Support Vector Machines_v004

February 1, 2020

1 Support Vector Machines

© Thomas Robert Holy 2019 Version 1.0 Visit me on GitHub: https://github.com/trh0ly Kaggle Link: https://www.kaggle.com/c/dda-p2/leaderboard

1.1 Package Import

[1]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.preprocessing import RobustScaler
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
from sklearn.metrics import confusion_matrix
from sklearn.metrics import classification_report
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
from sklearn.metrics import auc
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from sklearn.model_selection import train_test_split
import matplotlib.pyplot as plt
import datetime as dt
from IPython.core.display import display, HTML
from scipy.spatial.distance import euclidean
from sklearn.metrics.pairwise import manhattan_distances
from sklearn.svm import SVC
```

1.2 Hilfsfunktionen

1.2.1 Funktion zur Betrachtung der Konfusinsmatrix

[2]:
```
# Definition einer Funktion, welche eine Konfusionsmatrix und einen Klassifikationsreport
# zurückgibt. Die Konfusionsmatrix kann, wenn ein Wert für c gegeben ist, für beliebige
# Werte von c betrachtet werden.
#------------
# Argumente:
# - X: DataFrame auf welchem die Prognose durchgefürt werden soll (ohne die Zielgröße)
# - y_true: Zum DataFrame X gehörige Werte der Zielgröße
# - model: Modell auf Basis dessen die Konfusionsmatrix berechnet werden soll
# - class_names: Bezeichnung für die Spalten des Dataframes (default=['0', '1'], mit 0 = negativ und 1 = positiv)
# - c:
# ---> Wenn None, dann wird die Konfusionsmatrix ohne die Einbeziehung von c bestimmt
# ---> Wenn != None, dann wird die Konfusionsmatrix in Abhängigkeit von c bestimmt
#------------

def get_confusion_matrix(X, y_true, model, class_names=['0', '1'], c=None):

    #----------------------------
    # Vorgelagerte Berechnung falls ein Wert für c gegeben ist
    # und die Konfusionsmatrix für ein gegebenes c anpasst
    if c != None:
        pred_probability = model.predict_proba(X)
        pred_probability = pred_probability >= c
        y_pred = pred_probability[:, 1].astype(int)

    #----------------------------
    # Wenn kein Wert für c gegeben, dann führe Prognose
    # lediglich auf Basis des Modells durch
    if c == None:
        y_pred = model.predict(X)

    #----------------------------
    # Berechnet die Konfusionsmatrix
    conf_mat = confusion_matrix(y_true, y_pred)

    #----------------------------
    # Überführung in einen DataFrame für eine bessere Übersichtlichkeit
    df_index = pd.MultiIndex.from_tuples([('Wahrer Wert', cn) for cn in class_names])
    df_cols = pd.MultiIndex.from_tuples([('Prognose des Modells', cn) for cn in class_names])
    df_conf_mat = pd.DataFrame(conf_mat, index=df_index, columns=df_cols)

    return df_conf_mat, classification_report(y_true, y_pred)
```

1.2.2 Funktion zur Betrachtung der ROC-Kurve

[3]:
```
# Definition einer Funktion, welche auf Basis eines gegeben Modells und zweier zusammengehöriger
# DataFrames die receiver operating characteristic curve (ROC-Curve) visualisiert
#------------
# Argumente:
# - X: DataFrame auf welchem die Prognose durchgefürt werden soll (ohne die Zielgröße)
# - y_true: Zum DataFrame X gehörige Werte der Zielgröße
# - model: Modell auf Basis dessen die ROC-Curve berechnet werden soll
#------------

def roc_curve_func(X, y_true, model):

        #----------------------------
        # Berechnung FPR, TPR und AUC auf Basis des Modells
        y_score = model.predict_proba(X)[:,1]
        FPR, TPR, _ = roc_curve(y_true, y_score)
        AUC = auc(FPR, TPR)

        #----------------------------
        # Darstellung als Grafik
        plt.figure()
        plt.plot(FPR, TPR, color='red', lw=2, label='ROC-Kurve (AUC = %0.5f)' % AUC)
        plt.plot([0, 1], [0, 1], color='black', lw=2, linestyle='--')
        plt.xlim([-0.005, 1.0])
        plt.ylim([0.0, 1.05])
        plt.xlabel('False Positive Rate')
        plt.ylabel('True Positive Rate')
        plt.title('ROC-Kurve')
        plt.legend(loc="lower right")
        plt.show()
```

1.2.3 Funktion für das Submitten

[4]:
```
# Definition einer Funktion, welche das Submitten der Prognose auf dem Testdatensatz erleichert
#------------
# Argumente:
# - model: Modell auf Basis dessen die Prognose erfolgt
# - c:
# ---> Wenn None, dann wird die Prognose ohne die Berücksichtung von c vorgenommen
# ---> Wenn != None, dann wird Prognose mit der Berücksichtung von c vorgenommen
# - save:
# ---> Wenn False, dann werden die prognostizierten Daten nicht gespeichert
# ---> Wenn True, dann werden die prognostizierten Daten als .csv gespeichert
# - manu_name:
# ---> Wenn None, dann wird ein nicht eindeutiger Standardname als Bezeichnung der .csv gewählt
# ---> Wenn != None, dann wird die zu speichernde .csv mit einem timestamp versehen
#------------

def submit(model, c=None, save=False, manu_name=False):

    #--------------------------------
    # Testdatensatz einlesen
    X_test = pd.read_csv('test.csv', index_col=0)

    #--------------------------------
    # Prognosewerte auf Sensordaten des Testdatensatzes und unter
    # Berücksichtung von c erzeugen
    if c != None:
        predicted_test = (model.predict_proba(X_test) >= c)[:,1].astype(int)

    #--------------------------------
    # Prognosewerte auf Sensordaten des Testdatensatzes erzeugen
    # ohne c zu Berücksichtigen
    if c == None:
        predicted_test = model.predict(X_test)

    #--------------------------------
    # Submissiondatensatz einlesen und prognostizierte Werte hineinschreiben
    submission = pd.read_csv('sample_submission.csv')
    submission['Fehlerhaft'] = predicted_test

    #--------------------------------
    # In .csv speichern, wenn save=True
    if save == True:

        #--------------------------------
        # Standardnamen wählen, wenn manu_name == False
        if manu_name == False:
            submission.to_csv('./predicted_values.csv', index=False)

        #--------------------------------
        # Standardnamen mit timestamp kombinieren, wenn  manu_name == True
        if manu_name == True:
            import datetime
            now = datetime.datetime.now()
            name = now.strftime('%Y-%m-%dT%H%M%S') + ('-%02d' % (now.microsecond / 10000))
            submission.to_csv('./predicted_values_' + str(name) + '.csv', index=False)

    return submission.head(), submission.loc[submission['Fehlerhaft'] == 1]
```

1.2.4 Funktion zum Filtern von Quantilen

[5]:
```
# Definition einer Funktion, welche einen gegeben DataFrame
# um untere und obere Quantile beschneiden kann
#------------
# Argumente:
# - orignal_df: DataFrame welcher bearbeitet werden soll
# - quantile_low: Unteres Quantil bis zu welchem orignal_df beschnitten werden soll
# - quantile_high: Oberes Quantil welchem orignal_df beschnitten werden soll
# - colum_to_drop: Spalte des orignal_df, welche während des Vorgangs gedroppt werden soll
#------------

def filter_my_df(orignal_df, quantile_low, quantile_high, colum_to_drop):

    #----------------------------
    # Spalte "colum_to_drop" aus dem Datensatz entfernen
    df_filtered = orignal_df.loc[:, orignal_df.columns != colum_to_drop]
    # Quantil-DataFrame erzeugen
    quant_df = df_filtered.quantile([quantile_low, quantile_high])
    # Quantil-DataFrame auf orignal_df anweden
    df_filtered = df_filtered.apply(lambda x: x[(x>quant_df.loc[quantile_low,x.name]) &
                                            (x < quant_df.loc[quantile_high,x.name])],
                                            axis=0)
    #----------------------------
    # Spalte "Fehlerhaft" dem gefiltertem DataFrame wieder anfügen
    df_filtered = pd.concat([orignal_df.loc[:,colum_to_drop], df_filtered], axis=1)
    # Aus Beschneidung resultierende NaN-Werte bereinigen
    df_filtered.dropna(inplace=True)

    return df_filtered
```

1.3 Datensatz einlesen (bereinigigen) und betrachten

1.3.1 Datensatz einlesen

[6]:
```
#----------------------------
# Datensatz einlesen
data = pd.read_csv('train.csv', index_col=0)
```

1.3.2 Optionale Datensatzbereinigung

[7]:
```
"""
#----------------------------
# Datensatz unterteilen

df_fehlerfrei = data.loc[data['Fehlerhaft'] == 0]
df_fehlerhaft = data.loc[data['Fehlerhaft'] == 1]
"""

"""
#----------------------------
# Fehlerfreie Stückgüter
colum_to_drop = 'Fehlerhaft'
orignal_df = df_fehlerfrei
low = .0 # Unteres Quantil
high = .99 # Oberes Quantil
df_fehlerfrei_filtered = filter_my_df(df_fehlerfrei, low, high, colum_to_drop)

#----------------------------
# Fehlerhafte Stückgüter
colum_to_drop = 'Fehlerhaft'
orignal_df = df_fehlerhaft
low = .018333 # Unteres Quantil
high = 1. # Oberes Quantil
df_fehlerhaft_filtered = filter_my_df(df_fehlerhaft, low, high, colum_to_drop)

#----------------------------
# Teil-DataFrames zusammenführen
data_filtered = pd.concat([df_fehlerhaft_filtered, df_fehlerfrei_filtered], sort=False)
"""
```

[7]:
```
"\n#----------------------------\n# Fehlerfreie Stückgüter\ncolum_to_drop =
'Fehlerhaft'\norignal_df = df_fehlerfrei\nlow = .0 # Unteres Quantil \nhigh =
.99 # Oberes Quantil\ndf_fehlerfrei_filtered = filter_my_df(df_fehlerfrei, low,
high, colum_to_drop)\n\n#----------------------------\n# Fehlerhafte
Stückgüter\ncolum_to_drop = 'Fehlerhaft'\norignal_df = df_fehlerhaft\nlow =
.018333 # Unteres Quantil \nhigh = 1. # Oberes Quantil\ndf_fehlerhaft_filtered =
filter_my_df(df_fehlerhaft, low, high,
colum_to_drop)\n\n#----------------------------\n# Teil-DataFrames
zusammenführen\ndata_filtered = pd.concat([df_fehlerhaft_filtered,
df_fehlerfrei_filtered], sort=False)\n"
```

1.3.3 Beschreibung der separierten Datensätze (Betrachtung Min-/ Maximum und Qunatile)

[8]:
```
"""
df_fehlerfrei.describe()
"""
```

[8]:
```
'\ndf_fehlerfrei.describe()\n'
```

[9]:
```
"""
df_fehlerhaft.describe()
"""
```

[9]:
```
'\ndf_fehlerhaft.describe()\n'
```

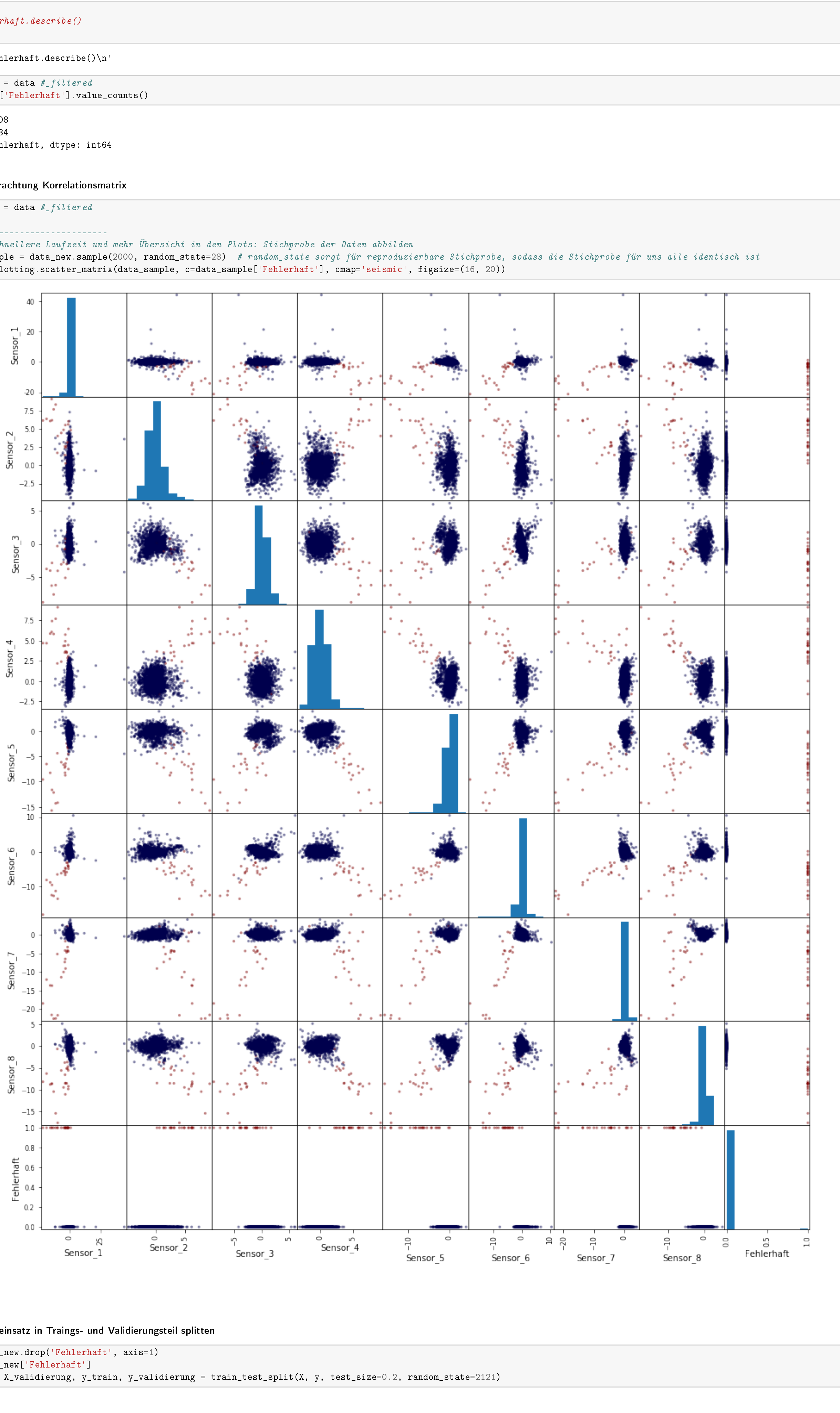
[10]:
```
data_new = data #_filtered
data_new['Fehlerhaft'].value_counts()
```

[10]:
```
0    20208
1      284
Name: Fehlerhaft, dtype: int64
```

1.3.4 Betrachtung Korrelationsmatrix

[11]:
```
data_new = data #_filtered

#----------------------------
# Für schnellere Laufzeit und mehr Übersicht in den Plots: Stichprobe der Daten abbilden
data_sample = data_new.sample(2000, random_state=28)  # random_state sorgt für reproduzierbare Stichprobe, sodass die Stichprobe für uns alle identisch ist
_ = pd.plotting.scatter_matrix(data_sample, c=data_sample['Fehlerhaft'], cmap='seismic', figsize=(16, 20))
```



1.3.5 Dateinsatz in Traings- und Validierungsteil splitten

[12]:
```
X = data_new.drop('Fehlerhaft', axis=1)
y = data_new['Fehlerhaft']
X_train, X_validierung, y_train, y_validierung = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=2121)
```

1.4 Modell aufstellen

[13]:
```
# Definition einer Funktion, welche eine Gittersuche mit einem KNeighborsClassifier durchführt
# und nach einer 5-fach Kreuzvalidierung das beste Modell zurückgibt
#------------
# Argumente:
# - i: Fügt X^i der Featurematrix hinzu
# - X: DataFrame auf welchem die Prognose durchgefürt werden soll (ohne die Zielgröße)
# - y_true: Zum DataFrame X gehörige Werte der Zielgröße
# - my_scaler: Zu verwendender Scaler; per default MinMaxScaler; weitere Scaler: RobustScaler, Standardscaler
# - C: Parameter für die Regularisierung; je kleiner, desto stärker die Regularisierung
# - kernel: Im algorithmus verwendeter Kernel
# - gamma: Kernelkoeffizient
# - jobs: Anzahl der Threads die für den Durchlauf zur Verfügung stehen
# - gs_scoring: Scoring Verfahren im Rahmen der GridSearch
# - folts: Komplexität der Kreuzvalidierung
#------------

def svm_1(i, X, y_true, my_scaler=MinMaxScaler, jobs=-3, gs_scoring='f1', folts=5, C=[0.1, 1, 10, 100, 1000], kernel=['linear', 'poly', 'rbf', 'sigmoid'], gamma=['scale']):

    #--------------------------------
    # Pipeline erzeugen
    prediction_pipe = Pipeline([('scaler', my_scaler()),
                                ('add_x_square', PolynomialFeatures(degree=i)),
                                ('classifier', SVC(cache_size=7000, probability=True))])

    #--------------------------------
    # Parameter Grid
    param_grid = [{'classifier': [SVC(cache_size=7000, probability=True)],
                   'classifier__C': C,
                   #'classivier__degree': degree,
                   'classifier__gamma': gamma,
                    'classifier__kernel': kernel}
                  ]

    #--------------------------------
    # StratifiedKFold für unbalancierten Datensatz
    scv = StratifiedKFold(n_splits=folts)

    #--------------------------------
    # Gittersuche
    grid_search = GridSearchCV(
            estimator=prediction_pipe,
            param_grid=param_grid,
            scoring=gs_scoring,
            cv=scv,
            verbose=True,
            n_jobs=jobs,
            iid=False)

    #--------------------------------
    # Fit
    model = grid_search.fit(X,y_true)

    return model, grid_search.best_score_
```

1.4.1 Modelaufruf und Scoring

Modell 1

[14]:
```
svm_model, svm_score = svm_1(1, X_train, y_train, my_scaler=MinMaxScaler, jobs=10, gs_scoring='f1', C=[0.1, 1, 10, 100, 1000], kernel=['linear', 'poly', 'rbf'],
 ↪gamma=['scale'])
svm_score
```

```
Fitting 5 folds for each of 15 candidates, totalling 75 fits

[Parallel(n_jobs=10)]: Using backend LokyBackend with 10 concurrent workers.
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  30 tasks      | elapsed:    8.4s
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  75 out of  75 | elapsed:  5.3min finished
```

[14]:
```
0.8876821136601146
```

Modell 2

[15]:
```
svm_model2, svm_score2 = svm_1(1, X_train, y_train, my_scaler=StandardScaler, jobs=10, gs_scoring='f1', C=[0.1, 1, 10, 100, 1000], kernel=['linear', 'poly', 'rbf'],
 ↪gamma=['scale'])
svm_score2
```

```
Fitting 5 folds for each of 15 candidates, totalling 75 fits

[Parallel(n_jobs=10)]: Using backend LokyBackend with 10 concurrent workers.
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  30 tasks      | elapsed:   29.8s
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  75 out of  75 | elapsed: 20.3min finished
```

[15]:
```
0.8807232413976462
```

[16]:
```
svm_model3, svm_score3 = svm_1(1, X_train, y_train, my_scaler=RobustScaler, jobs=10, gs_scoring='f1', C=[0.1, 1, 10, 100, 1000], kernel=['linear', 'poly', 'rbf'],
 ↪gamma=['scale'])
svm_score3
```

```
Fitting 5 folds for each of 15 candidates, totalling 75 fits

[Parallel(n_jobs=10)]: Using backend LokyBackend with 10 concurrent workers.
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  30 tasks      | elapsed:   48.9s
[Parallel(n_jobs=10)]: Done  75 out of  75 | elapsed: 39.6min finished
```

[16]:
```
0.8877796901893287
```

Scoring Model 1 / Modell 2

[17]:
```
model = svm_model
print(model.best_params_)

model = svm_model2
print(model.best_params_)

model = svm_model3
print(model.best_params_)
```

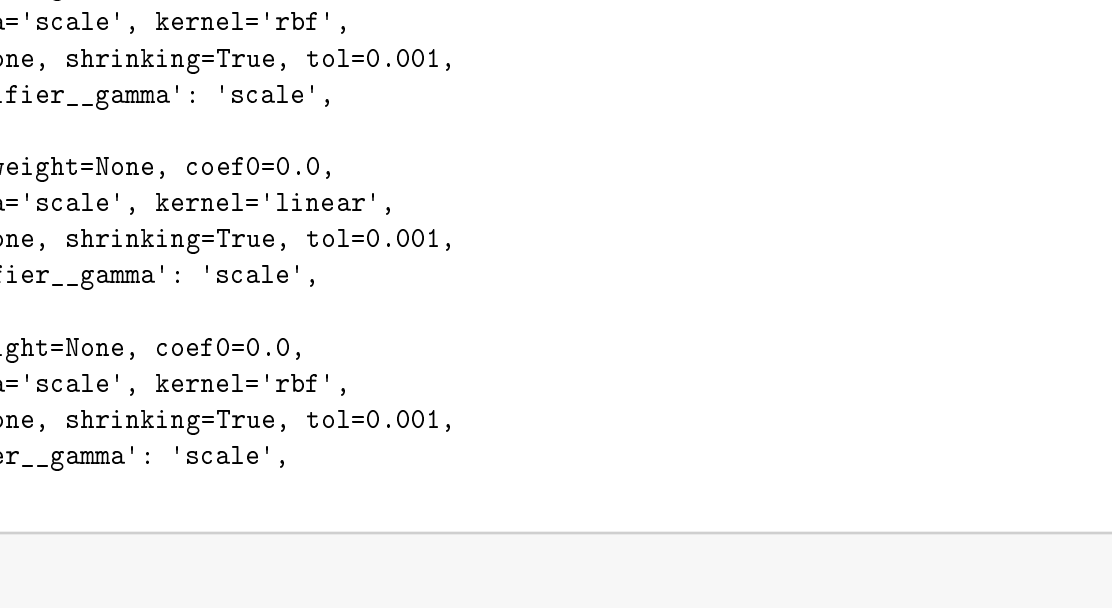
```
{'classifier': SVC(C=1000, cache_size=7000, class_weight=None, coef0=0.0,
    decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='rbf',
    max_iter=-1, probability=True, random_state=None, shrinking=True, tol=0.001,
    verbose=False), 'classifier__C': 1000, 'classifier__gamma': 'scale',
'classifier__kernel': 'rbf'}
{'classifier': SVC(C=0.1, cache_size=7000, class_weight=None, coef0=0.0,
    decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='linear',
    max_iter=-1, probability=True, random_state=None, shrinking=True, tol=0.001,
    verbose=False), 'classifier__C': 0.1, 'classifier__gamma': 'scale',
'classifier__kernel': 'linear'}
{'classifier': SVC(C=1, cache_size=7000, class_weight=None, coef0=0.0,
    decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='rbf',
    max_iter=-1, probability=True, random_state=None, shrinking=True, tol=0.001,
    verbose=False), 'classifier__C': 1, 'classifier__gamma': 'scale',
'classifier__kernel': 'rbf'}
```

[33]:
```
model = svm_model2
c = 0.35

class_names = ['Stückgut fehlerfrei', 'Stückgut fehlerhaft']
confusion_matrix1, report1 = get_confusion_matrix(X_train, y_train, model, class_names, c)
confusion_matrix1
```

[33]:
```
                                 Prognose des Modells
                                  Stückgut fehlerfrei Stückgut fehlerhaft
Wahrer Wert Stückgut fehlerfrei                16164                   4
            Stückgut fehlerhaft                   46                 179
```

[34]:
```
roc_curve_func(X_train, y_train, model)
```



[20]:
```
print(report1)
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           0       1.00      1.00      1.00     16168
           1       0.99      0.86      0.92       225

    accuracy                           1.00     16393
   macro avg       0.99      0.93      0.96     16393
weighted avg       1.00      1.00      1.00     16393
```

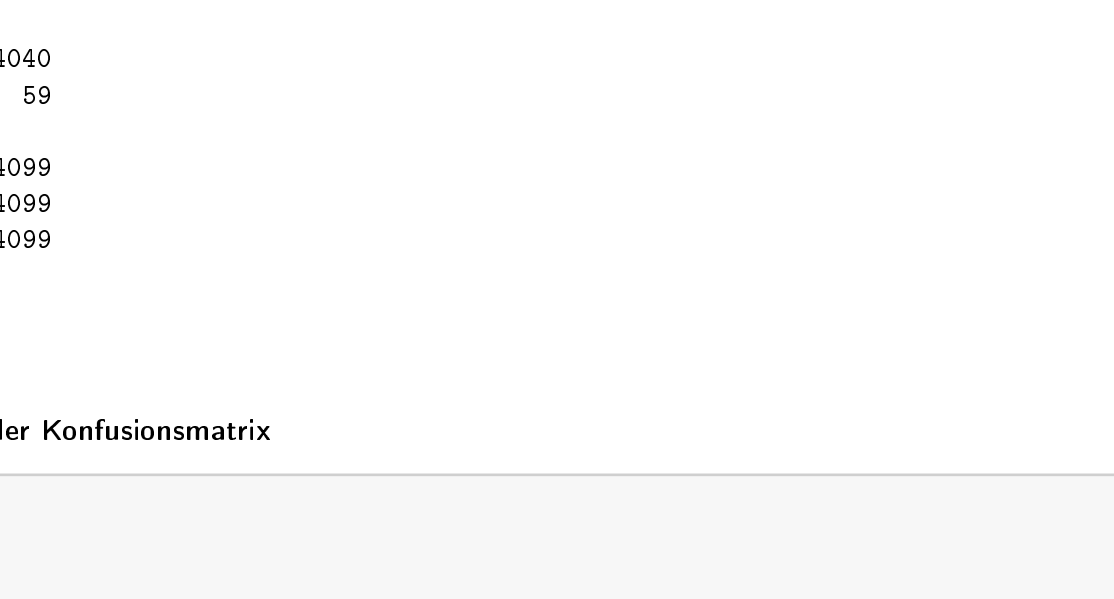
Scoring auf Validerungsdatensatz

[31]:
```
model = svm_model2
c = 0.35

class_names = ['Stückgut fehlerfrei', 'Stückgut fehlerhaft']
confusion_matrix2, report2 = get_confusion_matrix(X_validierung, y_validierung, model, class_names, c)
confusion_matrix2
```

[31]:
```
                                 Prognose des Modells
                                  Stückgut fehlerfrei Stückgut fehlerhaft
Wahrer Wert Stückgut fehlerfrei                 4037                   3
            Stückgut fehlerhaft                   17                  42
```

[32]:
```
roc_curve_func(X_validierung, y_validierung, model)
```



[23]:
```
print(report2)
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           0       1.00      1.00      1.00      4040
           1       0.96      0.73      0.83        59

    accuracy                           1.00      4099
   macro avg       0.98      0.86      0.91      4099
weighted avg       1.00      1.00      1.00      4099
```

1.5 Submit

1.5.1 Kontrolle Modellwahl (Modell 1 oder 2) anhand der Konfusionsmatrix

[35]:
```
"""
model = svm_model2
c = 0.35

class_names = ['Stückgut fehlerfrei', 'Stückgut fehlerhaft']
confusion_matrix3, report3 = get_confusion_matrix(X_validierung, y_validierung, model, class_names, c)
confusion_matrix3
"""
```

[35]:
```
                                 Prognose des Modells
                                  Stückgut fehlerfrei Stückgut fehlerhaft
Wahrer Wert Stückgut fehlerfrei                 4037                   3
            Stückgut fehlerhaft                   17                  42
```

1.5.2 Submit der Prognose

[36]:
```
"""
submission_head, submission_fehlerhaft = submit(model, c, save=True, manu_name=True)
submission_head
"""
```

[36]:
```
      ID  Fehlerhaft
0   2801           0
1  13844           0
2  23197           0
3   9209           0
4  31773           0
```

1.5.3 Ausgabe DataFrame mit als defekt klassifizierten Stückgütern im Testdatensat

[37]:
```
"""
submission_fehlerhaft
"""
```

[37]:
```
          ID  Fehlerhaft
16     35272           1
55     35026           1
154    35341           1
166    35102           1
241    35186           1
...      ...         ...
14779  35316           1
14796  35054           1
14809  35435           1
14871  21379           1
14886  35019           1

[175 rows x 2 columns]
```