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 К. Оцените качество модели с помощью подходящих для задачи метрик.
- 4. Произведите подбор гиперпараметра К 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.

Ход выполнения работы

Текстовое описание набора данных

В качестве набора данных используется dataset рейтингов университетов мира на основании трёх рейтингов. Датасет доступен по agpecy: https://www.kaggle.com/mylesoneill/world-university-rankings

Из набора данных будет рассматриваться только файл cwurData.csv.

Описание столбцов:

- world rank мировой рейтинг университета
- institution название университета
- country страна, в которой расположен университет
- national rank рейтинг университета в стране его нахождения
- quality_of_education рейтинг качества образования
- quality of faculty рейтинг качества профессорско-преподавательского состава
- publications рейтинг публикаций
- infuence рейтинг влияния
- citations количество студентов в университете
- broad impact рейтинг за широкое влияние (предоставлен только за 2014 и 2015 гг. Остальное пропуски)
- patents рейтинг за патенты
- score общий балл, используемый для определения мирового рейтинга
- year год рейтинга (c 2012 по 2015 год)

Основные характеристики набора данных

```
Подключаем все необходимые библиотеки
```

```
In [1]: import numpy as np
    import pandas as pd
    import seaborn as sns
    import matplotlib
    import matplotlib_inline
    import matplotlib.pyplot as plt
    %matplotlib inline
    sns.set(style="ticks")

Подключаем Dataset
In [2]: data = pd.read_csv('cwurData.csv', sep=",")
Размер набора данных
In [3]: data.shape
Out[3]:(2200, 14)
Типы колонок
In [4]: data.dtypes
```

```
Out[4]:world_rank
                                   int64
      institution
                                  object
                                 object
     country
      national rank
                                  int64
     quality_of_education
                                  int64
     alumni_employment
                                  int64
      quality_of_faculty
                                  int64
                                  int64
     publications
     influence
                                 int64
      citations
                                  int64
                                float64
     broad_impact
      patents
      score
                                 float64
                                   int.64
      vear
     dtype: object
Проверяем, есть ли пропущенные значения
In [5]: data.isnull().sum()
Out[5]:world_rank
                                  0
      institution
     country
      national rank
     quality_of_education
     alumni employment
     quality of faculty
     publications
      influence
      citations
                                   0
     broad impact
                                 200
                                   0
     patents
      score
                                   0
     year
      dtype: int64
Первые 5 строк датасета
In [6]: data.head()
Out[6]:
         world_rank
                      institution
                                 country national_rank quality_of_education alumni_employment quality_of_faculty publications influence
                        Harvard
       0
                                    USA
                                                  1
                                                                    7
                                                                                     9
                 1
                                                                                                                1
                                                                                                                         1
                       University
                    \\Massachusetts
                      Institute of
                                    USA
                                                                                     17
                                                                                                                         4
                      Technology
                        Stanford
                                                                                                                         2
                                    USA
                                                                   17
                                                                                     11
                       University
                     University of
                                                                   10
                                                                                                               16
                                                                                                                        16
                                                                                     24
                      Cambridge Kingdom
                       California
                                                                                     29
                                                                                                               37
                                                                                                                        22
                      Institute of
                      Technology
In [7]: total count = data.shape[0]
     print('Bcero crpok: {}'.format(total_count))
```

```
In [8]: (200 / 2200) * 100
Out[8]:9.090909090909092
Hастройка отображения графиков
In [9]: # Задание формата графиков для сохранения высокого качества PNG
from IPython.display import set_matplotlib_formats
matplotlib_inline.backend_inline.set_matplotlib_formats("retina")
```

Задание ширины графиков, чтобы они помещались на А4

Обработка пропусков данных

pd.set option("display.width", 70)

Очистка строк

Всего строк: 2200

Процент пропусков в broad impact

Можно очистить строки, содержащие пропуски. При этом останутся данные только за 2014 и 2015 гг (см. описание датасета)

Out[10]: ((2200, 14), (2000, 14))

Выведем первые 11 строк, чтобы убедиться, что данные в national_rank числовые (Jupyter Lab в предпросмотре CSV показывает не совсем верно)

In [11]: data_no_null.head(11)

Out[11]:	world_rank	institution	country	national_rank	quality_of_education	alumni_employment	quality_of_faculty	publications	influenc
200	1	Harvard University	USA	1	1	1	1	1	
201	2	Stanford University	USA	2	11	2	4	5	
202	3	Massachusetts Institute of Technology	USA	3	3	11	2	15	
203	4	University of Cambridge	United Kingdom	1	2	10	5	10	
204	5	University of Oxford	United Kingdom	2	7	12	10	11	
205	6	Columbia University	USA	4	13	8	9	14	
206	7	University of California, Berkeley	USA	5	4	22	6	7	
207	8	University of Chicago	USA	6	10	14	8	17	
208	9	Princeton University	USA	7	5	16	3	70	í
209	10	Yale University	USA	8	9	25	11	18	
210	11	Cornell University	USA	9	12	18	19	23	

```
In [12]: total_count = data_no_null.shape[0]
    print('Bcero ctpok: {}'.format(total_count))
```

Всего строк: 2000

Кодирование категориальных признаков

```
Преобразуем названия стран, городов, ... в числовые зеачения (label encoding)
In [13]: from sklearn.preprocessing import LabelEncoder, OneHotEncoder
=====> institution <======
In [14]: le = LabelEncoder()
      institution le = le.fit transform(data no null['institution'])
In [15]: data no null['institution'].unique()
Out[15]:array(['Harvard University', 'Stanford University',
              'Massachusetts Institute of Technology', ...,
              'Babeş-Bolyai University', 'Henan Normal University',
              'Southwest Jiaotong University'], dtype=object)
In [16]: arr institution encoded = np.unique (institution le)
      arr institution encoded
Out[16]:array([ 0,
                      1,
                             2, ..., 1020, 1021, 1022])
In [17]: le.inverse transform([n for n in range(1023)])
Out[17]:array(['AGH University of Science and Technology', 'Aalborg University',
              'Aalto University', ..., 'École normale supérieure de Cachan',
              'École normale supérieure de Lyon', 'Örebro University'],
            dtype=object)
=====> country <======
In [18]: le country = LabelEncoder()
      country le = le country.fit transform(data no null['country'])
```

```
In [19]: data no null['country'].unique()
'South Africa', 'Spain', 'Brazil', 'Hong Kong', 'Ireland', 'Austria', 'New Zealand', 'Portugal', 'Thailand', 'Czech Republic',
                     'Malaysia', 'India', 'Greece', 'Mexico', 'Hungary', 'Argentina', 'Turkey', 'Poland', 'Saudi Arabia', 'Chile', 'Iceland', 'Slovenia', 'Estonia', 'Lebanon', 'Croatia', 'Colombia', 'Slovak Republic',
                      'Iran', 'Egypt', 'Serbia', 'Bulgaria', 'Lithuania', 'Uganda',
                      'United Arab Emirates', 'Uruguay', 'Cyprus', 'Romania',
                      'Puerto Rico'], dtype=object)
In [20]: np.unique (country le)
Out[20]:array([ 0,  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])
In [21]: le country.inverse transform([n for n in range(59)])
'Finland', 'France', 'Germany', 'Greece', 'Hong Kong', 'Hungary', 'Iceland', 'India', 'Iran', 'Ireland', 'Israel', 'Italy', 'Japan', 'Lebanon', 'Lithuania', 'Malaysia', 'Mexico', 'Netherlands', 'New Zealand', 'Norway', 'Poland', 'Portugal', 'Puerto Rico', 'Romania', 'Russia', 'Saudi Arabia', 'Serbia', 'Singapore',
                      'Slovak Republic', 'Slovenia', 'South Africa', 'South Korea', 'Spain', 'Sweden', 'Switzerland', 'Taiwan', 'Thailand', 'Turkey',
                      'USA', 'Uganda', 'United Arab Emirates', 'United Kingdom',
                      'Uruguay'], dtype=object)
In [22]: data no null.head()
```

Out[22]:	world_rank	institution	country	national_rank	quality_of_education	alumni_employment	quality_of_faculty	publications	influenc
200	1	Harvard University	USA	1	1	1	1	1	
201	2	Stanford University	USA	2	11	2	4	5	
202	3	Massachusetts Institute of Technology	USA	3	3	11	2	15	
203	4	University of Cambridge	United Kingdom	1	2	10	5	10	
204	5	University of Oxford	United Kingdom	2	7	12	10	11	
41						1000000			

```
In [23]: data_digit = data_no_null.copy()
    #data_digit.pop('institution')
    #data_digit.pop('country')
    data_digit["institution"] = institution_le
    data_digit['country'] = country_le
    data_digit
```

Out[23]:		$world_rank$	institution	country	national_rank	${\sf quality_of_education}$	alumni_employment	$quality_of_faculty$	publications	influence
	200	1	184	54	1	1	1	1	1	1
	201	2	511	54	2	11	2	4	5	3
	202	3	312	54	3	3	11	2	15	2
	203	4	637	57	1	2	10	5	10	9
	204	5	819	57	2	7	12	10	11	12
2	195	996	954	37	7	367	567	218	926	845
2	196	997	11	14	4	236	566	218	997	908
2	197	998	132	4	18	367	549	218	830	823
2	198	999	576	48	40	367	567	218	886	974
2	199	1000	74	8	83	367	567	218	861	991

2000 rows × 14 columns

Проверяем типы данных

4

In [24]: data_digit.dtypes

Out[24]:world_rank int64 int64 institution country int64 national_rank int64 quality_of_education int64 alumni employment quality_of_faculty int64 publications int64 influence int64 int64 citations broad impact float64 patents int64 float64 score int64 year dtype: object

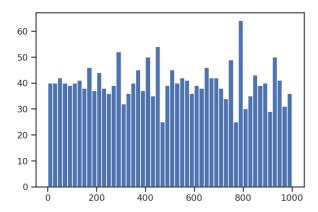
Масштабирование данных

Масштабирование пудем проводить на data_digit (где нет категориальных признаков)

 $In \ [25]: \textbf{from} \ \text{sklearn.preprocessing} \ \textbf{import} \ \text{MinMaxScaler, StandardScaler, Normalizer}$

MinMax масштабирование

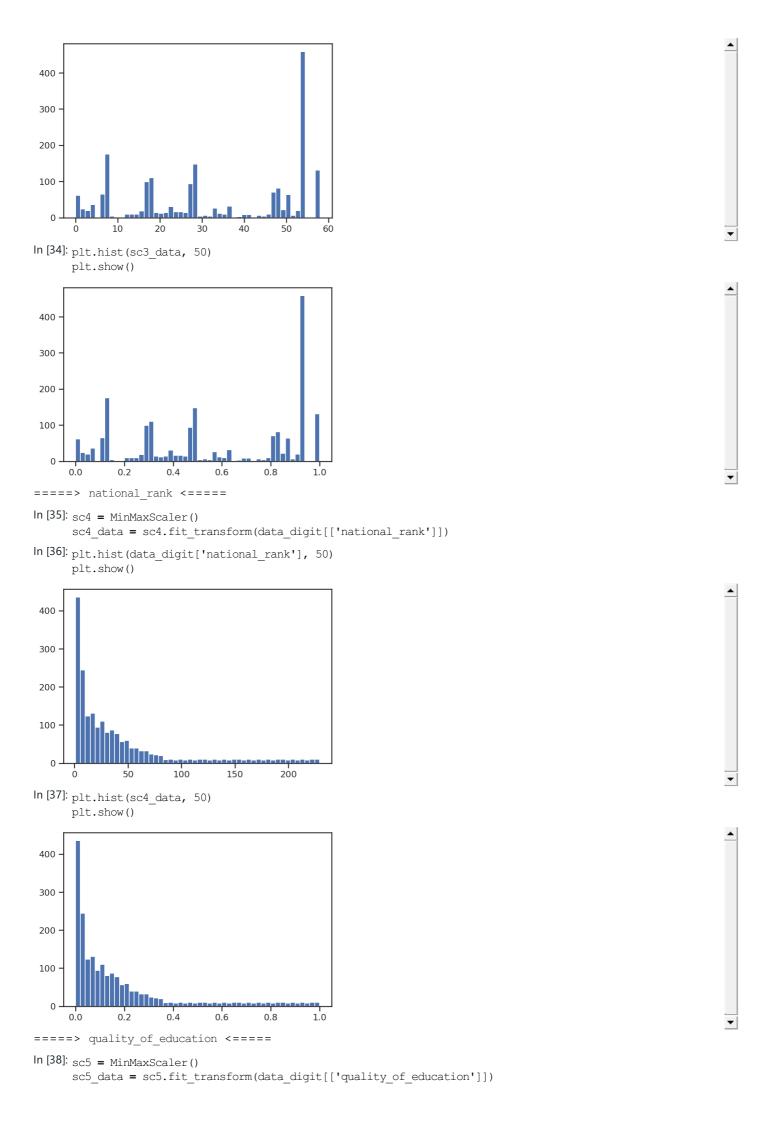
```
=====> world_rank <=====
In [26]: sc1 = MinMaxScaler()
        sc1_data = sc1.fit_transform(data_digit[['broad_impact']])
In [27]: plt.hist(data_digit['broad_impact'], 50)
        plt.show()</pre>
```





In [33]: plt.hist(data_digit['country'], 50)

plt.show()

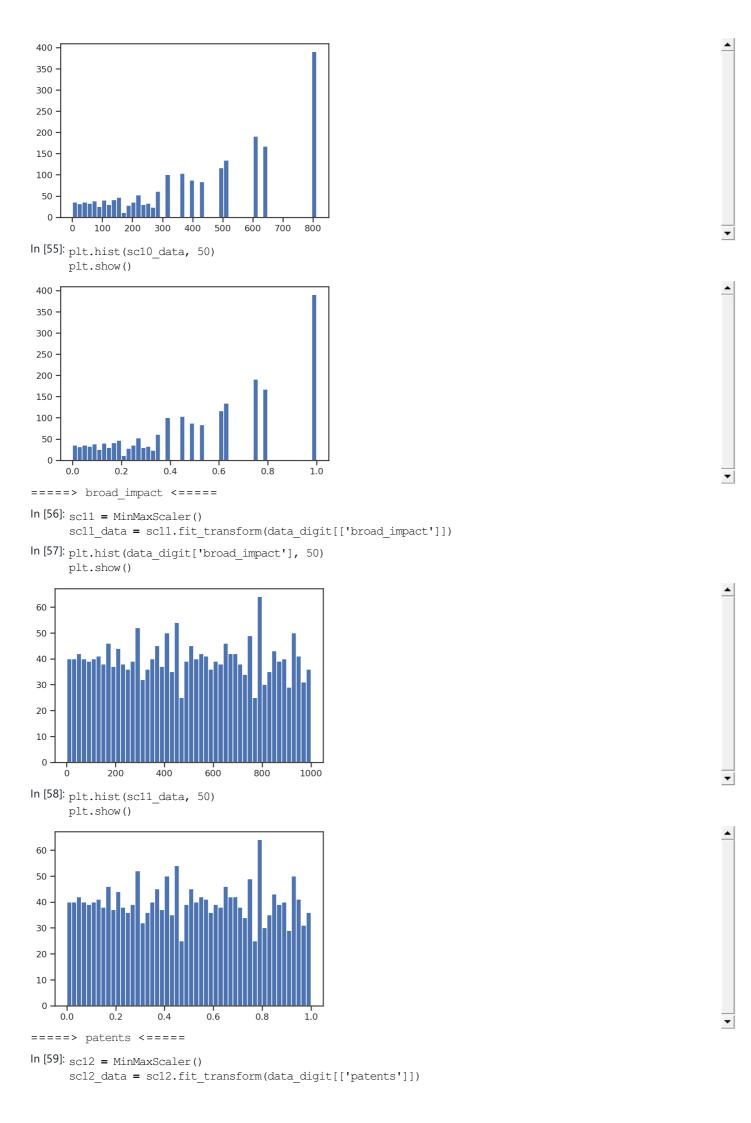


```
In [39]: plt.hist(data_digit['quality_of_education'], 50)
      plt.show()
 600
 500
 400
 300
 200
 100
                100
                      150
                           200
                                 250
                                      300
                                            350
In [40]: plt.hist(sc5_data, 50)
      plt.show()
 600
 500
 400
 300
 200
 100
                      0.4
      0.0
             0.2
                              0.6
                                      0.8
                                              1.0
====> alumni_employment <=====
In [41]: _{SC6} = MinMaxScaler()
      sc6_data = sc6.fit_transform(data_digit[['alumni_employment']])
In [42]: plt.hist(data_digit['alumni_employment'], 50)
      plt.show()
 500
 400
 300
 200
 100
       100
                    200
                           300
                                  400
                                         500
In [43]: plt.hist(sc6_data, 50)
      plt.show()
 500
 400
 300
 200
 100
  0
      0.0
             0.2
                      0.4
                              0.6
                                      0.8
```

```
====> quality_of_faculty <=====
In [44]: sc7 = MinMaxScaler()
      sc7_data = sc7.fit_transform(data_digit[['quality_of_faculty']])
In [45]: plt.hist(data_digit['quality_of_faculty'], 50)
      plt.show()
 800
 700
 600
 500
 400
 300
 200
 100
               50
                        100
                                  150
                                            200
In [46]: plt.hist(sc7_data, 50)
      plt.show()
 800
 700
 600
 500
 400
 300
 200
 100
                      0.4
      0.0
              0.2
                               0.6
                                       0.8
                                               1.0
====> publications <=====
In [47]: _{SC8} = MinMaxScaler()
      sc8_data = sc8.fit_transform(data_digit[['publications']])
In [48]: plt.hist(data_digit['publications'], 50)
      plt.show()
 40
 35
 30
 25
 20
 15
 10
  5
```

In [49]: plt.hist(sc8_data, 50)
 plt.show()

```
40
 35
 30
 25
 20
 15
 10
  5
                              0.6
                      0.4
                                      0.8
====> influence <====
In [50]: SC9 = MinMaxScaler()
      sc9_data = sc9.fit_transform(data_digit[['influence']])
In [51]: plt.hist(data_digit['influence'], 50)
      plt.show()
 50
 40
 30
 20
 10
  0
             200
                     400
                              600
                                      800
                                              1000
In [52]: plt.hist(sc9_data, 50)
      plt.show()
 50
 40
 30
 20
 10
  0
     0.0
             0.2
                      0.4
                              0.6
====> citations <=====
In [53]: sc10 = MinMaxScaler()
      sc10_data = sc10.fit_transform(data_digit[['citations']])
In [54]: plt.hist(data_digit['citations'], 50)
      plt.show()
```



```
In [60]: plt.hist(data_digit['patents'], 50)
       plt.show()
 250
 200
 150
 100
  50
                200
                                   600
                                             800
In [61]: plt.hist(sc12_data, 50)
       plt.show()
 250
 200
 150
 100
  50
                       0.4
                                                 1.0
      0.0
                                0.6
                                        0.8
               0.2
====> score <====
In [62]: sc13 = MinMaxScaler()
       sc13_data = sc13.fit_transform(data_digit[['score']])
In [63]: plt.hist(data_digit['score'], 50)
       plt.show()
 1000
  800
  600
  400
  200
            50
                    60
                            70
                                   80
                                           90
                                                  100
In [64]: plt.hist(sc13_data, 50)
       plt.show()
 1000
  800
  600
  400
  200
    0
                        0.4
                                 0.6
                                          0.8
                                                  1.0
```

```
====> year <====
In [65]: SC14 = MinMaxScaler()
       sc14 data = sc14.fit transform(data digit[['year']])
In [66]: plt.hist(data_digit['year'], 50)
      plt.show()
 1000
  800
  600
  400
  200
    0
      2014.0
              2014.2
                       2014.4
                               2014.6
                                        2014.8
                                                2015.0
In [67]: plt.hist(sc14_data, 50)
      plt.show()
 1000
  800
  600
  400
  200
    0
               0.2
                        0.4
                                 0.6
                                         0.8
       0.0
```

Сболка отмасштабированных данных в dataset

```
In [68]: data_normal = data_digit.copy()
      data_normal['world_rank'] = sc1_data
      data normal['institution'] = sc2 data
      data_normal['country'] = sc3_data
      data_normal['national_rank'] = sc4_data
      data_normal['quality_of_education'] = sc5_data
      data_normal['alumni_employment'] = sc6_data
      data_normal['quality_of_faculty'] = sc7_data
      data normal['publications'] = sc8 data
      data normal['influence'] = sc9 data
      data_normal['citations'] = sc10_data
      data_normal['broad_impact'] = sc11_data
      data_normal['patents'] = sc12_data
      data_normal['score'] = sc13_data
      data normal['year'] = sc14 data
In [69]: data normal
```

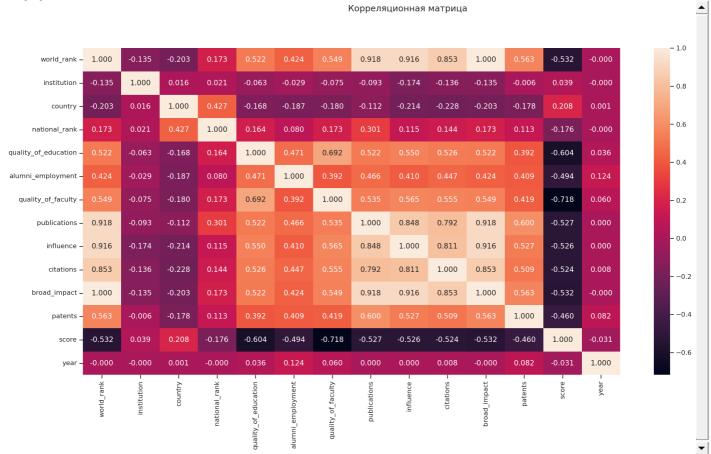
Out[69]:		$world_rank$	institution	country	national_rank	${\sf quality_of_education}$	$alumni_employment$	${\sf quality_of_faculty}$	publications	influence
	200	0.000000	0.180039	0.931034	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	201	0.003003	0.500000	0.931034	0.004386	0.027322	0.001767	0.013825	0.004004	0.002020
	202	0.001001	0.305284	0.931034	0.008772	0.005464	0.017668	0.004608	0.014014	0.001010
	203	0.012012	0.623288	0.982759	0.000000	0.002732	0.015901	0.018433	0.009009	0.008081
	204	0.011011	0.801370	0.982759	0.004386	0.016393	0.019435	0.041475	0.010010	0.011111
	2195	0.968969	0.933464	0.637931	0.026316	1.000000	1.000000	1.000000	0.925926	0.852525
	2196	0.980981	0.010763	0.241379	0.013158	0.642077	0.998233	1.000000	0.996997	0.916162
	2197	0.974975	0.129159	0.068966	0.074561	1.000000	0.968198	1.000000	0.829830	0.830303
	2198	0.974975	0.563601	0.827586	0.171053	1.000000	1.000000	1.000000	0.885886	0.982828
	2199	0.980981	0.072407	0.137931	0.359649	1.000000	1.000000	1.000000	0.860861	1.000000
2	2000 r	rows × 14 co	olumns							

Проверим кореляцию данных

4

```
In [70]: fig, ax = plt.subplots(1, 1, sharex='col', sharey='row', figsize=(20,10))
    fig.suptitle('Корреляционная матрица')
    sns.heatmap(data_normal.corr(), ax=ax, annot=True, fmt='.3f')
```

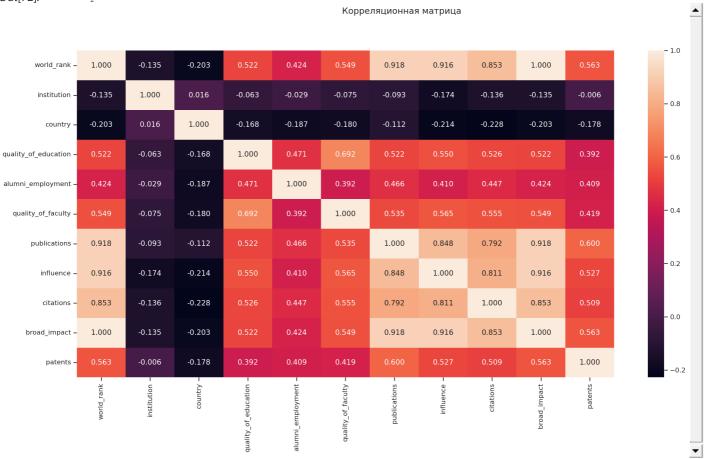
Out[70]:<AxesSubplot:>



Из кореляционной матрицы видно, что для определения целевого признака ($world_rank$) нужно знать только рейтинг за широкое влияние ($broad_impact$), поскольку коефициенк кореляции = 1,000

```
Год ( year ) вобще не корелирует с целевым признаком (коефициент = 0,000). Поэтому его можно исключить из модели
```

```
In [71]: data_normal = data_normal.drop(columns='year')
    data_normal = data_normal.drop(columns='national_rank')
    data_normal = data_normal.drop(columns='score')
In [72]: fig, ax = plt.subplots(1, 1, sharex='col', sharey='row', figsize=(20,10))
    fig.suptitle('Корреляционная матрица')
    sns.heatmap(data_normal.corr(), ax=ax, annot=True, fmt='.3f')
```



Разделение выборки на обучающую и тестовую

In [73]: from sklearn.model selection import train_test_split, cross_val_score, LeaveOneOut, GridSearchCV $\textbf{from} \ \, \textbf{sklearn.neighbors} \ \, \textbf{import} \ \, \textbf{KNeighborsRegressor,} \ \, \textbf{KNeighborsClassifier}$

from sklearn.metrics import accuracy_score, explained_variance_score, mean_absolute_error, max_error

В исходном наборе данных целевой признак не отделён от остальных данных, поэтому выделим набор данных, не содержащий world rank

```
In [74]: data x = data_normal.copy()
      data x = data x.drop(columns='world rank')
      data x
```

Out[74]:	institut	ion countr	y quality_of_education	alumni_employment	quality_of_faculty	publications	influence	citations	broad_impact	р
2	00 0.180	0.93103	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.
2	0.500	000 0.93103	4 0.027322	0.001767	0.013825	0.004004	0.002020	0.002466	0.003003	0.
2	0.305	284 0.93103	0.005464	0.017668	0.004608	0.014014	0.001010	0.001233	0.001001	0.
2	0.623	288 0.98275	9 0.002732	0.015901	0.018433	0.009009	0.008081	0.013564	0.012012	0.
2	0.801	370 0.98275	9 0.016393	0.019435	0.041475	0.010010	0.011111	0.012330	0.011011	0.
21	95 0.933	464 0.63793	1 1.000000	1.000000	1.000000	0.925926	0.852525	1.000000	0.968969	0.
21	96 0.010	763 0.24137	9 0.642077	0.998233	1.000000	0.996997	0.916162	0.794081	0.980981	1.
21	97 0.129	159 0.06896	1.000000	0.968198	1.000000	0.829830	0.830303	1.000000	0.974975	0.
21	98 0.563	501 0.82758	1.000000	1.000000	1.000000	0.885886	0.982828	1.000000	0.974975	0.
21	99 0.072	407 0.13793	1.000000	1.000000	1.000000	0.860861	1.000000	1.000000	0.980981	0.
200	00 rows ×	0 columns								

In [75]: data_y = data_normal['world_rank'] data y

```
Out[75]:200
             0.000000
      201
             0.003003
      202
             0.001001
      203
             0.012012
      204
             0.011011
            0.968969
      2195
      2196
             0.980981
             0.974975
      2197
             0.974975
      2198
      2199
             0.980981
      Name: world rank, Length: 2000, dtype: float64
```

Зададим тестовую выборку с размером 10%

In [76]: data_X_train, data_X_test, data_y_train, data_y_test = train_test_split(data_x, data_y, test_size=0.2, r

Метод ближайших соседей

Первичное обучение модели и оценка качества

```
In [77]: #cll_1 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3) # Классификация в данной задаче не работает
    cll_1 = KNeighborsRegressor(n_neighbors=3) # Используем регрессию
    cll_1.fit(data_X_train, data_y_train)
    target1_0 = cll_1.predict(data_X_train)
    target1_1 = cll_1.predict(data_X_test)
    #accuracy_score(data_y_train, target1_0), accuracy_score(data_y_test, target1_1)
    max_error(data_y_train, target1_0), max_error(data_y_test, target1_1)
Out[77]: (0.17584250917584254, 0.21688355021688355)
```

Оценка качества модели с использованием кросс-валидации

Из-за бага число наборов

a dara vicio nacopos	All Data								
	Т	Test data							
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5					
					Test data				

```
ln [79]: n range = np.array(range(5,55,5))
      tuned parameters = [{'n neighbors': n range}]
      tuned parameters
Out[79]:[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50])}]
Получим максимальную остаточную ошибку, используя всю выборку
In [100]: %%time
       reg gs = GridSearchCV(KNeighborsRegressor(), tuned parameters, cv=3, scoring='max error')
       reg_gs.fit(data_x, data_y)
CPU times: user 484 ms, sys: 15.6 ms, total: 500 ms
Wall time: 491 ms
Out[100]:GridSearchCV(cv=3, estimator=KNeighborsRegressor(),
                     param_grid=[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50])}],
                     scoring='max error')
In [81]: reg gs.best_params_
Out[81]:{'n neighbors': 5}
In [101]: plt.plot(n_range, reg_gs.cv_results_['mean_test_score'])
Out[101]:[<matplotlib.lines.Line2D at 0x7fcc9f5f3430>]
 -0.23
 -0.24
```

-0.23 --0.24 --0.25 --0.26 --0.27 -10 20 30 40 50

Обучение модели и оценка качества с учетом подобранных гиперпараметров

In [84]: max_error(data_y_train, target1_0), max_error(data_y_test, target1_1)

Out[84]: (0.17584250917584254, 0.21688355021688355)

Качество модели до подбора гиперпараметров

In [85]: max_error(data_y_train, target1_0), max_error(data_y_test, target1_1)

Out[85]: (0.17584250917584254, 0.21688355021688355)

Из этих данных видно, что ошибка составляет не более 21,6% при использовании метода ближайших соседей

In []: