

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана

(национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ	ГОЛОВНОЙ УЧЕБНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ И МЕТОДИЧЕСКИЙ ЦЕНТР
	ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ РЕАБИЛИТАЦИИ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ
	ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ
КАФЕЛРА	СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ И УПРАВЛЕНИЯ

РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА К НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

HA TEMY:

	IIA II	21 VI y .	
Решен	ие задачи ма	шинного обуч	чения
Студент	ИУ5Ц-84Б		К.Р. Падалко
Руководитель НИР	(группа)	(подпись, дата)	(И.О. Фамилия) Ю.Е. Гапанюк
•		(подпись, дата)	(И.О. Фамилия)

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)»

(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

	УТВЕРЖДА	Ю
3a	ведующий кафедрой	ИУ5
		(индекс)
		В.И. Терехов
		(И.О. Фамилия)
	(подпись)	
		(дата)

ЗАДАНИЕ

на выполнение научно-исследовательской работы

•		
по теме Решение задачи машинного обучения		
Студент группы ИУ5Ц-84Б Падалко Ксен	ия Романовна	
(Фамилия	, имя, отчество)	
Направленность НИР (учебная, исследовательская, прак	тическая, производст	венная, др.)
ИССЛЕДОВАТЕЛЬО	СКАЯ	
Источник тематики (кафедра, предприятие, НИР) КА	ФЕДРА	
График выполнения НИР:		
25% к 3 нед., 50% к 9 нед., 75% к 12	нел., 75% к 15	нел
Техническое задание:		
Решение задачи машинного обучения. Результатом прое		олержаний
описания моделей, тексты программ и результаты экспе		одоржащии
отпесний моделен, текеты программ и результаты экспе	риментов.	
Odonus aura uguna ugasadoogu asi augi ngbamuu		
Оформление научно-исследовательской работы:		
Расчетно-пояснительная записка на 45 листах фор		<u>. </u>
Перечень графического (иллюстративного) материала (ч	іертежи, плакаты, сла	иды и т.п.)
Дата выдачи задания « <u>07</u> » <u>февраля</u> 2025 г.		
Руководитель НИР		Ю.Е. Гапанюк
	(подпись, дата)	(И.О. Фамилия)
Студент		К.Р. Падалко
	(подпись, дата)	(И.О. Фамилия)

<u>Примечание</u>: Задание оформляется в двух экземплярах: один выдается студенту, второй хранится на кафедре.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Основная часть	6
1. Поиск и выбор набора данных для построения моделей машинного обучения.	6
2. Проведение разведочного анализа данных. Построение графиков, необходимых для понимания структуры данных. Анализ и заполнение пропусков в данных.	7
3. Выбор признаков, подходящих для построения моделей. Кодирование категориальных признаков. Масштабирование данных. Формирование вспомогательных признаков, улучшающих качество моделей	
4. Проведение корреляционного анализа данных. Формирование промежуточных выводов о возможности построения моделей машинного обучения	22
5. Выбор метрик для последующей оценки качества моделей	24
6. Выбор наиболее подходящих моделей для решения задачи классификации	26
7. Формирование обучающей и тестовой выборок на основе исходного набора данных	26
8. Построение базового решения (baseline) для выбранных моделей без подбора гиперпараметров. Производится обучение моделей на основе обучающей выборки и оценка качества моделей на основе тестовой	27
выборки	
10. Повторение пункта 8 для найденных оптимальных значений гиперпараметров. Сравнение качества полученных моделей с качеством baseline-моделей.	
11. Формирование выводов о качестве построенных моделей на основе	39
12. Вывод	42
Заключение	44
Список использованных источников информации	45

Введение

Данное исследование основано на анализе набора данных о качестве вина, который представляет собой ценный ресурс для изучения факторов, влияющих на органолептические характеристики вин. Этот набор данных содержит информацию о различных химических и физико-химических свойствах вина, что позволяет глубже понять, как эти факторы влияют на общее восприятие качества продукта.

Целевым признаком для данного исследования выбрана переменная "quality" — оценка качества вина, основанная на дегустации. Этот выбор обусловлен важностью понимания факторов, влияющих на восприятие качества вина, и их взаимодействия с конкретными химическими характеристиками.

В рамках исследования мы сосредоточимся на анализе структуры данных и основных характеристик набора данных:

- fixed acidity фиксированная кислотность;
- volatile acidity летучая кислотность;
- citric acid лимонная кислота;
- residual sugar остаточный сахар;
- chlorides хлористые соединения;
- free sulfur dioxide свободный двуокись серы;
- total sulfur dioxide общий диоксид серы;
- density плотность;
- pH уровень pH;
- sulphates сульфаты;
- alcohol содержание алкоголя;
- quality оценка качества (от 0 до 10).

Анализ этих характеристик позволит выявить возможные корреляции между химическими параметрами и качеством вина, а также определить наиболее значимые факторы, оказывающие влияние на его восприятие.

Таким образом, данное исследование расширит наше понимание химических аспектов, определяющих качество вина, и предоставит основы для разработки рекомендаций по улучшению производства винодельческой продукции.

Поставим цели, которых мы хотим добиться, выполнив данную научноисследовательскую работу.

Цели:

- 1) Поиск и выбор набора данных для построения моделей машинного обучения.
- 2) Проведение разведочного анализа данных. Построение графиков, необходимых для понимания структуры данных. Анализ и заполнение пропусков в данных.
- 3) Выбор признаков, подходящих для построения моделей. Кодирование категориальных признаков. Масштабирование данных. Формирование вспомогательных признаков, улучшающих качество моделей.
- 4) Проведение корреляционного анализа данных. Формирование промежуточных выводов о возможности построения моделей машинного обучения.
- 5) Выбор метрик для последующей оценки качества моделей.
- б) Выбор наиболее подходящих моделей для решения задачи классификации или регрессии.
- 7) Формирование обучающей и тестовой выборок на основе исходного набора данных.
- 8) Построение базового решения (baseline) для выбранных моделей без подбора гиперпараметров. Производится обучение моделей на основе обучающей выборки и оценка качества моделей на основе тестовой выборки.
- 9) Подбор гиперпараметров для выбранных моделей.
- 10) Повторение пункта 8 для найденных оптимальных значений гиперпараметров. Сравнение качества полученных моделей с качеством baseline-моделей.

11) Формирование выводов о качестве построенных моделей на основе выбранных метрик.

Основная часть

Ссылка на датасет: https://www.kaggle.com/datasets/uciml/red-wine-quality-cortez-et-al-2009

1. Поиск и выбор набора данных для построения моделей машинного обучения.

```
# Подключаем б
import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns
import streamlit as st
import matplotlib.pyplot as plt
from catboost import Pool, CatBoostClassifier
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
from sklearn.linear_model import LinearRegression, LogisticRegression
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score, f1_score, classification_report
from sklearn.model_selection import train_test_split, learning_curve
#from sklearn.metrics import plot_confusion_mate
from sklearn.metrics import confusion_matrix, ConfusionMatrixDisplay
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, mean_squared_log_error, median_absolute_error, r2_score
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
from sklearn.svm import SVC, NuSVC, LinearSVC, OneClassSVM, SVR, NuSVR, LinearSVR
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, DecisionTreeRegressor, export_graphviz
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier, RandomForestRegressor
from sklearn.ensemble import ExtraTreesClassifier, ExtraTreesRegressor
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier, GradientBoostingRegressor
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
from sklearn.preprocessing import label_binarize
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")
```

Здесь я переименовала названия каждого столбца, так как в источнике данных не было конкретных наименований для столбцов.

```
# Список колонок датасета
col_list = ['fixed acidity',
             'volatile acidity'
            'citric acid',
             'residual sugar',
            'chlorides',
             'free sulfur dioxide',
             'total sulfur dioxide',
             'density',
             'sulphates',
'alcohol',
             'quality']
    # Загрузка датасета с правильным разделителем
    data = pd.read_csv('winequality-red.csv', names=col_list, header=0, sep=",")
    print("Файл успешно загружен.")
except FileNotFoundError:
   print("Файл не найден.")
   print("Ошибка парсинга: проверьте разделитель или формат файла.")
```

Файл успешно загружен, теперь рассматриваем следующее.

2. Проведение разведочного анализа данных. Построение графиков, необходимых для понимания структуры данных. Анализ и заполнение пропусков в данных.

Выводим информацию о датасете.

Выводим первые 5 строк датасета.

<pre>data.head()</pre>												
	fixed acidity	volatile acidity	citric acid	residual sugar	chlorides	free sulfur dioxide	total sulfur dioxide	density	рН	sulphates	alcohol	quality
0	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9.4	5
1	7.8	0.88	0.00	2.6	0.098	25.0	67.0	0.9968	3.20	0.68	9.8	5
2	7.8	0.76	0.04	2.3	0.092	15.0	54.0	0.9970	3.26	0.65	9.8	5
3	11.2	0.28	0.56	1.9	0.075	17.0	60.0	0.9980	3.16	0.58	9.8	6
4	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9.4	5

Подсчитаем количество строк и столбцов в датасете и выводим результат.

```
# Подсчитаем количество строк и столбцов в датасете

num_rows, num_cols = data.shape

# Выводим результат

print(f"Количество столбцов: {num_cols}, количество строк: {num_rows}")

Количество столбцов: 12, количество строк: 1599
```

Выводим названия колонок.

Выводим типы колонок.

```
# Выводим типы колонок
data.dtypes
fixed acidity float64
volatile acidity float64
citric acid float64
residual sugar float64
chlorides
                            float64
free sulfur dioxide float64
total sulfur dioxide float64
density
                            float64
рΗ
                            float64
sulphates
                           float64
alcohol
                          float64
quality
                              int64
dtype: object
```

Практически в каждом колонке имеется тип float64, это значит, что все колонки имеют вещественные числа.

Проверим датасет на пропуски и на дубликаты.

```
# Проверим датасет на пропуски
data.isnull().sum()
fixed acidity
volatile acidity
                       0
citric acid
residual sugar
                      0
chlorides
free sulfur dioxide
total sulfur dioxide
                      0
density
sulphates
alcohol
quality
dtype: int64
# Проверим датасет на дубликаты
data.duplicated().sum()
```

Пропусков нет, а дубликаты есть. Удаляем дубликаты.

```
# Удаление дубликатов
data_cleaned = data.drop_duplicates()
print(f'Количество строк после удаления дубликатов: {data_cleaned.shape[0]}')

# Сохранение очищенного датасета
data_cleaned.to_csv('winequality-red-cleaned.csv', sep=';', index=False)

Количество строк после удаления дубликатов: 1359
```

Подсчитаем уникальные значения в столбце датасета.

```
# Подсчитаем уникальные значения в столбце датасета
data['quality'].value_counts()

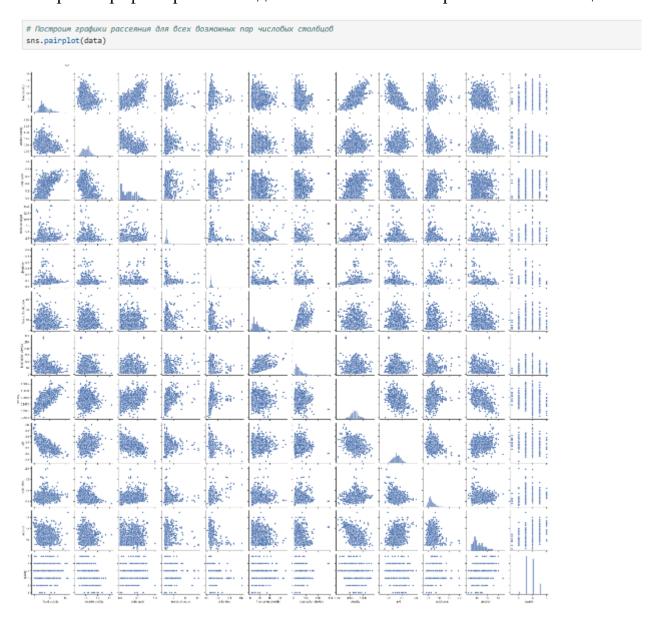
quality
5 681
6 638
7 199
4 53
8 18
3 10
Name: count, dtype: int64
```

В столбце 'quality' значение '5' встречается 681 раз, а значение '6' - 638 раз, '7' - 199 раз, '4' - 53 раз, '8' - 18 раз, '3' - 10 раз.

Набор данных не содержит пропусков, категориальные признаки

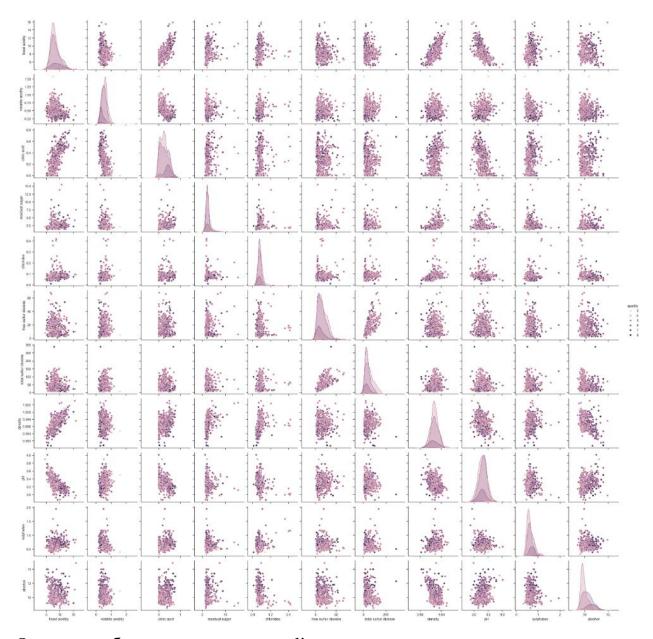
закодированы.

Построим графики рассеяния для всех возможных пар числовых столбцов.



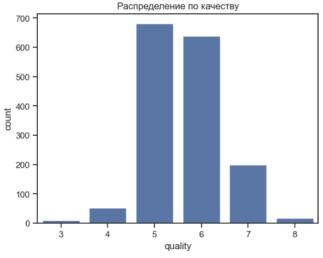
Построим графики рассеяния для всех возможных пар числовых столбцов quality.

Построим графики рассеяния для всех возможных пар числовых столбцов quality sns.pairplot(data.sample(500), hue='quality')



Оценим дисбаланс классов для quality.

```
# Оценим дисбаланс классов для quality
sns.countplot(x='quality', data=data)
plt.title('Распределение по качеству')
plt.show()
```



```
data['quality'].value_counts()

quality
5   681
6   638
7   199
4   53
8   18
3   10
Name: count, dtype: int64
```

Подсчитаем дисбаланс классов.

```
# Подсчитаем дисбаланс качеств

total = data.shape[0]
quality_counts = data['quality'].value_counts(normalize=True).sort_index()
for q, pct in quality_counts.items():
    print(f'Kaчество {q} составляет {round(pct * 100, 2)}%.')

Качество 3 составляет 3.31%.

Качество 4 составляет 3.31%.

Качество 5 составляет 42.59%.

Качество 6 составляет 39.9%.

Качество 7 составляет 12.45%.

Качество 8 составляет 11.3%.
```

В данном случае, качество 5 составляет примерно 42.59% от общего количества экземпляров, в то время как качество 6 составляет примерно 39.90%. Качество 7 составляет 12.45%, а более низкие качества (4, 8 и 3) составляют значительно меньшую долю — 3.31%, 1.13% и 0.63% соответственно.

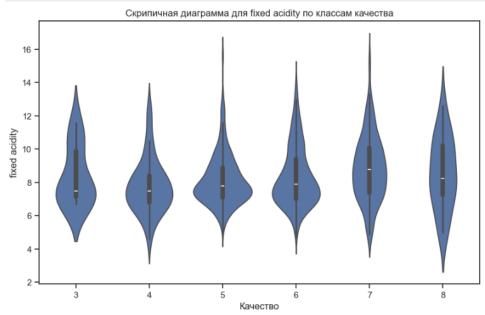
Вывод подтверждает наличие дисбаланса качеств в данных. Преобладание качеств 5 и 6 над остальными может оказать влияние на способность модели классификации корректно идентифицировать все уровни качества. В частности, поскольку качества 5 и 6 составляют значительную часть выборки, модель может быть склонна к неправильному классифицированию экземпляров, относящихся к более низким качествам (4, 8 и 3), как к качествам

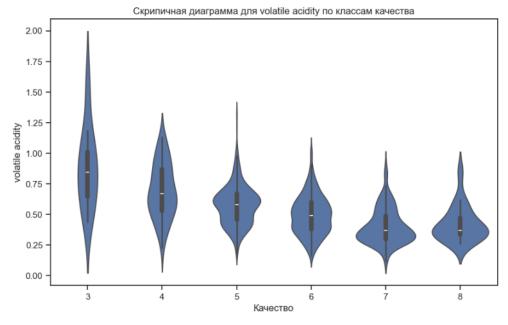
5 или 6. Это может привести к снижению общей эффективности модели в предсказании всех уровней качества вина.

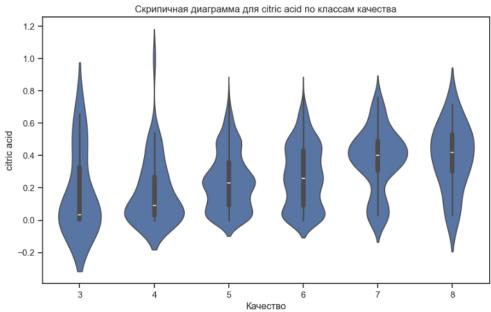
Скрипичные диаграммы для числовых колонок.

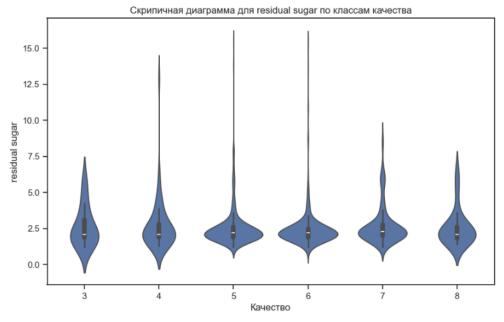
```
numeric_columns = [
    'fixed acidity',
    'volatile acidity',
    'citric acid',
    'residual sugar',
    'chlorides',
    'free sulfur dioxide',
    'density',
    'pH',
    'sulphates',
    'alcohol'

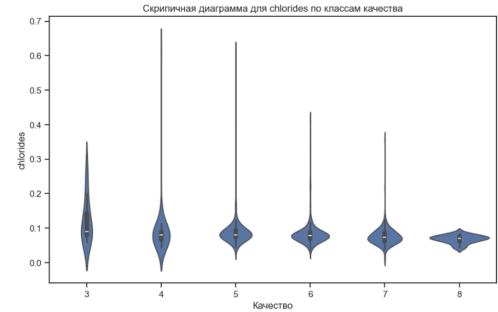
# Nocmpoenue скрипичных диаграмм
for col in numeric_columns:
    plt.figure(figsize=(10,6))
    sns.violinplot(x='quality', y=col, data=data)
    plt.title(f'Скрипичная диаграмма для {col} по классам качества')
    plt.xlabel('Качество')
    plt.ylabel(col)
    plt.show()
```

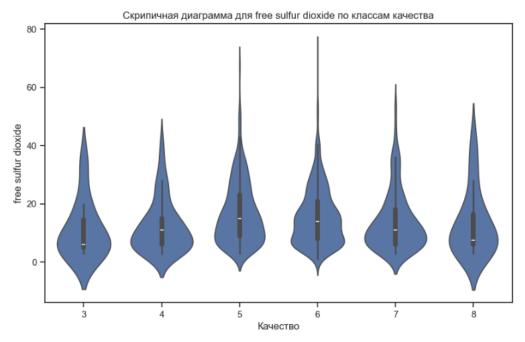


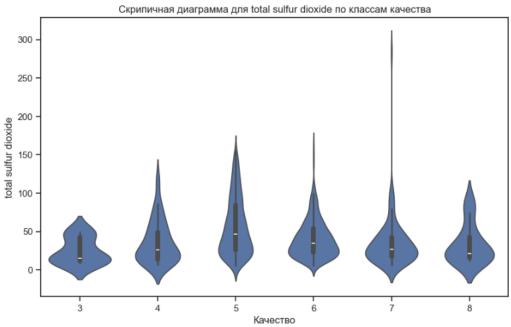


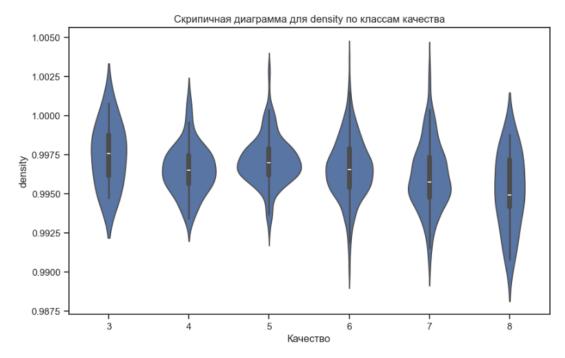


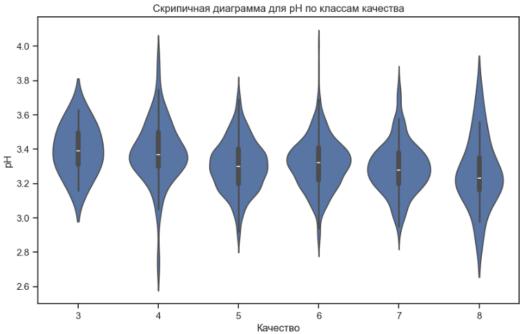


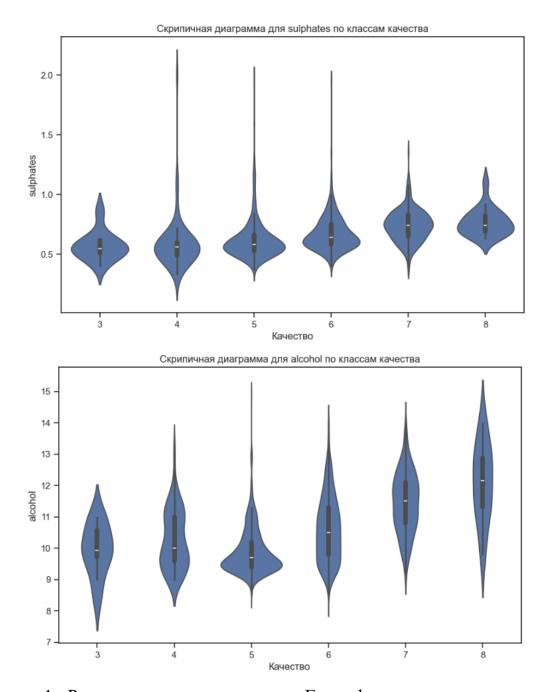












- 1. Различие в распределении. Если формы скрипичных диаграмм для разных классов значительно отличаются (например, одна скрипичная диаграмма имеет более широкий разброс значений или имеет более выраженные хвосты), это может указывать на различия в распределении признаков между классами.
- 2. Выбросы и экстремальные значения. Различия в форме скрипичных диаграмм могут также указывать на наличие выбросов или экстремальных значений в одном из классов.

- 3. Потенциальная предсказательная сила признаков. Если форма скрипичной диаграммы для одного из классов более выражена или имеет более четкие пики, чем для другого класса, это может указывать на то, что эти признаки имеют более высокую предсказательную силу для одного из классов.
- 4. Важность признаков. Различия в форме скрипичных диаграмм могут помочь определить, какие признаки могут быть более важными для разделения классов.
- 3. Выбор признаков, подходящих для построения моделей. Кодирование категориальных признаков. Масштабирование данных. Формирование вспомогательных признаков, улучшающих качество моделей.

Для построения моделей будем использовать все признаки. Категориальные признаки закодированы, поэтому выполним масштабирование данных.

Числовые колонки для масштабирования данных.

```
scale_cols = [
    'fixed acidity',
    'volatile acidity',
    'citric acid',
    'residual sugar',
    'chlorides',
    'free sulfur dioxide',
    'total sulfur dioxide',
    'density',
    'pH',
    'sulphates',
    'alcohol'
]

# Cosdaem экземпляр класса MinMaxScaler
scaler = MinMaxScaler()

# Применяем масштабирование к выбранным колонкам
scaled_data = scaler.fit_transform(data[scale_cols])
```

Добавим масштабированные данные в набор данных.

```
# Добавляем масштабированные обратно в набор данных
for i in range(len(scale_cols)):
    col = scale_cols[i]
    new_col_name = col + '_scaled'
    data[new_col_name] = scaled_data[:, i]
```

Выводим первые 5 строк датасета.

	# Выводим первые 5 строк датасета data.head()
--	--

	fixed acidity	volatile acidity		residual sugar	chlorides	free sulfur dioxide	total sulfur dioxide	density	рН	sulphates	 volatile acidity_scaled	citric acid_scaled	residual sugar_scaled	chlorides_scaled	free sulfur dioxide_scaled
0	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	 0.397260	0.00	0.068493	0.106845	0.140845
1	7.8	0.88	0.00	2.6	0.098	25.0	67.0	0.9968	3.20	0.68	 0.520548	0.00	0.116438	0.143573	0.338028
2	7.8	0.76	0.04	2.3	0.092	15.0	54.0	0.9970	3.26	0.65	 0.438356	0.04	0.095890	0.133556	0.197183
3	11.2	0.28	0.56	1.9	0.075	17.0	60.0	0.9980	3.16	0.58	 0.109589	0.56	0.068493	0.105175	0.225352
4	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	 0.397260	0.00	0.068493	0.106845	0.140845

5 rows × 23 columns

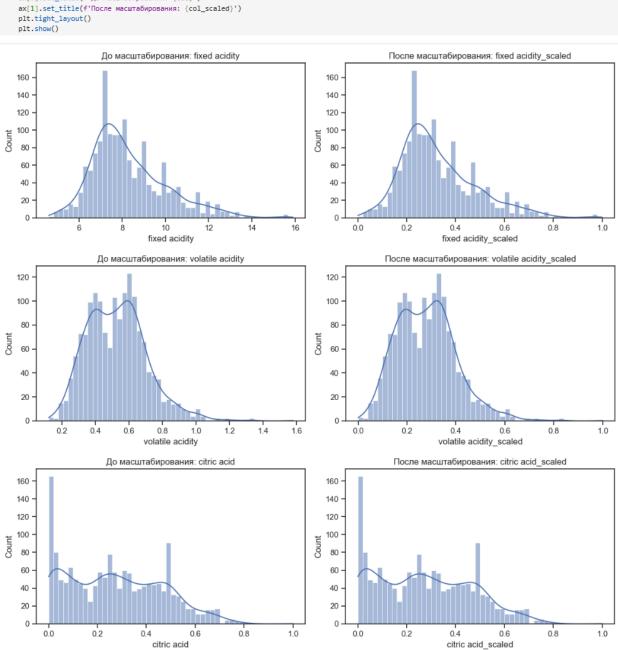
Проверим, что масштабирование не повлияло на распределение данных.

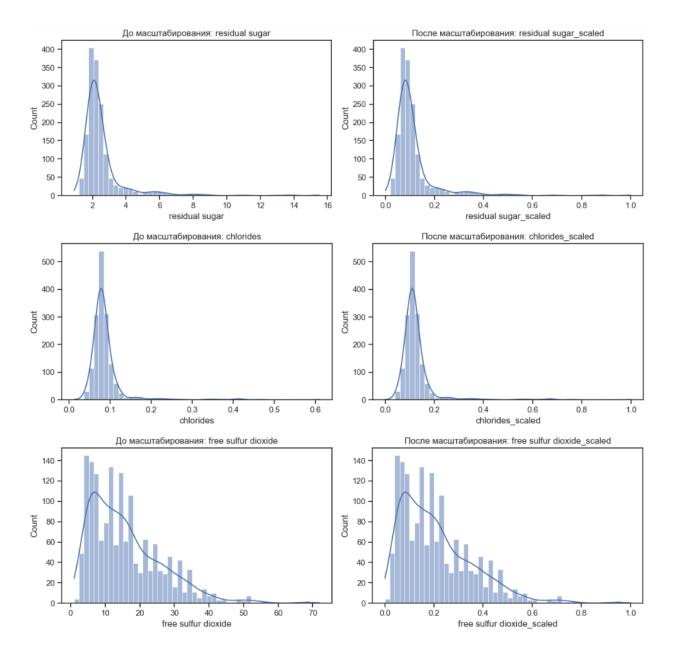
```
# Проверим, что масштабирование не повлияло на распределение данных

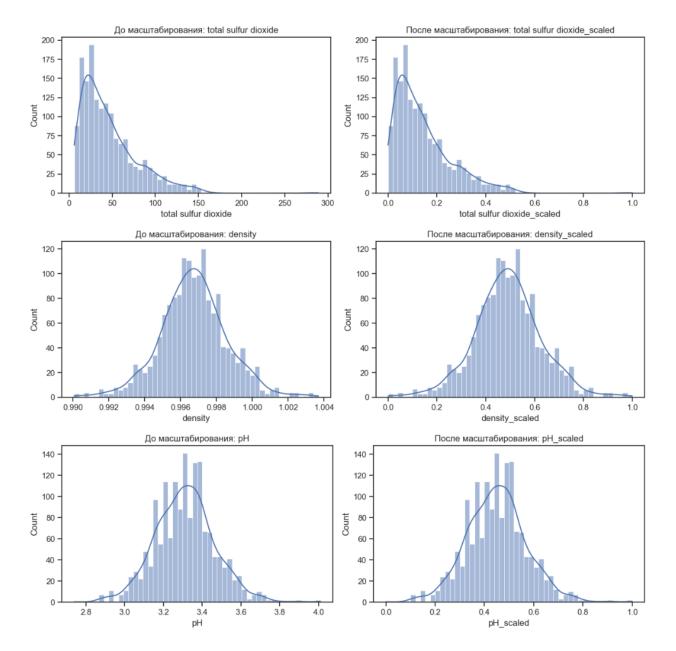
for col in scale_cols:
    col_scaled = col + '_scaled'

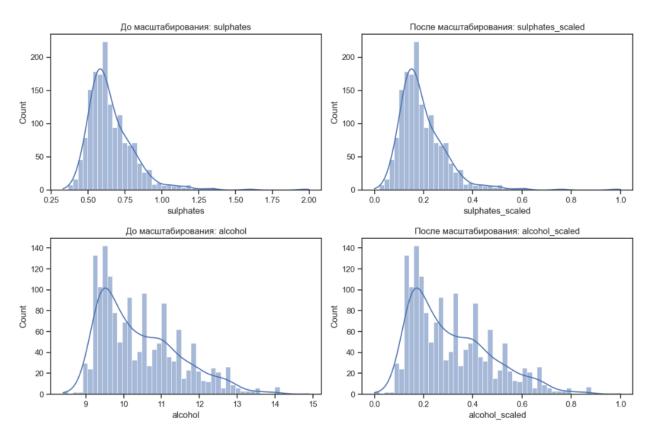
fig, ax = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 4))
    sns.histplot(data[col], bins=50, kde=True, ax=ax[0])
    sns.histplot(data[col_scaled], bins=50, kde=True, ax=ax[1])

ax[0].set_title(f'До масштабирования: {col}')
    ax[1].set_title(f'После масштабирования: {col_scaled}')
    plt.tight_layout()
    plt.show()
```









Все диаграммы имеют нормальный вид распределения.

4. Проведение корреляционного анализа данных. Формирование промежуточных выводов о возможности построения моделей машинного обучения.

Создаем исходный список corr cols 1.

```
# Соэдаем исходный список corr_cols_1
corr_cols_1 = scale_cols + ['quality']
corr_cols_1

['fixed acidity',
    'volatile acidity',
    'citric acid',
    'residual sugar',
    'chlorides',
    'free sulfur dioxide',
    'total sulfur dioxide',
    'density',
    'ph',
    'sulphates',
    'alcohol',
    'quality']
```

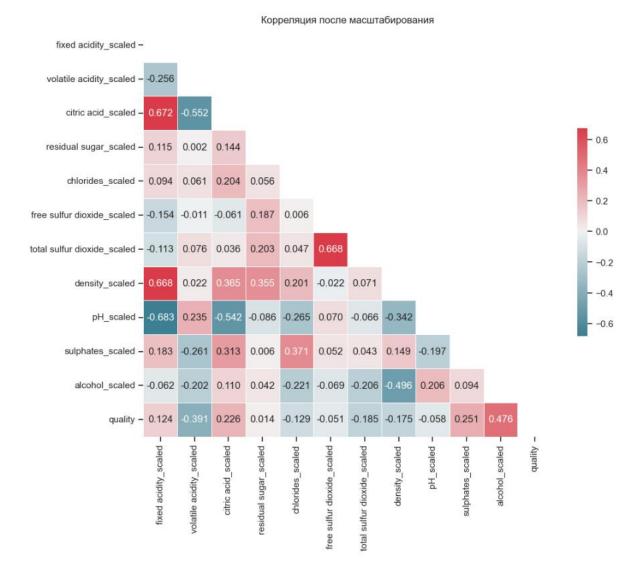
Создаем новый список corr_cols_2, включающий имена столбцов, масштабированных с добавлением суффикса "_scaled".

```
# Создаем новый список corr_cols_2, включающий имена столбцов, масштабированных с добавлением суффикса "_scaled"
 scale_cols_postfix = [x+'_scaled' for x in scale_cols]
 corr_cols_2 = scale_cols_postfix + ['quality']
corr_cols_2
['fixed acidity_scaled',
   'volatile acidity_scaled',
  'citric acid_scaled',
  'residual sugar_scaled',
  'chlorides_scaled',
  'free sulfur dioxide_scaled',
  'total sulfur dioxide_scaled',
  'density_scaled',
  'pH_scaled',
  'sulphates_scaled',
  'alcohol_scaled',
  'quality']
```

Создаем функцию для корреляционной матрицы (corr_cols_1, corr_cols_2).

Запускаем функцию.

```
plot_corr_heatmap(data, corr_cols_1, "Корреляция до масштабирования") plot_corr_heatmap(data, corr_cols_2, "Корреляция после масштабирования")
                                           Корреляция до масштабирования
     fixed acidity -
   volatile acidity - -0.256
       citric acid - 0.672
                                                                                                              - 0.6
   residual sugar - 0.115 0.002 0.144
                                                                                                              - 0.4
        chlorides - 0.094 0.061 0.204 0.056
                                                                                                              - 0.2
free sulfur dioxide - -0.154 -0.011 -0.061 0.187 0.006
                                                                                                              - 0.0
- -0.2
         density - 0.668
                                              0.201 -0.022 0.071
                         0.022
                                                                                                               -0.4
                         0.235
                                       -0.086
                                              -0.265 0.070 -0.066 -0.342
       sulphates - 0.183 -0.261 0.313
                                       0.006
                                                     0.052 0.043 0.149 -0.197
         0.206 0.094
          quality - 0.124
                                0.226
                                       0.014 -0.129 -0.051 -0.185 -0.175 -0.058 0.251
                                  acid
                                                              dioxide
                                         residual sugar
                                                                             펍
                                                              total sulfur
```



На основе двух корреляционных матриц для сравнения сделаем следующие выводы:

Корреляционные матрицы для исходных и масштабированных данных совпадают. Целевой признак классификации "quality" наиболее сильно коррелирует со следующими признаками:

- "alcohol" (0.476);
- "sulphates" (0.251);
- "citric acid" (0.226).

На основании корреляционной матрицы можно сделать вывод о том, что данные позволяют построить модель машинного обучения.

5. Выбор метрик для последующей оценки качества моделей.

В качестве метрик для решения задачи классификации будем использовать:

- Precision доля верно предсказанных классификатором положительных объектов, из всех объектов, которые классификатор определил как положительные. В контексте анализа качества вина это будет означать, сколько из предсказанных «хороших» вин действительно оказались хорошими.
- Recall доля верно предсказанных классификатором положительных объектов, из всех действительно положительных объектов. Для нашей задачи это означает, насколько успешно модель находит все хорошие вина в датасете.
- F1- мера для объединения precision и recall в единую метрику, обеспечивая баланс между ними.
- ROC AUC основана на вычислении следующих характеристик:
 - True Positive Rate, откладывается по оси ординат. Совпадает с recall.
 - False Positive Rate, откладывается по оси абсцисс. Показывает, какую долю из объектов отрицательного класса алгоритм предсказал неверно.

Отрисовка ROC-кривой.

```
def draw_multiclass_roc(y_test, y_score, n_classes):
    y_test_bin = label_binarize(y_test, classes=range(n_classes))

fpr = dict()
    tpr = dict()
    roc_auc = dict()
    for i in range(n_classes):
        fpr[i], tpr[i], _ = roc_curve(y_test_bin[:, i], y_score[:, i])
        roc_auc[i] = roc_auc_score(y_test_bin[:, i], y_score[:, i])

plt.figure(figsize=(8, 6))
    for i in range(n_classes):
        plt.plot(fpr[i], tpr[i], label=f"Class {i} (AUC = {roc_auc[i]:.2f})")

plt.plot([0, 1], [0, 1], 'k--')
    plt.ylabel("FPR")
    plt.ylabel("TPR")
    plt.ylabel("TPR")
    plt.legend()
    plt.grid()
    plt.show()
```

Создаем класс MetricLogger. Это нужно для того, чтобы построить различные решения задач и оценивания качества моделей.

```
#MetricLogger
class MetricLogger:
   def __init__(self):
       # Инициализация пустого DataFrame с тремя столбиами: 'metric'. 'ala'. 'value'
       self.df = pd.DataFrame({
            'metric': pd.Series([], dtype='str'),
           'alg': pd.Series([], dtype='str'),
            'value': pd.Series([], dtype='float')
    def add(self, metric, alg, value):
        temp_df = pd.DataFrame({'metric': [metric], 'alg': [alg], 'value': [value]})
        self.df = pd.concat([self.df, temp_df], ignore_index=True)
    def get_data_for_metric(self, metric, ascending=True):
        filtered_data = self.df[self.df['metric'] == metric]
        sorted_data = filtered_data.sort_values(by='value', ascending=ascending)
        return sorted_data['alg'].values, sorted_data['value'].values
    def plot(self, str_header, metric, ascending=True, figsize=(5, 5)):
        array_labels, array_metric = self.get_data_for_metric(metric, ascending)
       fig, ax1 = plt.subplots(figsize=figsize)
        pos = np.arange(len(array_metric))
        rects = ax1.barh(pos, array_metric, align='center', height=0.5, tick_label=array_labels)
        ax1.set_title(str_header)
       for a, b in zip(pos, array_metric):
    ax1.text(b, a, f'{b:.3f}', color='black', va='center')
        plt.xlabel('Value')
        plt.ylabel('Algorithms')
        plt.show()
```

6. Выбор наиболее подходящих моделей для решения задачи классификации.

Для задачи классификации будем использовать следующие модели:

- Метод ближайших соседей
- Линейная/логистическая регрессия
- Метод опорных векторов
- Дерево решений
- Случайный лес
- Градиентный бустинг

7. Формирование обучающей и тестовой выборок на основе исходного набора данных.

Признаки для задачи классификации.

```
# Признаки для задачи классификации вина
 class_cols = [
                                 # Качество вина (обычно целочисленная метка)
       'quality'
      'fixed acidity', # Фиксированная кислотность
'volatile acidity', # Летучая кислотность
      'fixed acidity',
      'citric acid', # Цитрусовая кислота
'residual sugar', # Остаточный сахар
      'chlorides',
                                # Хлориды
      'free sulfur dioxide', # Свободный диоксид серы
'total sulfur dioxide', # Общий диоксид серы
      'density', # Плотность
'pH', # Уровень pH
      'sulphates', # Сульфаты
'alcohol' # Содержание алкоголя
X = data[class_cols]
 Y = data['quality']
 print(f"Количество строк (наблюдений) в массиве X: {X.shape[0]}")
 print(f"Количество столбцов (признаков) в массиве X: {X.shape[1]}")
 Количество строк (наблюдений) в массиве X: 1599
 Количество столбцов (признаков) в массиве X: 12
```

Разделим выборку на обучающую и тестовую.

```
# С использованием метода train_test_split разделим выборку на обучающую и тестовую
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_size=0.1, random_state=1)

X_train.shape, X_test.shape, Y_train.shape, Y_test.shape

((1439, 12), (160, 12), (1439,), (160,))
```

Из итогов ((1439, 12), (160, 12), (1439,), (160,)) можно сделать следующие выводы:

- X train содержит 1439 наблюдений и 12 признаков.
- X_test содержит 160 наблюдений и 12 признаков.
- Y_train содержит 1439 меток классов.
- Y test содержит 160 меток классов.

Это означает, что данные были успешно разделены на обучающую и тестовую выборки. Обучающая выборка используется для обучения модели, а тестовая выборка - для оценки ее качества на данных, которые модель ранее не видела.

8. Построение базового решения (baseline) для выбранных моделей без подбора гиперпараметров. Производится обучение моделей на основе обучающей выборки и оценка качества моделей на основе тестовой выборки.

Модели.

```
# Onpedeneue modeneü

clas_models = {
    'LogR': LogisticRegression(),
    'KNN_5': KNeighborsClassifier(n_neighbors=5),
    'SVC': SVC(probability=True),
    'Tree': DecisionTreeClassifier(),
    'RF': RandomForestClassifier(),
    'GB': GradientBoostingClassifier()
}
```

Сохранение метрик.

```
# Сохранение метрик
clasMetricLogger = MetricLogger()
```

Обучающая модель.

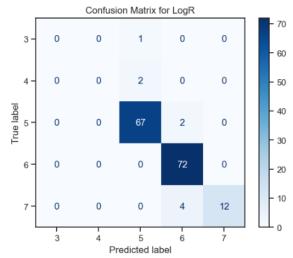
```
def train_model(model_name, model, MetricLogger):
   model.fit(X_train, Y_train)
   # Получение прогнозов модели на тестовых данных
   Y_pred = model.predict(X_test)
   # Вычисление метрик качества модели
   precision = precision_score(Y_test, Y_pred, average='macro')
   recall = recall_score(Y_test, Y_pred, average='macro')
   f1 = f1_score(Y_test, Y_pred, average='macro')
       roc_auc = roc_auc_score(Y_test, model.predict_proba(X_test), multi_class='ovr')
   except ValueError:
       roc_auc = None # Если невозможно посчитать ROC AUC
   # Добавление метрик качества в MetricLogger
   MetricLogger.add('precision', model_name, precision)
   MetricLogger.add('recall', model_name, recall)
   MetricLogger.add('f1', model_name, f1)
   if roc_auc is not None:
       MetricLogger.add('roc_auc', model_name, roc_auc)
   print(model)
   # Построение ROC-кривой (только если есть вероятности)
   if roc_auc is not None:
       draw_roc_curve(Y_test, model.predict_proba(X_test))
   # Получение и отображение матрицы ошибок
   cm = confusion_matrix(Y_test, Y_pred)
   unique_labels = np.unique(Y_test)
   disp = ConfusionMatrixDisplay(confusion_matrix=cm, display_labels=unique_labels)
   disp.plot(cmap=plt.cm.Blues)
   plt.title(f'Confusion Matrix for {model_name}')
   plt.show()
```

Выполним обучение каждой модели из словаря clas_models, вычисляем и сохраняем метрики качества и результаты оценки производительности моделей.

```
# Запуск обучения для каждой из моделей
for model_name, model in clas_models.items():
    train_model(model_name, model, clasMetricLogger)
```

Метод ближайших соседей.

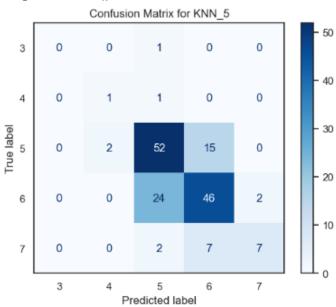
LogisticRegression()



Логическая регрессия.

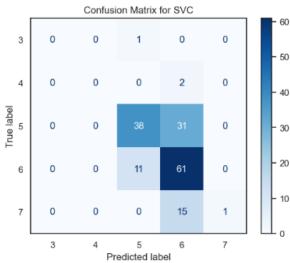
I IVWINION IMPO

KNeighborsClassifier()



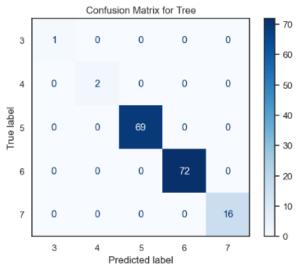
Метод опорных векторов.





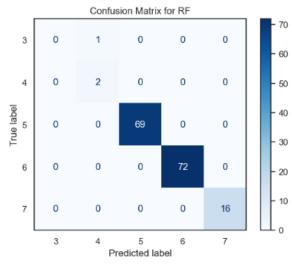
Дерево решений.





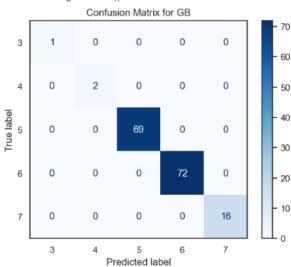
Случайный лес.

RandomForestClassifier()



Градиентный бустинг.

GradientBoostingClassifier()



9. Подбор гиперпараметров для выбранных моделей.

Метод ближайших соседей.

```
n_range = np.array(range(1, 100, 1))
# Настройка параметров для GridSearchCV
tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
gs_KNN = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5, scoring='roc_auc_ovr')
gs_KNN.fit(X_train, Y_train)
GridSearchCV(cv=5, estimator=KNeighborsClassifier(),
      param_grid=[{'n_neighbors': array([ 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34,
      35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68,
      69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85,
      86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99])}],
            scoring='roc_auc_ovr')
                                                               GridSearchCV
86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99])}],
scoring='roc_auc_ovr')
                                              v best_estimator_: KNeighborsClassifier
                                             KNeighborsClassifier(n_neighbors=12)
                                                        KNeighborsClassifier
                                               KNeighborsClassifier(n_neighbors=12)
```

Лучшая модель.

```
# Лучшая модель
best_model_knn = gs_KNN.best_estimator_
print("Лучшая модель:", best_model_knn)
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'KNN_new', gs_KNN.best_score_)
Лучшая модель: KNeighborsClassifier(n_neighbors=12)
```

Лучшее значение параметров.

```
# Лучшее значение параметров
best_params = gs_KNN.best_params_
print("Лучшие параметры:", best_params)
Лучшие параметры: {'n_neighbors': 12}
```

График изменения качества KNN в зависимости от числа соседей (ROC AUC).

```
# Изменение качества на тестовой выборке

plt.figure(figsize=(10, 6))

plt.plot(n_range, gs_KNN.cv_results_['mean_test_score'], marker='o')

plt.title('Изменение качества KNN в зависимости от числа соседей (ROC AUC)')

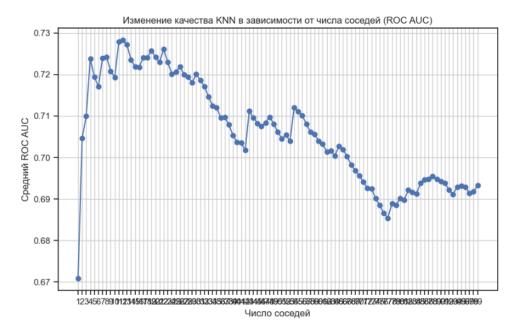
plt.xlabel('Число соседей')

plt.ylabel('Средний ROC AUC')

plt.xticks(n_range)

plt.grid()

plt.show()
```



Логистическая регрессия.

Лучшая модель.

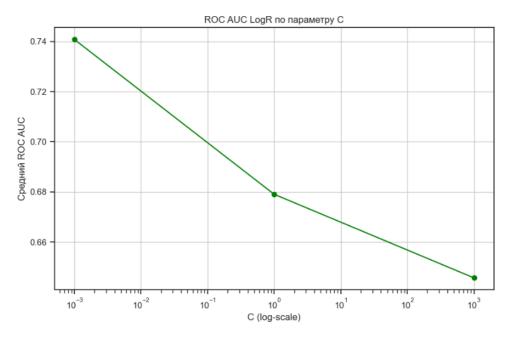
```
# Лучшая модель
gs_LogR.best_estimator_
```

LogisticRegression
LogisticRegression(C=0.001)

Лучшее значение параметров.

```
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'LogR_new', gs_LogR.best_score_)
# Лучшее значение параметров
gs_LogR.best_params_
```

График ROC AUC LogR по параметру С.



Метод опорных векторов.

Лучшая модель.

```
# Лучшая модель
gs_SVC.best_estimator_

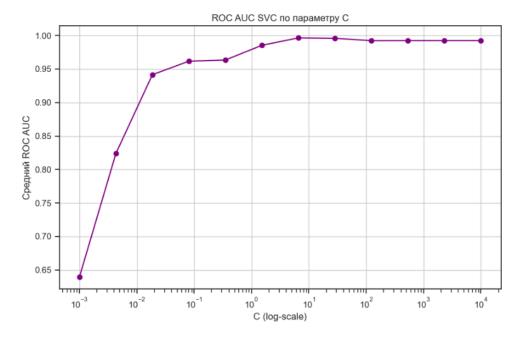
SVC(C=0.001)

v SVC
SVC(C=23.10129700083158, probability=True)
```

Лучшее значение параметров.

```
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'SVC_new', gs_SVC.best_score_)
# Лучшее значение параметров
gs_SVC.best_params_
{'C': 23.10129700083158}
```

График ROC AUC SVC по параметру С.



Дерево решений.

Лучшая модель.

```
# Лучшая модель
gs_Tree.best_estimator_
```

```
DecisionTreeClassifier

DecisionTreeClassifier(max_depth=1, max_features=1)
```

Лучшее значение параметров.

```
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'Tree_new', gs_Tree.best_score_)
# Лучшее значение параметров
gs_Tree.best_params_
{'max_depth': 1, 'max_features': 1}
```

Случайный лес.

```
# Определение диапазонов параметров для Random Forest

RF_params = {
    "max_leaf_nodes": range(2, 12), # Максимальное число листьев
    "max_samples": np.linspace(0.1, 1.0, num=21) # Пробуем от 10% до 100% выборки
}

# Инициализация и запуск GridSearchCV

gs_RF = GridSearchCV(RandomForestClassifier(), RF_params, cv=5, scoring='roc_auc_ovr')

gs_RF.fit(X_train, Y_train)
```

Лучшая модель.

```
# Лучшая модель
best_model_rf = gs_RF.best_estimator_
print("Лучшая модель:", best_model_rf)
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'RF_new', gs_RF.best_score_)
Лучшая модель: RandomForestClassifier(max_leaf_nodes=11, max_samples=0.64)
```

Лучшее значение параметров.

```
# Лучшие параметры
best_params_rf = gs_RF.best_params_
print("Лучшие параметры:", best_params_rf)
Лучшие параметры: {'max_leaf_nodes': 11, 'max_samples': 0.64}
```

Градиентный бустинг.

```
GB_params={"max_features":range(1,4), "max_leaf_nodes":range(2,22)}
gs_GB = GridSearchCV(GradientBoostingClassifier(), GB_params, cv=5, scoring='f1')
gs_GB.fit(X_train, Y_train)
```

Лучшая модель.

```
# Лучшая модель
gs_GB.best_estimator_
```

```
GradientBoostingClassifier

GradientBoostingClassifier(max_features=1, max_leaf_nodes=2)
```

Лучшее значение параметров.

```
clasMetricLogger.add('best_cv_score', 'GB_new', gs_GB.best_score_)
# Лучшее значение параметров
gs_GB.best_params_

{'max_features': 1, 'max_leaf_nodes': 2}
```

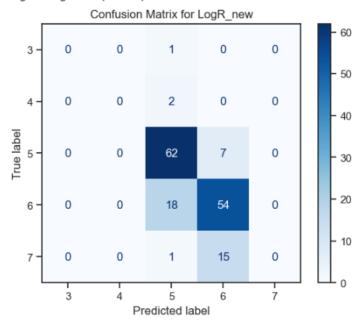
10.Повторение пункта 8 для найденных оптимальных значений гиперпараметров. Сравнение качества полученных моделей с качеством baseline-моделей.

Предположительно, LogR_new, KNN_new, SVC_new, Tree_new, RF_new и GB_new - это объекты, полученные в результате перекрестной проверки (GridSearchCV), примененной к моделям логистической регрессии (Logistic Regression), метода к ближайших соседей (K-Nearest Neighbors), метода опорных векторов (Support Vector Classifier), дерева решений (Decision Tree), случайного леса (Random Forest) и градиентного бустинга (Gradient Boosting), соответственно.

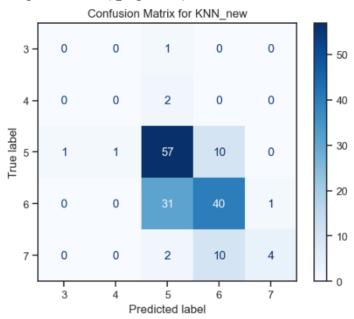
Выполним обучение каждой модели из словаря models_grid, вычисляем и сохраняем метрики качества и результаты оценки производительности моделей.

```
for model_name, model in models_grid.items():
    train_model(model_name, model, clasMetricLogger)
```

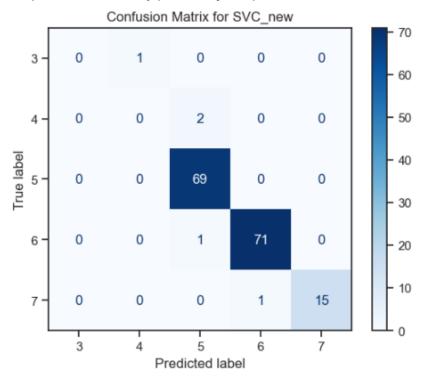
LogisticRegression(C=0.001)



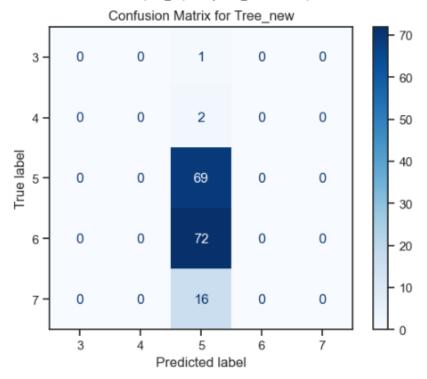
KNeighborsClassifier(n_neighbors=12)



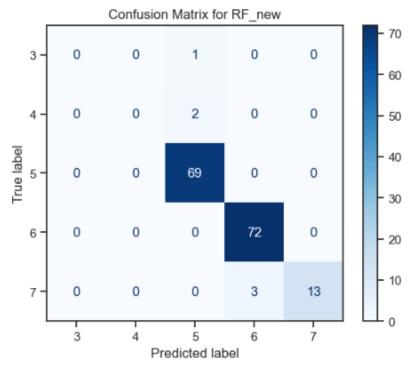
SVC(C=23.10129700083158, probability=True)



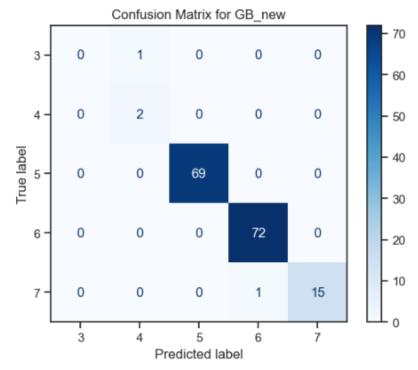
DecisionTreeClassifier(max_depth=1, max_features=1)



RandomForestClassifier(max_leaf_nodes=11, max_samples=0.64)



GradientBoostingClassifier(max_features=1, max_leaf_nodes=2)



11. Формирование выводов о качестве построенных моделей на основе выбранных метрик.

Метрики качества модели.

```
# Метрики качества модели
clas_metrics = clasMetricLogger.df['metric'].unique()
clas_metrics
array(['precision', 'recall', 'f1', 'best_cv_score'], dtype=object)
for metric in clas_metrics:
      array_labels, array_metric = clasMetricLogger.get_data_for_metric(metric)
       print('Метрика:', metric)
      for label, value in zip(array_labels, array_metric):
    print(f'{label} : {value:.2f}')
Метрика: precision
тее_new : 0.09
LogR_new : 0.29
KNN_new : 0.42
SVC : 0.46
KNN_5 : 0.49
LogR : 0.58
RF_new : 0.58
SVC_new : 0.59
GB_new : 0.73
RF : 0.73
Tree : 1.00
GB : 1.00
Метрика: recall
Tree_new : 0.20
SVC : 0.29
KNN_new : 0.33
LogR_new : 0.33
KNN_5 : 0.47
LogR : 0.54
LogR: 0.54

RF_new: 0.56

SVC_new: 0.58

GB_new: 0.79

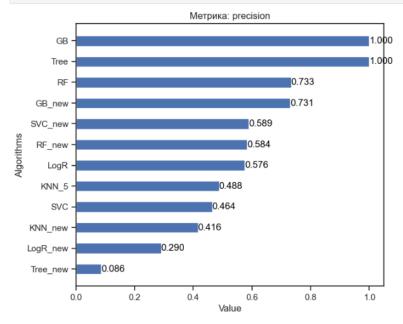
RF: 0.80

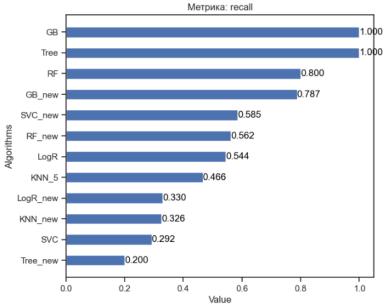
Tree: 1.00

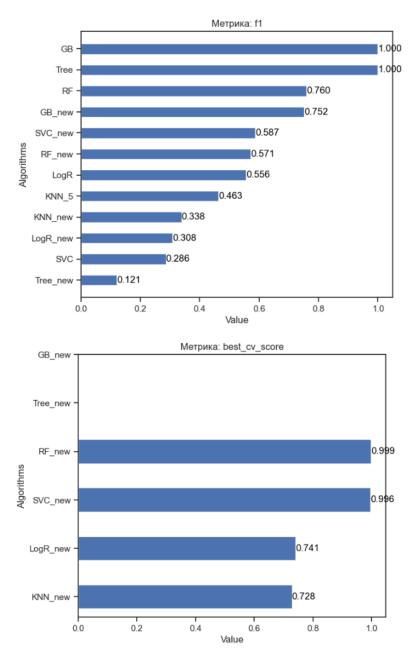
GB: 1.00
Метрика: f1
Tree_new : 0.12
SVC : 0.29
LogR_new : 0.31
KNN_new : 0.34
KNN_5 : 0.46
LogR : 0.56
RF_new : 0.57
SVC_new : 0.59
GB_new : 0.75
RF : 0.76
Tree : 1.00
GB : 1.00
Метрика: best_cv_score
KNN_new : 0.73
LogR_new : 0.74
SVC_new : 1.00
RF_new : 1.00
Tree_new : nan
```

Для наглядности результатов моделей, построим диаграмму.

Построим графики метрик качества модели.







12.Вывод

Из предоставленных метрик качества моделей можно сделать следующие выводы:

• Точность (precision). Самую высокую точность (1.00) показывают модели GB и Tree, обученные без настройки гиперпараметров. Модели RF и GB_new также имеют высокие значения точности (0.73). Среди моделей после настройки гиперпараметров (*_new) наиболее точной оказалась GB_new (0.73), а наименее — Tree_new (0.09). Классические модели логистической регрессии (LogR) и случайного леса (RF) также остаются конкурентоспособными (0.58 и 0.73 соответственно).

- Полнота (recall). Лидерами являются снова GB и Tree (1.00). Модель RF и GB_new также показывают высокие значения (0.80 и 0.79 соответственно). Модель Tree_new с самым низким значением полноты (0.20), что может говорить о переобучении или недообучении. Остальные модели показывают умеренные значения от 0.33 до 0.58.
- F1-мера. Максимальную F1-меру (1.00) снова демонстрируют модели GB и Tree. Хороший баланс между точностью и полнотой демонстрируют RF (0.76) и GB_new (0.75). Остальные модели уступают: LogR, SVC_new, RF_new от 0.56 до 0.59. Наихудшие результаты у Tree new (0.12), LogR new (0.31) и SVC (0.29).
- Качество по кросс-валидации (best_cv_score). Модели SVC_new и RF_new достигли максимального значения 1.00, что потенциально указывает на переобучение. KNN_new и LogR_new среднее значение около 0.73–0.74.

Таким образом, модели GB и Tree демонстрируют наилучшие показатели по всем метрикам, что может говорить о высоком качестве классификации, но также требует проверки на переобучение. Из моделей с тюнингом, наиболее сбалансированной оказалась GB_new, показавшая высокие значения точности, полноты и F1-меры. Модель Tree_new, несмотря на попытки улучшения, показывает худшие результаты, вероятно, из-за некорректного подбора параметров. Модель RF также демонстрирует устойчиво хорошие результаты и может быть рекомендована как один из сильных кандидатов.

Заключение

В ходе научно-исследовательской работы был проведен разведочный анализ данных набора "Биомеханические особенности пациентов-ортопедов". Мы использовали различные инструменты анализа данных, такие как Pandas, Matplotlib, Seaborn, Numpy и Streamlit на платформе Python с помощью программы Jupyter Notebook.

В процессе работы мы провели анализ структуры данных, заполнили пропущенные значения, выбрали признаки для построения моделей, закодировали категориальные признаки, выполняли масштабирование данных и создали дополнительные признаки для улучшения качества моделей.

Мы также провели корреляционный анализ данных и сформулировали промежуточные выводы о возможности построения моделей машинного обучения.

Для оценки качества моделей мы выбрали метрики, такие как точность, полнота, F1-мера, и рассмотрели более пяти различных моделей, включая как базовые, так и ансамблевые методы.

Мы сформировали обучающую и тестовую выборки, построили базовые решения для выбранных моделей и подобрали оптимальные значения гиперпараметров с использованием методов кросс-валидации.

В итоге мы оценили качество построенных моделей и сравнили их с базовыми моделями, сделав выводы о наилучших подходах к решению задачи классификации или регрессии на основе наших выбранных метрик.

Список использованных источников информации

- 1) Абдрахманов, М. И. Devpractice Team. Pandas. Pабота с данными. / М. И. Абдрахманов 2-е изд. devpractice.ru. 2020. 170 с.: [Электронный ресурс]. // URL: https://coderbooks.ru/books/python/pandas_rabota_s_dannymi_abdrahmanov_2020/ (дата обращения: 15.03.2024)
- 2) Абдрахманов, М. И. Devpractice Team. Python. Визуализация данных. Matplotlib. Seaborn. Mayavi. devpractice.ru. 2020. 412 с.: [Электронный ресурс]. // URL: https://coderbooks.ru/books/python/python_vizualizaciya_dannyh_abdrahm anov 2020/ (дата обращения: 21.03.2024)
- 3) Методические указания по программному обеспечению «Pandas»: [Электронный ресурс]. // URL: https://pandas.pydata.org/ (дата обращения: 20.02.2024)
- 4) Методические указания по программному обеспечению «Seaborn»: [Электронный ресурс]. // URL: https://seaborn.pydata.org/ (дата обращения: 22.02.2024)
- 5) Метрики качества. Метрики классификации. Подсчет количества ошибок, доли правильных ответов, точности, полноты. [Электронный ресурс]. // URL: https://data-scientists.ru/metriki-kachestva-metriki-klassifikacii-podschet-kolichestva-oshibok-doli-pravilnyh-otvetov (дата обращения: 01.03.2024)
- 6) Регрессионные модели в Python: [Электронный ресурс]. // URL: https://nagornyy.me/it/regressionnye-modeli-v-python/ (дата обращения: 11.03.2024)
- 7) Учебник по машинному обучению: [Электронный ресурс]. // URL: https://education.yandex.ru/handbook/ml (дата обращения: 01.03.2024)