K naechste nachbarn

May 28, 2021

1 K-nächste Nachbarn (K-nearest Neighbors)

Wir wenden den K-nächste-Nachbarn-Algorithmus auf den IRIS-Datensatz an.

```
[106]: # Wir laden den Datensatz
       import pandas as pd
       url = "https://raw.githubusercontent.com/troescherw/datasets/master/iris.csv"
       iris = pd.read_csv(url, delimiter=";")
       iris
[106]:
                           Sepal_Width Petal_Length Petal_Width
            Sepal_Length
                                                                         Species
       0
                      5.1
                                    3.5
                                                   1.4
                                                                 0.2
                                                                          setosa
       1
                      4.9
                                    3.0
                                                   1.4
                                                                 0.2
                                                                          setosa
                      4.7
       2
                                    3.2
                                                   1.3
                                                                 0.2
                                                                          setosa
       3
                      4.6
                                    3.1
                                                   1.5
                                                                 0.2
                                                                          setosa
       4
                      5.0
                                    3.6
                                                   1.4
                                                                 0.2
                                                                          setosa
       145
                      6.7
                                    3.0
                                                   5.2
                                                                 2.3 virginica
       146
                      6.3
                                    2.5
                                                   5.0
                                                                       virginica
                                                                 1.9
       147
                      6.5
                                    3.0
                                                   5.2
                                                                 2.0
                                                                       virginica
       148
                      6.2
                                    3.4
                                                   5.4
                                                                 2.3
                                                                       virginica
       149
                      5.9
                                    3.0
                                                   5.1
                                                                 1.8
                                                                       virginica
            SpeciesID
       0
                     0
                     0
       1
       2
                     0
       3
                     0
                     0
       4
       . .
       145
                     2
       146
                     2
       147
                     2
       148
                     2
                     2
       149
```

[150 rows x 6 columns]

```
[107]: # Aufteilen in X und y
X = iris.iloc[:, :4]
y = iris.SpeciesID
```

```
[108]: # Aufteilen in Trainings- und Testdaten
# "Training" bedeutet hier das Erstellen einer Abstandsmatrix

from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, shuffle=True, \( \subset \)
$\text{test_size=0.3}$
```

Wir erstellen das Modell und verwenden für k den Wert 5.

```
[109]: from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5).fit(X_train, y_train)
```

Wir klassifizieren die Objekte aus dem Test-Datensatz.

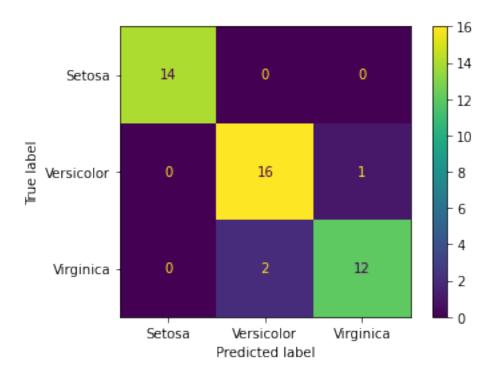
```
[110]: pred = knn.predict(X_test)
pred
```

```
[110]: array([1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 2, 2, 1, 0, 0, 0, 2, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 0, 1, 2, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 1, 2, 0, 2, 2, 0, 2])
```

Wir stellen das Ergebnis in einer Confusion Matrix dar und berechnen die Accuracy.

```
[111]: from sklearn.metrics import plot_confusion_matrix
import numpy as np

classes = ["Setosa", "Versicolor", "Virginica"]
   _=plot_confusion_matrix(knn, X_test, y_test, display_labels=classes)
```



```
[112]: from sklearn.metrics import accuracy_score accuracy_score(y_test,pred)
```

[112]: 0.9333333333333333

1.1 Optimierung des Algorithmus

Für die Zuordnung des Objektes zu einer Klasse gibt es mehrere Möglichkeiten: Im einfachsten Fall wird wie schon erwähnt eine schlichte Mehrheitsentscheidung getroffen, was aber nicht immer das beste Ergebnis liefert, insbesondere wenn sich ähnlich oder sogar gleich viele Objekte der jeweiligen Klasse in unmittelbarer Nachbarschaft befinden. Daher kann man altnernativ die Objekte in der Nachbarschaft gewichten: Je näher ein Objekt, desto mehr "Gewicht" erhält die jeweilige Klasse.

Dem Konstruktor der Klasse KNeighbors Classifier kann man deshalb noch das Attribut weights bestimmen. Standardmäßig ist dies auf uniform gesetzt, was der ersten, einfachen Methode entspricht. Man kann es aber auch auf den Wert distance setzen, dann werden die Abstände gewichtet.

Im folgenden Skript wollen wir nun anhand eines Datensatzes das optimale K und auch die optimale Gewichtung der Abstände bestimmen. Wir verwenden hierfür einen Datensatz aus dem *sklearn*-Package, der über chemische Analysedaten von Weinen verfügt. Jeder der 178 Weine stammt von einem von drei italienischen Winzern ("cultivator"). Wie gut kann unser Modell vorhersagen, von welchem Winzer der Wein stammt?

Um unser Modell zu optimieren werden wir ein K von 1 bis 10 verwenden und für jedes K ein unterschiedliches Verfahren für die Gewichtung verwenden. Es werden also insgesamt 20 Modelle durchprobiert und für jedes ermitteln wir die Accuracy. Die Kombination aus K und dem Typ für

die Gewichtung mit der höchsten Accuracy liefert (vermutlich) die besten Hyperparameter.

```
[44]: # Laden des Datensatzes
     from sklearn.datasets import load_wine
     wines = load_wine()
     print(wines.DESCR)
     .. _wine_dataset:
    Wine recognition dataset
     .____
    **Data Set Characteristics:**
        :Number of Instances: 178 (50 in each of three classes)
        :Number of Attributes: 13 numeric, predictive attributes and the class
        :Attribute Information:
                  - Alcohol
                  - Malic acid
                  - Ash
                  - Alcalinity of ash
                  - Magnesium
                  - Total phenols
                  - Flavanoids
                  - Nonflavanoid phenols
                  - Proanthocyanins
                  - Color intensity
                  - Hue
                  - OD280/OD315 of diluted wines
                  - Proline
        - class:
               - class 0
               - class_1
               - class 2
        :Summary Statistics:
         _____ ____ ____ ____
                                   Min
                                        Max
                                              Mean
                                                      SD
        11.0 14.8
                                               13.0 0.8
        Alcohol:
        Malic Acid:
                                  0.74 5.80
                                              2.34 1.12
```

1.36 3.23

10.6 30.0

70.0 162.0

0.98 3.88

2.36 0.27

19.5 3.3

99.7 14.3

2.29 0.63

Ash:

Magnesium:

Total Phenols:

Alcalinity of Ash:

	====	=====	======	=====
Proline:	278	1680	746	315
$\ensuremath{\texttt{OD280/OD315}}$ of diluted wines:	1.27	4.00	2.61	0.71
Hue:	0.48	1.71	0.96	0.23
Colour Intensity:	1.3	13.0	5.1	2.3
Proanthocyanins:	0.41	3.58	1.59	0.57
Nonflavanoid Phenols:	0.13	0.66	0.36	0.12
Flavanoids:	0.34	5.08	2.03	1.00

:Missing Attribute Values: None

:Class Distribution: class_0 (59), class_1 (71), class_2 (48)

:Creator: R.A. Fisher

:Donor: Michael Marshall (MARSHALL%PLU@io.arc.nasa.gov)

:Date: July, 1988

This is a copy of UCI ML Wine recognition datasets. https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine/wine.data

The data is the results of a chemical analysis of wines grown in the same region in Italy by three different cultivators. There are thirteen different measurements taken for different constituents found in the three types of wine.

Original Owners:

Forina, M. et al, PARVUS -

An Extendible Package for Data Exploration, Classification and Correlation. Institute of Pharmaceutical and Food Analysis and Technologies, Via Brigata Salerno, 16147 Genoa, Italy.

Citation:

Lichman, M. (2013). UCI Machine Learning Repository [https://archive.ics.uci.edu/ml]. Irvine, CA: University of California, School of Information and Computer Science.

.. topic:: References

(1) S. Aeberhard, D. Coomans and O. de Vel, Comparison of Classifiers in High Dimensional Settings, Tech. Rep. no. 92-02, (1992), Dept. of Computer Science and Dept. of Mathematics and Statistics, James Cook University of North Queensland. (Also submitted to Technometrics).

The data was used with many others for comparing various classifiers. The classes are separable, though only RDA has achieved 100% correct classification.

(RDA: 100%, QDA 99.4%, LDA 98.9%, 1NN 96.1% (z-transformed data))

```
(2) S. Aeberhard, D. Coomans and O. de Vel,
       "THE CLASSIFICATION PERFORMANCE OF RDA"
       Tech. Rep. no. 92-01, (1992), Dept. of Computer Science and Dept. of
       Mathematics and Statistics, James Cook University of North Queensland.
       (Also submitted to Journal of Chemometrics).
[45]: # Aufteilen in Trainings- und Testdaten
      # "Training" bedeutet hier das Erstellen einer Abstandsmatrix
      from sklearn.model selection import train test split
      X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(wines.data, wines.target,__
       ⇔shuffle=True, test_size=0.3, random_state=23 )
[46]: from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
      import numpy as np
      weights = ["uniform", "distance"]
      ks = np.arange(1,10)
      knn = KNeighborsClassifier(n neighbors=k, weights=weight).fit(X train, y train)
      pred = knn.predict(X_test)
      for weight in weights:
          for k in ks:
              knn = KNeighborsClassifier(n neighbors=k, weights=weight).fit(X train,
       →y_train)
              print(f"K={k}, weights={weight}, Accuracy = {knn.score(X_test, y_test):.
       →3}")
     K=1, weights=uniform, Accuracy = 0.796
     K=2, weights=uniform, Accuracy = 0.685
     K=3, weights=uniform, Accuracy = 0.704
     K=4, weights=uniform, Accuracy = 0.648
     K=5, weights=uniform, Accuracy = 0.648
     K=6, weights=uniform, Accuracy = 0.704
     K=7, weights=uniform, Accuracy = 0.667
     K=8, weights=uniform, Accuracy = 0.685
     K=9, weights=uniform, Accuracy = 0.648
     K=1, weights=distance, Accuracy = 0.796
     K=2, weights=distance, Accuracy = 0.796
     K=3, weights=distance, Accuracy = 0.759
     K=4, weights=distance, Accuracy = 0.722
     K=5, weights=distance, Accuracy = 0.722
```

(All results using the leave-one-out technique)

```
K=6, weights=distance, Accuracy = 0.685
K=7, weights=distance, Accuracy = 0.722
K=8, weights=distance, Accuracy = 0.722
K=9, weights=distance, Accuracy = 0.759
```