
```

5

Построение диаграммы рассеяния и линий регрессии

```
# Построение диаграммы рассеяния и линий регрессии
plt.figure(figsize=(10, 6))

# Диаграмма рассеяния
plt.scatter(filtered_features, filtered_target, color='blueviolet', alpha=0.7, label='Данные')

# Линия линейной регрессии
plt.plot(filtered_features, linear_pred, color='deeppink', linewidth=2, label=f'Линейная регрессия\n$R^2 = {r2_linear:.2f}$
```

```
# Линия нейронной сети
plt.plot(filtered_features, nn_pred, color='lawngreen', linewidth=2, label=f'Нейронная сеть\n$R^2 = {nn_r2:.2f}$')

# Подписи осей и заголовок
plt.title('Диаграмма рассеяния с линиями регрессии')
plt.xlabel('Density')
plt.ylabel('Total Sulfur Dioxide')
plt.grid(True)
plt.legend()

# Отображение графика
plt.show()
```



6

разбиения набора данных на обучающую и контрольную выборки

```
# Разбиение данных на обучающую и контрольную выборки
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(filtered_features, filtered_target, test_size=0.2, random_state=42)

# Создание и адаптация нормализующего слоя для признаков
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(X_train.values.reshape(-1, 1))

# Нормализация признаков
X_train_scaled = scaler.transform(X_train.values.reshape(-1, 1)).flatten()
X_test_scaled = scaler.transform(X_test.values.reshape(-1, 1)).flatten()

# Нормализация зависимого признака
scaler_y = StandardScaler()
y_train_scaled = scaler_y.fit_transform(y_train.values.reshape(-1, 1)).flatten()
y_test_scaled = scaler_y.transform(y_test.values.reshape(-1, 1)).flatten()
```

7

Чтобы изменить содержимое ячейки, дважды нажмите на нее (или выберите "Ввод")

```
# Линейная регрессия
linear_regressor = LinearRegression()
linear_regressor.fit(X_train_scaled.reshape(-1, 1), y_train_scaled)

# Гребневая регрессия (Ridge)
```

```
ridge_regressor = Ridge(alpha=1.0)  # alpha - параметр регуляризации
ridge_regressor.fit(X_train_scaled.reshape(-1, 1), y_train_scaled)

# Лассо регрессия (Lasso)
lasso_regressor = Lasso(alpha=1.0)  # alpha - параметр регуляризации
lasso_regressor.fit(X_train_scaled.reshape(-1, 1), y_train_scaled)
```

```
▾ Lasso
Lasso()
```

Чтобы изменить содержимое ячейки, дважды нажмите на нее (или выберите "Ввод")

```
# Создание нейронной сети с гребневой регуляризацией (L2)
ridge_model = Sequential([
    Dense(64, activation='relu', input_shape=(1,), kernel_regularizer=l2(0.001)),
    Dense(32, activation='relu', kernel_regularizer=l2(0.001)),
    Dense(1)
])

# Компиляция модели
ridge_model.compile(optimizer='adam', loss='mse')

# Обучение модели
ridge_history = ridge_model.fit(X_train_scaled, y_train_scaled, epochs=100, validation_data=(X_test_scaled, y_test_scaled),
```

```
# Создание нейронной сети с лассо регуляризацией (L1)
lasso_model = Sequential([
    Dense(64, activation='relu', input_shape=(1,), kernel_regularizer=l1(0.001)),
    Dense(32, activation='relu', kernel_regularizer=l1(0.001)),
    Dense(1)
])

# Компиляция модели
lasso_model.compile(optimizer='adam', loss='mse')

# Обучение модели
lasso_history = lasso_model.fit(X_train_scaled, y_train_scaled, epochs=100, validation_data=(X_test_scaled, y_test_scaled),
```

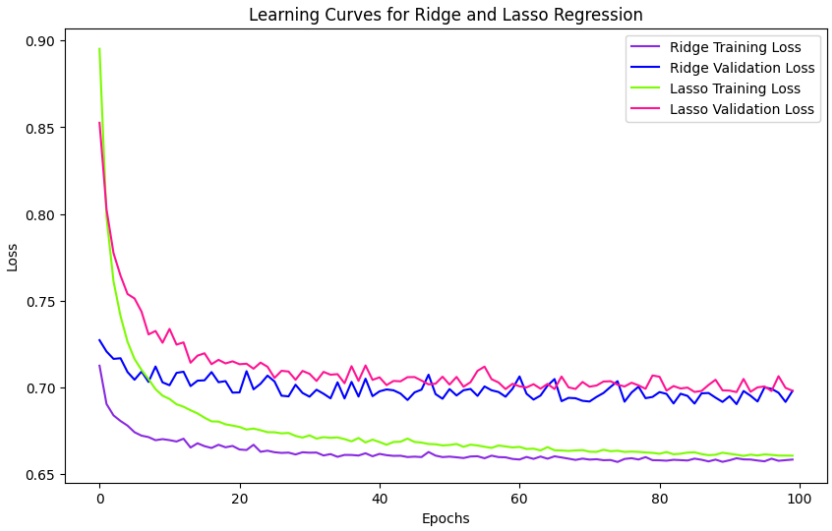
```
# Предсказание на валидационной выборке
ridge_pred = ridge_model.predict(X_test_scaled)
lasso_pred = lasso_model.predict(X_test_scaled)
```

```
30/30 [==============================] - 0s 2ms/step
30/30 [==============================] - 0s 2ms/step
```

```
# Вычисление MSE для обеих моделей
ridge_mse = mean_squared_error(y_test_scaled, ridge_pred)
lasso_mse = mean_squared_error(y_test_scaled, lasso_pred)

print(f"Ridge MSE on test set: {ridge_mse}")
print(f"Lasso MSE on test set: {lasso_mse}")
```

```
Ridge MSE on test set: 0.695260763168335
Lasso MSE on test set: 0.691796600818634
```

```
# Визуализация кривых обучения для гребневой и лассо регрессии
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(ridge_history.history['loss'], color='blueviolet', label='Ridge Training Loss')
plt.plot(ridge_history.history['val_loss'], color='blue', label='Ridge Validation Loss')
plt.plot(lasso_history.history['loss'], color='lawngreen', label='Lasso Training Loss')
plt.plot(lasso_history.history['val_loss'], color='deeppink', label='Lasso Validation Loss')
plt.title("Learning Curves for Ridge and Lasso Regression")
plt.xlabel('Epochs')
plt.ylabel('Loss')
plt.legend()
plt.show()
```




```
# Создание DataFrame из данных
df = pd.DataFrame(ds)

# Извлечение всех признаков, кроме 'density' и 'total sulfur dioxide'
all_features = [k for k in df['features'][0].keys() if k not in ['density', 'total sulfur dioxide']]

# Вычисление медианных значений для признаков
features_data = df['features'].apply(lambda x: [x[feature] for feature in all_features])
features_df = pd.DataFrame(features_data.tolist(), columns=all_features)

median_values = features_df.median()

print("Медианные значения признаков:")
print(median_values)
```

```
Медианные значения признаков:
alcohol                10.4
chlorides             0.043
citric acid            0.32
fixed acidity           6.8
free sulfur dioxide    34.0
pH                     3.18
residual sugar          5.2
sulphates              0.47
volatile acidity       0.26
dtype: object
```

```
# Сортировка тестовых данных
sorted_indices = np.argsort(X_test_scaled, axis=0)
X_test_sorted = X_test_scaled[sorted_indices].reshape(-1)
y_test_sorted = y_test_scaled[sorted_indices].reshape(-1)
ridge_pred_sorted = ridge_pred[sorted_indices].reshape(-1)
lasso_pred_sorted = lasso_pred[sorted_indices].reshape(-1)
```

```
# Создание графика
plt.figure(figsize=(10, 6))

# Визуализация точек тестовой выборки
plt.scatter(X_test_sorted, y_test_sorted, color='blueviolet', label='Тестовая выборка')

# Визуализация медианных значений
plt.scatter(median_values[1], median_values[2], color='blue', label='Медианные значения', s=100)

# Визуализация предсказаний моделей линиями
plt.plot(X_test_sorted, ridge_pred_sorted, linewidth=3, color='deeppink', label='Предсказания Ridge')
plt.plot(X_test_sorted, lasso_pred_sorted, linewidth=3, color='lawngreen', label='Предсказания Lasso')

# Подписи осей и заголовок
plt.xlabel('Density (независимый признак)')
```

```
plt.ylabel('Total Sulfur Dioxide (зависимый признак)')
plt.title('Визуализация медианных значений и предсказаний моделей')

# Создание легенды
plt.legend()

# Отображение графика
plt.grid(True)
plt.show()
```