Analiza eksploracyjna oraz klasyfikacja przy użyciu metod uczenia zespołowego na zbiorze danych Titanic

Damian Lewańczyk

Spis treści

1	Ana	aliza eksploracyjna	1
	1.1	Opis danych	1
	1.2	Szukanie i uzupełnianie brakujących wartości	3
		1.2.1 Wytypowanie i usuwanie niepotrzebnych zmiennych	4
		1.2.2 Przypisanie typów zmiennych	
		1.2.3 Wypełnianie brakujących wartości	
	1.3	Wizualizacja danych	
2	Met	tody uczenia zespołowego	11
	2.1	Ogólna idea	11
	2.2	Pojedynczy klasyfikator - drzewo decyzyjne	11
	2.3	Bagging	12
	2.4	Random forest	
	2.5	Boosting	
3	Kla	syfikacja zmiennej objaśnianej	15
	3.1	Opis symulacji	15
	3.2	Sposoby implementacji	
	3.3	Wyniki	
4	Pod	lsumowanie	20

1 Analiza eksploracyjna

1.1 Opis danych

Nasz zbiór danych Titanic złożony jest z 1309 obserwacji - pasażerów słynnego statku. Zawiera 14 różnych zmiennych objaśniających opisujących poszczególne osoby oraz zmienną objaśnianą survived - opisuje ona czy dany człowiek przeżył (survived = 1) czy nie (survived = 0). Przed analizą danych przedstawimy krótki opis każdej zmiennej, przedstawiając jej nazwę oraz typ:

- pclass (zmienna jakościowa, przyjmuje 3 różne wartości) określa klasę biletu pasażera
- survived (zmienna jakościowa, przyjmuje 2 różne wartości) zmienna objaśniana, opisuje czy dany pasażer przeżył katastrofę czy nie

- name (zmienna jakościowa, przyjmuje 1307 różnych wartości) imię i nazwisko pasażera
- sex (zmienna jakościowa, przyjmuje 2 różne wartości) płeć pasażera
- age (zmienna ilościowa, przyjmuje wartości w zakresie od 0.1667 do 80) wiek osoby
- sibsp (zmienna jakościowa, przyjmuje 7 różnych wartości) liczba rodzeństwa i współmałżonków danej osoby, którzy też znajdują się na pokładzie statku
- parch (zmienna jakościowa, przyjmuje 8 różnych wartości) liczba dzieci i rodziców danej osoby znajdujących się na statku
- ticket (zmienna jakościowa, przyjmuje 929 różnych wartości) numer biletu
- fare (zmienna ilościowa typu ciągłego, przyjmuje wartości w zakresie od 0 do 512.3292)
 opłata za podróż
- cabin (zmienna jakościowa, przyjmuje 186 różnych wartości) kabina danego pasażera
- embarked (zmienna jakościowa, przyjmuje 3 różne wartości) port z którego wyruszył dany pasażer: C = Cherbourg; Q = Queenstown; S = Southampton
- boat (zmienna jakościowa, przyjmuje 27 różnych wartości) numer łodzi, jeśli pasażer przeżył
- **body** (zmienna jakościowa, przyjmuje 121 różnych wartości) numer ciała, jeśli pasażer nie przeżył, a ciało odnaleziono
- home.dest (zmienna jakościowa, przyjmuje 369 różnych wartości) miasto do którego udawał się pasażer

Dodatkowo, w tabelach 1 i 2 przedstawione jest pierwsze 10 wierszy zbioru danych, podzielonych na dwie części po 7 cech.

Tabela 1: Pierwsze 10 wierszy zbioru danych Titanic, kolumny 1-7

pclass	survived	name	sex	age	sibsp	parch
1	1	ALLEN, MISS. ELISABETH WAL-	female	29	0	0
		TON				
1	1	ALLISON, MASTER. HUDSON	male	0,9167	1	2
		TREVOR				
1	0	ALLISON, MISS. HELEN LORA-	female	2	1	2
		INE				
1	0	ALLISON, MR. HUDSON JO-	male	30	1	2
		SHUA CREIGHTON				
1	0	ALLISON, MRS. HUDSON J C	female	25	1	2
		(BESSIE WALDO DANIELS)				
1	1	ANDERSON, MR. HARRY	male	48	0	0
1	1	ANDREWS, MISS. KORNELIA	female	63	1	0
		THEODOSIA				
1	0	ANDREWS, MR. THOMAS JR	male	39	0	0
1	1	APPLETON, MRS. EDWARD DA-	female	53	2	0
		LE (CHARLOTTE LAMSON)				
1	0	ARTAGAVEYTIA, MR. RAMON	male	71	0	0

ticket	fare	cabin	embarked	boat	body	home.dest
24160	211,3375	B5	S	2	NaN	St Louis, MO
113781	151,5500	C22 C26	S	11	NaN	Montreal, PQ / Chestervil-
						le, ON
113781	151,5500	C22 C26	S	NaN	NaN	Montreal, PQ / Chestervil-
						le, ON
113781	151,5500	C22 C26	S	NaN	135.0	Montreal, PQ / Chestervil-
						le, ON
113781	151,5500	C22 C26	S	NaN	NaN	Montreal, PQ / Chestervil-
						le, ON
19952	26,5500	E12	S	3	NaN	New York, NY
13502	77,9583	D7	S	10	NaN	Hudson, NY
112050	0,0000	A36	S	NaN	NaN	Belfast, NI
11769	51,4792	C101	S	D	NaN	Bayside, Queens, NY
PC 17609	49,5042	NaN	С	NaN	22.0	Montevideo, Uruguay

1.2 Szukanie i uzupełnianie brakujących wartości

Użyjemy metody isnull() dla obiektu klasy **pandas.DataFrame**, aby sprawdzić ile wartości brakujących ma każda zmienna oraz jaki jest to odsetek całości. W kodzie źródłowym 1 podane zostały bezwzględne liczby wartości brakujących dla poszczególnych zmiennych, a w kodzie źródłowym 2 procentowy udział tych wartości w stosunku do wszystkich wierszy.

```
1 Out [103]:
                     0
2 pclass
3 survived
                     0
4 name
                     0
                     0
5 sex
6 age
                   263
                     0
7 sibsp
                     0
8 parch
9 ticket
                     0
10 fare
                     1
                 1014
11 cabin
                     2
12 embarked
13 boat
                  823
14 body
                  1188
                   564
15 home.dest
```

Kod źródłowy 1: Liczba wartości brakujących dla każdej cechy

```
1 Out [113]:
                  0.0
2 pclass
3 survived
                  0.0
                  0.0
4 name
5 sex
                  0.0
                 20.1
6 age
                  0.0
7 sibsp
                  0.0
8 parch
9 ticket
                  0.0
                  0.1
10 fare
                 77.5
11 cabin
                  0.2
12 embarked
```

```
13 boat 62.9
14 body 90.8
15 home.dest 43.1
```

Kod źródłowy 2: Odsetek wartości brakujących dla każdej cechy

1.2.1 Wytypowanie i usuwanie niepotrzebnych zmiennych

Widzimy powyżej, że zmienne cabin, boat, body i home.dest mają najwięcej brakujących wartości, każda z nich ponad 40%, tym samym usuwamy je z modelu. Ponadto, usuwamy zmienne z imieniem i nazwiskiem oraz numerem biletu pasażera, ponieważ oczywiście nie mają one wpływu na potencjalne przeżycie danej osoby (te zmienne jakościowe, czyli name i ticket mają bardzo dużo kategorii). W celu usunięcia zmiennych posłużymy się metodą drop() dla obiektu klasy pandas.DataFrame, co widzimy w kodzie źródłowym 3. Jednakże, przed usunięciem zmiennej name, dodamy na jej bazie zmodyfikowaną wersję - zmienną initial, która odpowiada tytułowi danej osoby ("Mr.", "Mrs." itd.), jednakże grupujemy tą zmienną na 5 kategorii: "Master", "Miss", "Mr", "Mrs" i "Other". Zmienną initial wykorzystamy tylko i wyłącznie w celu trafniejszemu przypisaniu wartości brakujących zmiennej age, a później ją usuniemy.

Kod źródłowy 3: Usuwanie niepotrzebnych zmiennych z modelu

1.2.2 Przypisanie typów zmiennych

Przed uzupełnieniem wartości brakujących, musimy przypisać zmiennym age i fare typ numeryczny. Zrobimy to za pomocą funkcji pandas.to_numeric().

```
df_titanic['age'] = df_titanic['age'].dropna().str.replace(",", ".")
df_titanic['fare'] = df_titanic['fare'].dropna().str.replace(",", ".")
df_titanic[['age', 'fare']] = df_titanic[['age', 'fare']].apply(pd.
to_numeric)
```

Kod źródłowy 4: Przypisanie typu zmiennym ilościowym

1.2.3 Wypełnianie brakujących wartości

Jeśli chodzi o brakujące wartości zmiennych age, fare oraz embarked, wypełnimy brakujące wartości w następujący sposób:

- przy zmiennej jakościowej **embarked**, wartości brakujące zastąpimy najczęściej występującą wartością, czyli "S"
- jedną brakującą wartość zmiennej ilościowej fare zastąpimy średnią z postałych wartości
- w zmiennej **age** wartości brakujące zastąpimy średnimi wartościami dla danej grupy zmiennej initial

Na samym końcu usuwamy niepotrzebną już nam zmienną initial.

Kod źródłowy 5: Przypisanie typu zmiennym ilościowym

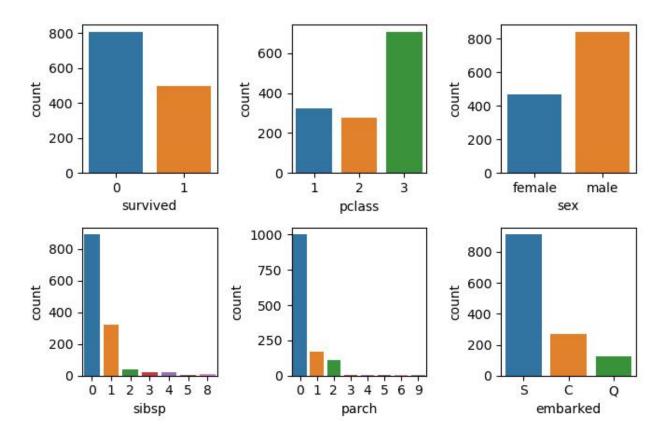
Ostatecznie w naszym modelu zostało 7 zmiennych objaśniających: 5 jakościowych i 2 ilościowe oraz jakościowa zmienna objaśniana survived.

Tabela	Tabela 3. I lei wsze 3 wierszy zbioru danych Titanic po modynkacjach										
survived	pclass	sex	age	sibsp	parch	fare	embarked				
1	1	female	29	0	0	211,3375	S				
1	1	male	0,9167	1	2	151,5500	S				
0	1	female	2	1	2	151,5500	S				
0	1	male	30	1	2	151,5500	S				
0	1	female	25	1	2	151 5500	\mathbf{S}				

Tabela 3: Pierwsze 5 wierszy zbioru danych Titanic po modyfikacjach

1.3 Wizualizacja danych

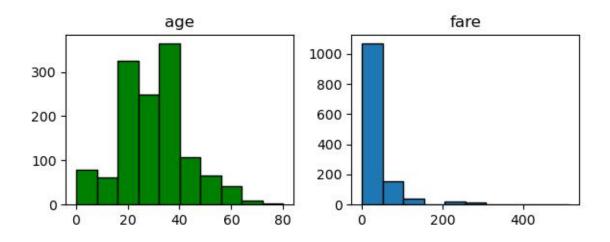
W tym podrozdziale przeprowadzona zostanie wizualizacja danych. Na początku, zaprezentujemy wykresy słupkowe dla zmiennych jakościowych, które przedstawią częstości występowania poszczególnych kategorii dla każdej zmiennej typu factor. Zrobimy to za pomocą funkcji countplot [1] z pakietu seaborn, a wyniki przedstawione są na rysunku 1.



Rysunek 1: Częstotliwości występowania zmiennych jakościowych

Jak widzimy powyżej, rozkłady kategorii poszczególnych cech jakościowych oczywiście różnią się od siebie. Możemy rozróżnić trzy dwuelementowe grupy: zmienne survived i sex, mające po 2 kategorie, mają najbardziej równomierne rozkłady, ale wciąż z wyraźną przewagą występowania jednej kategorii: wartość 0 dla zmiennej survived oraz male dla zmiennej sex - kategorie te to około 60% wszystkich wartości odpowiednich zmiennych. Następnie, zmienne pclass i embarked, mające po 3 kategorie, mają jedną wartość występującą dużo częściej od pozostałych: pclass=3 i embarked=S. Natomiast zmienne sibsp i parch mają więcej kategorii - odpowiednio 7 i 8. Również i w wypadku tych zmiennych widzimy jedną wartość wyraźnie dominującą jeśli chodzi o częstotliwość występowania, jest to 0 dla obu tych zmiennych.

Poniżej przedstawione zostały histogramy dla zmiennych numerycznych. Stworzone zostały za pomocą metody .hist() [2] dla obiektu klasy **matplotlib.Axis**. Rezultaty przedstawione zostały na rysunku 2.

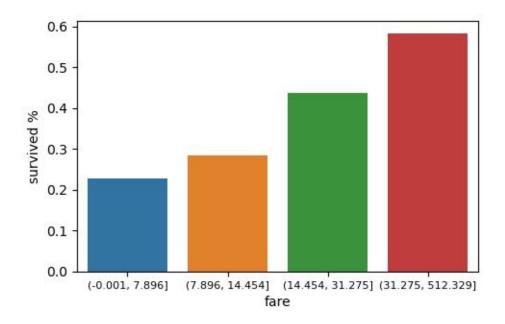


Rysunek 2: Histogramy dla zmiennych ilościowych

Jak możemy zaobserwować powyżej, zmienne age i fare mają różnie wyglądające rozkłady wartości. Jeśli chodzi o wiek ludzi, zdecydowanie najwięcej pasażerów było w wieku 16-40 lat, a ogólniej rozkład wartości przypomina rozkład normalny ze średnią w okolicach 30 lat. Natomiast w przypadku zmiennej fare, czyli opłacie za bilet, zdecydowanie najwięcej wartości jest z zakresu 0-50, a rozkład wartości swoim kształtem przypomina nieco rozkład eksponencjalny.

Poniżej zaproponowane zostało porównanie wartości zmiennej objaśnianej survived w zależności od zmiennej numerycznej fare. W tym celu podzieliliśmy wartości tej zmiennej na 4 przedziały, tak aby w każdym z nich znajdowało się tyle samo wartości z naszego zbioru danych. W tym celu użyliśmy metody qcut [3] z pakietu **pandas**:

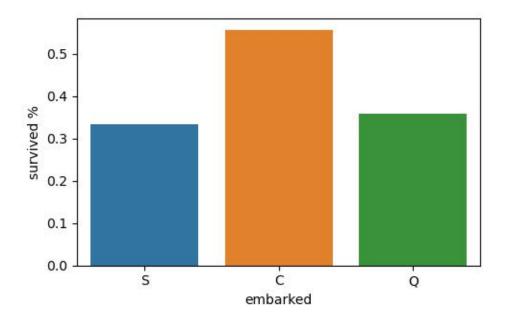
Poniżej, na rysunku 3 zilustrowane zostało porównanie odsetku ocalałych ludzi dla zmiennej fare, podzielonej na 4 przedziały.



Rysunek 3: Wskaźniki przeżywalności dla poszczególnych przedziałów zmiennej fare (ceny biletu

Wyraźnie widzimy z powyższego wykresu następującą tendencję: za większymi opłatami za bilety idzie większa średnia wartości zmiennej survived, czyli po prostu większy odsetek ocalałych pasażerów. Możemy uzasadnić to tym, że większe ceny biletów przeważnie były równoważne z miejscami w wyższych klasach. Dla przedziału z największymi wartościami zmiennej fare odsetek ten jest równy prawie 60%. Kolejne grupy zmiennej fare, zaczynając od największych wartości mają odpowiednio 45%, 30% i 25%.

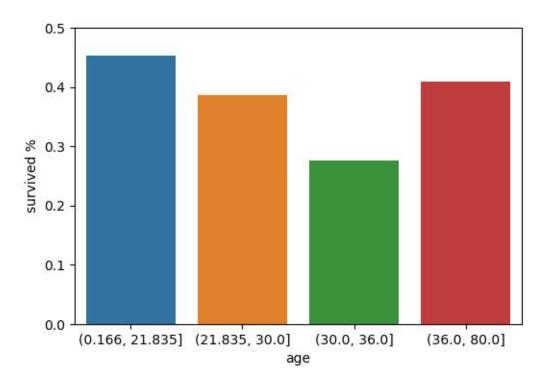
Poniżej, na rysunku 4 przedstawione zostało porównanie średnich wartości zmiennej survived w zależności od zmiennej jakościowej embarked informującej o porcie w którym wsiadł każdy pasażer.



Rysunek 4: Wskaźniki przeżywalności dla poszczególnych kategorii zmiennej embarked

Przypomnijmy, embarked=S oznacza Souhampton, czyli angielski port z którego wyruszył titanic. Następnie miał przystanek we francuskim porcie Cherbourg (embarked=C), aby potem skierować się do irlandzkiego miasta nadmorskiego Queenstown (embarked=Q), dzisiejszego Cobh, skąd wypłynął dalej na zachód w kierunku Nowego Jorku, który był końcowym celem podróży transatlantyku. Jak możemy zauważyć, jeśli chodzi o pasażerów, którzy wsiedli w Souhampton i Queenstown, współczyniki przezywalności są bardzo zbliżone do siebie i są równe w przybliżeniu 35%. Ciekawy jest fakt, że odsetek pasażerów którzy przeżyli, z tych którzy wsiedli we francuskim Cherbourg jest znacząco większy - ponad połowa takich osób przeżyła katastrofę. Nie wiemy do końca czym to jest spowodowane, być może ludzie, którzy weszli na pokład we Francji, byli statystycznie wyższej klasy społecznej, przez co w jakiś sposób bardziej uprzywilejowani przy ewakuacji z podkładu tonącego statku. Niezależnie od powodów ciężko uznać różnicę między portem francuskim, a pozostałymi dwoma za kompletnie nieistotną.

Natomiast na rysunku 5 poniżej przedstawiony jest wykres słupkowy ilustrujący jaki procent ludzi przetrwało katastrofę statku, w zależności od wieku danej osoby. I znowu, dzielimy zmienną numeryczną age na 4 grupy (przedziały) za pomocą metody qcut(), tak aby do każdej z nich należało tyle samo obserwacji, podobnie jak wcześniej zrobiliśmy to ze zmienną fare. Następnie obliczamy średnią zmiennej survived dla każdej z 4 grup.

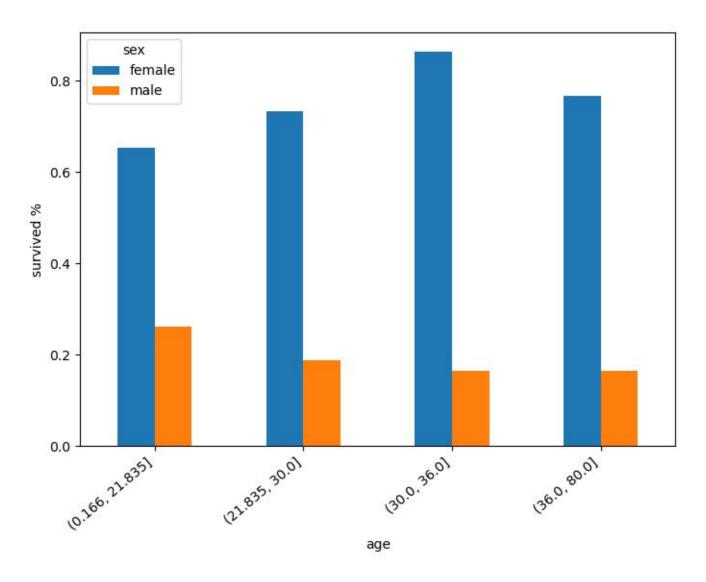


Rysunek 5: Histogramy dla zmiennych ilościowych

Z powyższego rysunku wynika, że nie można określić jednoznacznej tendencji między wiekiem, a odsetkiem ludzi, którzy przeżyli wypadek statku. Widzimy jednak, że największą średnią wartość zmiennej survived mają dzieci i młodzież - przedział wiekowy od 0 do 22 lat oraz najstarsza grupa w przedziale wiekowym od 36 do 80 lat. Jest to dość zrozumiałe, ponieważ podczas akcji ratunkowej to właśnie dzieci oraz osoby starsze miały większy priorytet do szalup ratunkowych. Widzimy, że trzecią w kolejności grupą jest przedział między 22, a 30 rokiem życia, i różnice między tymi 3 grupami nie są znaczące - wartości te są w przybliżeniu między 38%, a 45%. Nieco większa różnica jest między wspomnianymi przedziałami wiekowymi,

a ostatnim - między 30, a 36 rokiem życia, dla którego odsetek uratowanych jest na poziomie mniej więcej 27%, czyli w dalszym ciągu nie jest to kolosalna różnica między tym, a pozostałymi przedziałami wiekowymi.

Być może więcej powie nam wykres, w którym oprócz wieku, jednocześnie weźmiemy pod uwagę również płeć pasażera. Każdą z 4 grup wiekowych podzielimy na 2 podgrupy wg. płci, a następnie obliczymy jaki odsetek tych pasażerów się uratowało. Wyniki opisanych wyżej operacji przedstawione zostały na rysunku 6.

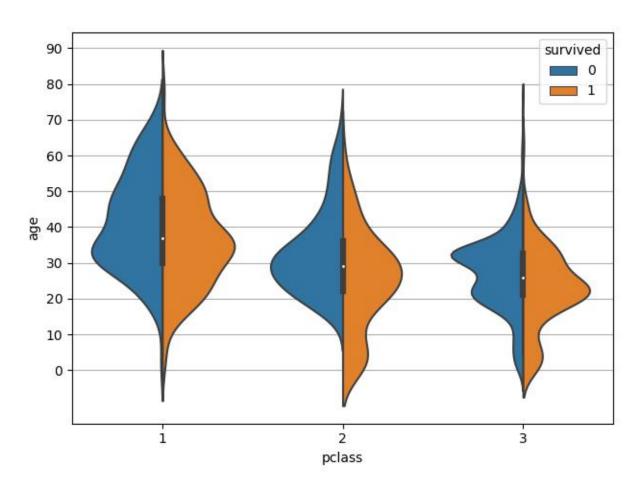


Rysunek 6: Częstotliwości występowania zmiennych jakościowych

Z powyższego rysunku jasno wynika, że niezależnie od grupy wiekowej kobiety miały dużo większą przeżywalność, co jest logiczne, bo kobiety miały pierwszeństwo przy umieszczaniu ludzi na łodzie ratunkowe podczas ucieczki z tonącego statku. Najmniejszą dysproporcję między płciami możemy odnotować najmłodszej grupie wiekowej, co może być wynikiem tego, że oprócz kobiet, pierwszeństwo w ratowaniu miały dzieci, w przypadku których płeć była najmniej istotna ze wszystkich grup wiekowych. Jednakże wciąż jest to ponad 2 większy odsetek uratowanych kobiet niż mężczyzn. Skupiając się jedynie na płci męskiej, widzimy jasno tendencję, że wraz ze wzrostem wieku spada odsetek uratowanych. Natomiast sytuacja wygląda dużo ciekawiej w przypadku kobiet, gdzie w najmłodszej grupie było najmniej uratowanych osób,

a największy odsetek kobiet, które przeżyły jest w grupie wiekowej 30-36 lat. Takie wartości mogą być spowodowane tym, że jak już wspomnieliśmy wcześniej, wszystkie kobiety, niezależnie od wieku, miały pierwszeństwo przy ewakuacji, a różnice przypuszczalnie mogą wynikać np. z siły danej osoby czy przytomności umysłu, co trochę faworyzuje kobiety w sile wieku.

Kolejnym pomysłem na wizualizacje danych będzie wykres skrzypcowy [4]. Jest to ciekawy, ale rzadko spotykany rodzaj wykresu, który pozwala zilustrować porównanie rozkładów zmiennej ilościowej, przy podziale na kilka grup (np. dwie zmienne jakościowe) jednocześnie. W naszym przypadku zobrazujemy rozkład zmiennej numerycznej age przy podziale na kategorie zmiennej pclass, zaznaczone na osi poziomej. Dodatkowo, każda kategoria zmiennej pclass będzie dodatkowo podzielona na grupy, ze względu na wartości zmiennej survived. Wykres ten wykonany został przy pomocy funkcji violinplot [5] z biblioteki seaborn, a wyniki przedstawione są poniżej na rysunku 7.



Rysunek 7: Histogramy dla zmiennych ilościowych

Z powyższego wykresu możemy wyciągnąć kilka wniosków:

- Jedyne dzieci do lat 10, które nie przeżyły katastrofy miały bilety trzeciej klasy.
- Zauważyliśmy wcześniej z rysunku 2, że dla całego zbioru danych, większość wartości zmiennej age znajduje się w przedziale 16-40 lat. Widzimy, że dla biletów drugiej i trzeciej klasy jest podobnie, jednakże dla biletów pierwszej klasy, większość ludzi jest w przedziale 25-60 lat.

Ogólnie można zaobserwować tendencję, że rozkłady dla poszczególnych klas, dla wartości survived=1 są bardziej skupione niż dla wartości survived=0 w przypadku mniejszych wartości zmiennej age, a mniej skupione w przypadku większych wartości zmiennej age, czyli dla starszych ludzi.

Na końcu zajmiemy się ostatnimi zmiennymi objaśniającymi, które nie były dotychczas przez nas wykorzystane - parch i sibsp. Przy pomocy metody crosstab() [6] z pakietu pandas zostały stworzone dwie tabele krzyżowe. Jedna dla pary parch i survived, a druga dla pary sibsp i survived. Wyniki zostały przedstawione odpowiednio w tabelach 4 i 5.

Tabela 4: Tabela krzyżowa dla zmiennych survived i parch

parch	0	1	2	3	4	5	6	9
survived								
0	666	70	56	3	5	5	2	2
1	336	100	57	5	1	1	0	0

Tabela 5: Tabela krzyżowa dla zmiennych survived i sibsp

•	J. 1000010	J				, ~		
	sibsp	0	1	2	3	4	5	8
	survived							
	0	582	156	23	14	19	6	9
	1	309	163	19	6	3	0	0

Wyniki w przypadku obu zmiennych prezentują się bardzo podobnie. Widzimy, że zarówno w przypadku zmiennej parch, jak i sibsp dla wartości **0**, ok. 1/3 ludzi przeżyło katastrofę, dla wartości **1** i **2**, ok. połowa ludzi przeżyło, a dla wartości większych niż **2**, odsetek uratowanych ludzi z powrotem spada.

2 Metody uczenia zespołowego

2.1 Ogólna idea

Uczenie zespołowe (ang. ensemble learning) to technika w dziale uczenia maszynowego, która polega na stworzenie wielu pojedynczych, elementarnych modeli (ang. weak learners) w celu połączenia ich i stworzenia jednego, końcowego modelu predykcyjnego (ang. strong learner), który byłby lepszy. W przypadku klasyfikacji, najpowszechniejszą metodą łączenia pojedynczych klasyfikatorów jest głosowanie, która polega na tym, że każdy podstawowy model osobno przewiduje wartość zmiennej jakościowej, a potem prognozę, która wystąpiła najwięcej razy, traktujemy jako ostateczną predykcję modelu.

2.2 Pojedynczy klasyfikator - drzewo decyzyjne

Metody uczenia zespołowego mogą być aplikowane na praktycznie każdym podstawowym klasyfikatorze, jednakże zdecydowanie najpowszechniejsze jest drzewo decyzyjne [7] (ang. decision tree), które będzie także naszym wyborem. Najważniejszymi parametrami drzewa decyzyjnego są:

- max depths parametr określający maksymalną głębokość drzewa. Im większa ta wartość, tym bardziej złożone drzewo powstanie. Wartość ta nie może być zbyt mała, ponieważ wtedy drzewo może mieć zbyt małą elastyczność żeby uchwycić wzorce i potencjalne interakcje w zbiorze treningowym. Jednakże jeśli ustawimy zbyt dużą wartość tego parametru, wtedy istnieje ryzyko, że nastąpi przeuczenie modelu do zbioru treningowego, co również będzie wiązało się ze wzrostem błędu na zbiorze testowym.
- min samples split parametr, który określa ile przynajmniej obserwacji musi znajdować się w węźle, aby móc go podzielić.
- min samples leaf minimalna liczba określająca węzeł, którego nie chcemy dalej dzielić (ang. leaf node).

2.3 Bagging

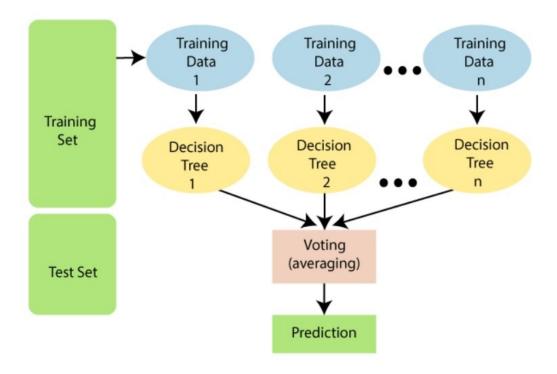
Bagging [8] (Bootstrap aggregating), to prawdopodobnie najpopularniejsza technika uczenia zespołowego należąca do grupy równoległych metod zespołowych, które przede wszystkim wykorzystują niezależność między podstawowymi klasyfikatorami, co pozwala zmniejszyć błąd poprzez uśrednienie. Warto dodać, że w przypadku, gdy podstawowym klasyfikatorem jest drzewo decyzyjne, to w przypadku bagging'u często mówimy o tzw. bagged trees.

Na początku warto wyjaśnić czym jest próba bootstrap [9]. Jest to po prostu losowanie ze zwracaniem n obserwacji ze zbioru wszystkich obserwacji, który ma n elementów. Innymi słowy obserwacje mogą się powtarzać w próbce, ale także możliwe (wręcz prawie pewne) jest, że niektóre obserwacje zostaną pominięte. Oczywiście parametrem, który przeważnie możemy modyfikować jest B - liczba boostrapowych prób, które chcemy losować.

Dysponując B bootstrapowymi próbami, dla każdej z nich dopasowujemy nasze drzewo decyzyjne, a następnie dysponując B drzewami, możemy interpretować kategorię zwracaną przez każde z nich jak "oddany głos", a następnie kategoria która otrzyma najwięcej (tzw. soft-voting) albo większość, czyli ponad połowę (tzw. hard-voting) głosów jest zwracana przez model zespołowy jako ostateczna prognoza.

2.4 Random forest

Random forest (las losowy) [10] to szczególny przykład metody bagged trees. Polega na tym samym co metoda bagged trees, ale dodatkowo przy każdym losowaniu próby bootstrap, losowany jest także podzbiór cech wykorzystywanych przy tworzeniu danego pojedynczego drzewa decyzyjnego. Ile zmiennych jest losowanych? Otóż jeśli p to liczba wszystkich zmiennych, to oczywiście można wybrać jakąkolwiek liczbę mniejszą od p, jednakże przyjmuje się, że odpowiednimi wartościami są \sqrt{p} dla problemu klasyfikacji oraz p/3 dla regresji. Na rysunku 8 pokazany jest zwizuwalizowany schemat działania techniki random forest.



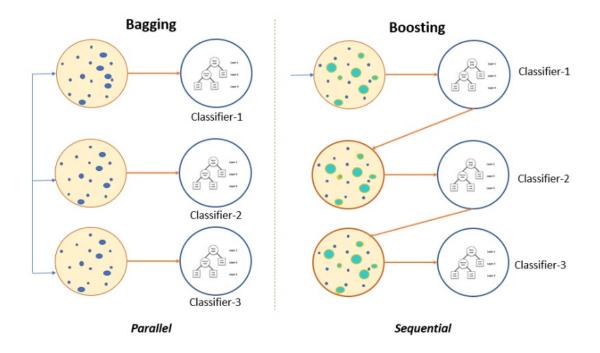
Rysunek 8: Schemat działania metody random forest

2.5 Boosting

Boosting (wzmacnianie) [11] to rodzina algorytmów w uczeniu maszynowym, które konwertują klasyfikatory słabe (ang. weak learners) w klasyfiktory mocne (ang. strong learners). Przez kolejne iteracje, algorytm stara się wykorzystywać informacje o podstawowym klasyfikatorze przy tworzeniu końcowego klasyfikatora. Boosting może być postrzegane jako uogólnienie metody bagging.

Większość algorytmów wzmacniania polega na iteracyjnym uczeniu się słabych klasyfikatorów z uwzględnieniem rozkładu i dodawaniu ich do ostatecznego silnego klasyfikatora. Po dodaniu słabego klasyfikatora, wagi poszczególnych obserwacji z naszych danych są ponownie dostosowywane, proces ten nazywamy ponownym ważeniem (tzw. resampling [12]). Błędnie sklasyfikowane dane wejściowe zyskują większą wagę, a przykłady, które zostały poprawnie sklasyfikowane, tracą na wadze. Tak więc przyszłe słabe klasyfikatory skupiają się bardziej (tzn. jest większe prawdopodobieństwo, że zostaną wylosowane do próby bootstrapowej), na tych obserwacjach, które zostały przez poprzednie słabe klasyfikatory błędnie sklasyfikowane.

Poniżej na rysunku 9 przedstawione zostało porównanie przedstawiające różnice między metodami bagging i boosting. Warto zwrócić uwagę na fakt, że bagging jest przykładem równologłej metody zespołowej, natomiast boosting jest metodą sekwencyjną.



Rysunek 9: Różnica działania metod bagging i boosting

Pierwszym głośnym algorytmem boosting'u był AdaBoost [13] zaproponowany przez Roberta Shapire'a i Yoav Freunda w 1995r. [14] Algorytm ten był przeznaczony tylko i wyłącznie do klasyfikacji binarnej. Rozszerzeniem tego algorytmu na problemy klasyfikacji wieloklasowej jest algorytm AdaBoost.M1, zaproponowany przez Roberta Shapire'a i Yoav Freunda w 1996r. [15] Poniżej przedstawiony jest schemat działania algorytmu AdaBoost.M1:

- 1. Ustal początkowe wagi przypadków $\mathbf{w}^{(1)} = \left(w_1^{(1)}, w_2^{(1)}, ..., w_n^{(1)}\right)'$, gdzie $w_j^{(1)} \in [0, 1]$ oraz $\sum_{i=1}^n w_i^{(1)} = 1$. Zazwyczaj przyjmuje się, że $w_j^{(1)} = 1/n$.
- 2. Dla b = 1, 2, ..., B:
 - (a) wyznacz próbę bootstrapową \mathcal{L}_n^{*b} na bazie \mathcal{L}_n , przyjmując $P((x_j,g_j)\in\mathcal{L}_n^{*b})=w_j^{(b)}$ $(x_j$ -zmienne objaśniające, g_j zmienna objaśniana),
 - (b) skonstruuj klasyfikator \hat{d}_b na podstawie próby bootstrapowej \mathcal{L}_n^{*b} ,
 - (c) wyznacz ważony błąd klasyfikacji

$$\hat{e}_b = \sum_{i=1}^n w_i^{(b)} I_i^{(b)}, \text{ gdzie } I_i^{(b)} = \begin{cases} 1 & \hat{d}_b(x_i) \neq g_i \\ 0 & \hat{d}_b(x_i) = g_i \end{cases}$$

- (d) jeżeli $\hat{e}_b \in (0, 1/2)$ oblicz $\beta_b = \frac{\hat{e}_b}{1 \hat{e}_b}$. W przeciwnym wypadku przyjmij $w_i^{(b)} = 1/n$ i wróć do kroku a),
- (e) aktualizuj wagi $w_j^{(b+1)} = \frac{w_j^{(b)} \beta_b^{1-I_j^{(b)}}}{\sum_{i=1}^n w_i^{(b)} U_j^{1-I_j^{(b)}}}, j = 1, 2, ..., n.$
- 3. Wyznacz końcowy klasyfikator

$$\hat{d}_{AdaBoost}(\mathbf{x}) = \underset{1 \le k \le K}{\operatorname{argmax}} \sum_{b=1}^{B} \left[ln\left(\frac{1}{\beta_b}\right) \mathbb{1}\left(\hat{d}_b(\mathbf{x}) = k\right) \right]$$

Jak możemy zauważyć powyżej, poprzez iteracyjne aktualizowanie wag, w odróżnieniu od metody bagging, klasyfikatory składowe w **AdaBoost** nie są tworzone niezależnie od siebie: aktualny klasyfikator zależy od klasyfikatorów w poprzednich krokach. Widzimy też, że klasyfikatory składowe otrzymują wagi równe $ln\left(\frac{1}{\beta_b}\right)$, tzn. przy konstrukcji klasyfikatora złożonego za pomocą głosowania dajemy większą wagę dokładniejszym klasyfikatorom. Przypadki $\{w_i^{(b)}\}_{i=1,\dots,n}$ uwzględniane są w b-tej iteracji za pomocą losowania n obserwacji ze zwracaniem, z prawdopodobieństwem proporcjonalnym do ich wag, czyli jest to przykład ponownego ważenia.

3 Klasyfikacja zmiennej objaśnianej

3.1 Opis symulacji

Na początku wybrane zostało 9 wariantów opisanych wyżej metod:

- pojedyncze drzewo decyzyjne
- bagged trees z 25 bootstrapowymi replikacjami
- bagged trees ze 150 bootstrapowymi replikacjami
- random forest z 25 bootstrapowymi replikacjami oraz podzbiorem 3 losowych cech
- random forest ze 150 bootstrapowymi replikacjami oraz podzbiorem 3 losowych cech
- boosting z 25 iteracjami
- boosting ze 150 iteracjami
- boosting z 25 iteracjami oraz aktualizacją wag zaproponowaną przez Leo Breimana
- boosting ze 150 iteracjami oraz aktualizacją wag zaproponowaną przez Leo Breimana

Dodajmy, że w ostatnich dwóch metodach wagi zaproponowane przez Breimana różnią nieznacznie (przemnożone o stałą) względem tego co zaproponował Freund. Więcej o tych różnicach można przeczytać tutaj [16].

Symulacja polegała na obliczeniu dokładności, czułości oraz swoistości [17] każdej z wyżej wymienionych metod. Losowany był zbiór uczący o wielkości 70% wszystkich obserwacji, a reszta trafiła do zbioru testowego. Na podstawie zbioru uczącego skonstruowane zostały klasyfikatory złożone (oraz prosty w przypadku drzewa decyzyjnego), a następnie na zbiorze testowym obliczyliśmy dokładność, czułość oraz swoistość. Wszystkie te operacje powtórzyliśmy 100 razy, oczywiście gromadząc wyniki.

3.2 Sposoby implementacji

Cała symulacja została przeprowadzona w **R**, ponieważ w języku **Python** w pakiecie **scikitlearn** nie istnieje sposób, żeby uwzględnić zmienne jakościowe bez potrzeby kodowania.

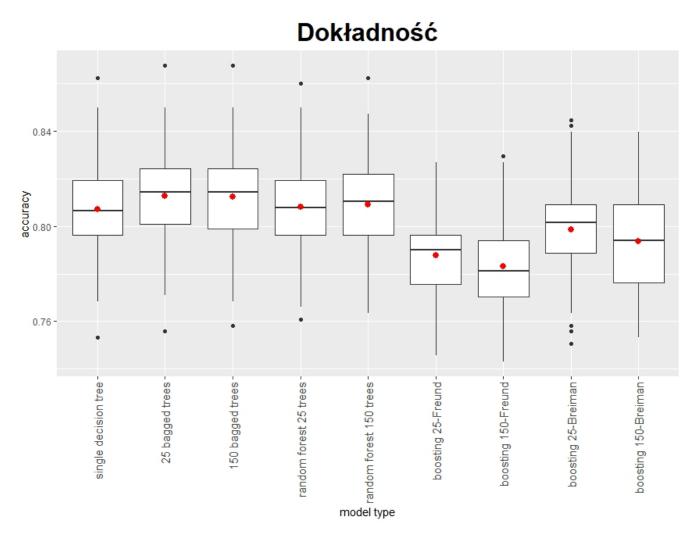
Podstawowy klasyfikator, czyli drzewo decyzyjne zostało zaimplementowane za pomocą funkcji rpart() z pakietu rpart, z ustalonym parametrem minsplit= 2. Wartość ta została wybrana specjalnie tak mała, żeby drzewo było bardziej złożone i potencjalnie zwiększyć niestabilność tej metody. Metoda bagged trees została zaimplementowana za pomocą funkcji

bagging() z pakietu **ipred**, również z ustalonym parametrem minsplit= 2, tylko tym razem za pomocą funkcji rpart.control(). Metoda random forest została wdrożona za pomocą funkcji randomForest() z pakietu randomForest. Ustawiliśmy parametr kontrolujący minimalną liczbę węzłów końcowych nodesize= 5. Metoda boosting została zaimplementowana za pomocą funkcji boosting() z pakietu adabag. Funkcja ta używa algorytmu AdaBoost.M1 z wykorzystaniem drzewa decyzyjnego jako pojedynczego klasyfikatora do obliczenia złożonego klasyfikatora. I tutaj również ustaliliśmy parametr minsplit= 2.

3.3 Wyniki

Tak jak wspomnieliśmy wcześniej, zostało zebranych po 100 wartości liczbowych dokładności, czułości i swoistości dla każdej z 9 metod, które były rozpatrywane.

Na początek zajmiemy się dokładnością, która jest prawdopodobnie najpowszechniejszą i najwięcej mówiącą miarą oceny klasyfikacji. Jest to stosunek poprawnie zaklasyfikowanych obiektów do wszystkich obserwacji. Na rysunku 10 zaprezentowane zostały wykresy pudełkowe przedstawiające dokładności dla wszystkich opracowanych metod. Do wykresów zostały dodane wartości średnie dla każdej metody, które zostały oznaczone czerwonymi kropkami.

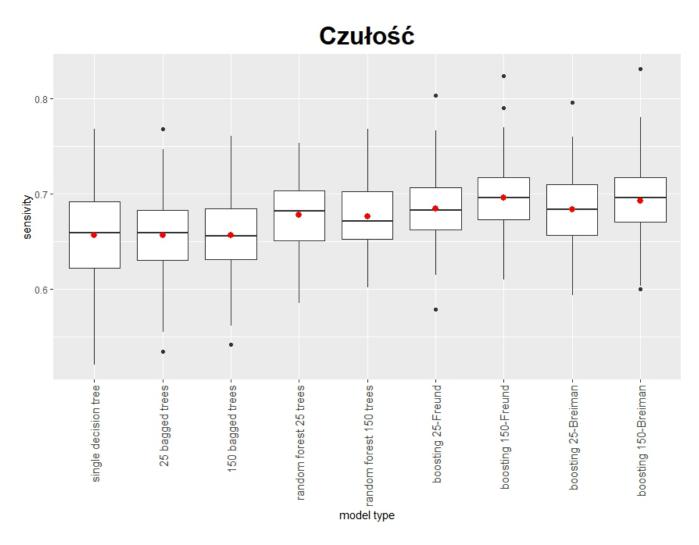


Rysunek 10: Porównanie dokładności drzewa decyzyjnego oraz metod uczenia zespołowego dla zbioru danych Titanic

Najważniejszą rzeczą jaką widzimy z powyższego wykresu widzimy jest to, że żadna z metod uczenia zespołowego zaimplementowana na naszym zbiorze danych nie poprawiła znacząco dokładności względem podstawowego modelu - drzewa decyzyjnego, którego średnia dokładność to ok. 0.81. Przyczyn tego może być kilka, ale najbardziej prawdopodobna jest taka, że nasz zbiór danych jest zbyt mało skomplikowany, tym samym klasyfikacja zmiennej survived to problem o niewystarczającej złożoności. Rozumiemy przez to, że problem jest stosunkowo zbyt prosty, przez co pojedyncze drzewo klasyfikacyjne jest w stanie na tyle dobrze go uchwycić, że wprowadzenie modeli zespołowych nie przynosi poprawy. Co więcej, widzimy, że wszystkie 4 warianty boosting'u nawet pogorszyły średnią dokładność. Najlepsze wyniki jeśli

chodzi o dokładność, ale tylko nieznacznie, uzyskała metoda bagged trees, ale również jest to średnio tylko ok. 0.82, a najgorzej poradziły sobie warianty boosting'u z aktualizacjami wag od Freunda ze średnimi na poziomie ok. 0.785. Widzimy, że w przypadku bagging'u i random forest liczba bootstrapowych próbek nie miała dużego znaczenia dla ewentualnej poprawy rezultatów, natomiast w przypadku obu wariantów boosting'u większa liczba iteracji miała nawet negatywny wpływ na średnią dokładność. Jeśli chodzi o rozrzuty wyników, to nie obserwujemy większych różnic, poza boosting'iem ze 150 iteracjami z aktualizacją wag Breimana, gdzie wyniki mają dużo większy rozstęp międzykwartylowy.

Na rysunku 11 poniżej przedstawione zostały wykresy pudełkowe dla czułości. Dodano także wartości średnie dla każdej metody, oznaczone czerwonymi kropkami. Przypomnijmy, że czułość (ang. sensitivity) to stosunek poprawnie zaklasyfikowanych pozytywnych przypadków do wszystkich rzeczywistych pozytywnych przypadków. Jednakże w klasycznych testach np. w medycynie czy w finansach "pozytywny" lub "dodatni" wynik testu oznacza coś negatywnego np. występowanie choroby u pacjenta czy niewypłacalność klienta, a w naszym przypadku "pozytywny" przypadek (survived= 1) oznacza coś pozytywnego w istocie, bo przeżycie katastrofy przez daną osobę.

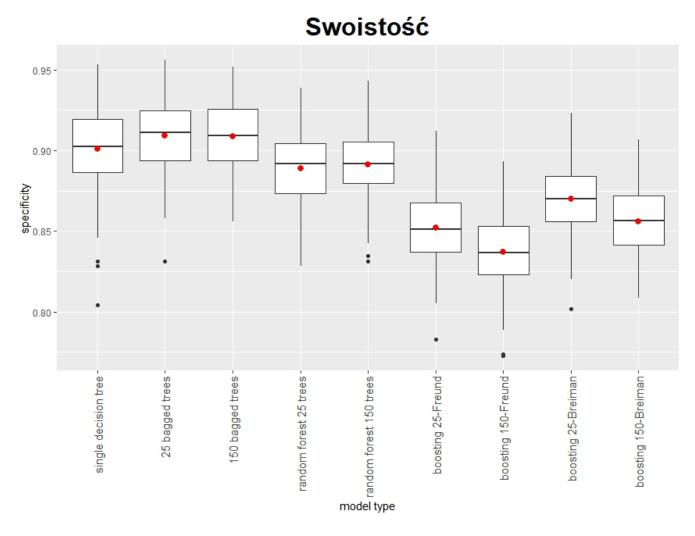


Rysunek 11: Porównanie czułości drzewa decyzyjnego oraz metod uczenia zespołowego dla zbioru danych Titanic

Jak obserwujemy powyżej, jeśli chodzi o czułość to wartość średnia równa w przybliżeniu

0.61 dla drzewa decyzyjnego jest najmniejsza i reszta metod ma średnie czułości na podobnym poziomie (bagged trees) lub na lepszym (random forest - ok. 0.66 i boosting 0.67-0.7). Najlepsze wyniki czułości uzyskały oba warianty boosting'u ze 150 iteracjami. Widzimy, że w przypadku metod bagged trees i random forest liczba próbek bootstrapowych nie miała znaczenia dla średnich wartości czułości, natomiast w przypadku boosting'u wraz z większą liczbą iteracji wystąpił nieznaczny wzrost średniej. Ponadto, rodzaj aktualizacji wag w boosting'u nie miał praktycznie żadnego znaczenia dla wartości czułości. Patrząc na rozrzuty rezultatów, możemy stwierdzić, że zdecydowanie największy rozstęp międzykwartylowy miało drzewo decyzyjne.

Rysunek 12 poniżej przedstawia wykresy pudełkowe swoistości, czerwonymi kropkami zaznaczono wartości średnie dla odopowiednich wariantów metod. Warto przypomnieć, że swoistość (ang. specificity) to stosunek obserwacji poprawnie zaklasyfikowanych jako negatywne do wszystkich obserwacji, które faktycznie były negatywne (survived= 0).



Rysunek 12: Porównanie swoistości drzewa decyzyjnego oraz metod uczenia zespołowego dla zbioru danych Titanic

Jak możemy zaobserwować powyżej, wartości swoistości są dużo większe od czułości, co mówi nam, że wszystkie zaproponowane modele dużo lepiej poradziły sobie z wykryciem kategorii survived= 0, czyli pasażerów, którzy nie przeżyli katastrofy. Widzimy, że drzewo decyzyjne uzyskało bardzo dobry średni wynik ok. 0.9 i tylko oba modele bagged trees uzyskały

lepszy średni rezultat na poziomie ok. 0.91. Najgorzej natomiast poradziły sobie algorytmy boosting'u, w szczególności te z aktualizacją wag Freunda z najmniejszym średnim wynikiem ok. 0.83. Ponadto widzimy, że wyniki dla boosting'u są gorsze dla większej liczby iteracji algorytmu.

4 Podsumowanie

Głównym celem powyższej pracy było przedstawienie najpopularniejszych metod uczenia zespołowego, implementacja ich na wybranym przez nas zbiorze danych Titanic, a następnie sprawdzenie jaki wpływ będą mieć na wyniki klasyfikacji. Zanim to jednak nastąpiło, w rozdziale 1 przeprowadziliśmy analizę eksploracyjną obejmującą przygotowanie danych do analizy czyli potrzebne transformacje - oraz analizę poszczególnych zmiennych, zarówno wizualną, jak i formalną. Następnie opisaliśmy krótko wybrane przez nas techniki uczenia zespołowego, a na końcu przeprowadziliśmy symulacje w której sprawdziliśmy ich wpływ na dokładność klasyfikacji zmiennej objaśnianej survived.

Po wykonaniu symulacji i analizie wyników okazało się, że metody uczenia zespołowego nie przyniosły praktycznie żadnego efektu jeśli chodzi o poprawę dokładności. Niektóre z nich zwróciły rezultaty bardzo przybliżone, a niektóre z nich (boosting) nawet gorsze. Przypuszczalnie wybrany zbiór danych w naszym przypadku był zbyt mało skomplikowany, co sprawiło, że klasyfikacja była na tyle prosta, że pojedynczy podstawowy klasyfikator - czyli drzewo decyzyjne - był modelem wystarczającym, aby odpowiednio uchwycić ten problem. Być może wystąpiła także niewystarczająca różnorodność w bazowych modelach. W przypadku, gdy modele składowe są zbyt podobne i mają podobne wady, połączenie ich nie musi prowadzić nas do poprawy dokładności. Przyczyn tego, dlaczego w naszym przypadku metody zespołowe nie przyniosły pożądanego skutku, może być dużo. Warto jednak zwrócić uwagę na fakt, że poradziły one sobie lepiej przy pomiarach czułości (czyli przy wykrywaniu kategorii survived= 1) niż pojedyncze drzewo klasyfikacyjne.

Ostatecznym wnioskiem powinno być to, żeby nie używać metod uczenia zespołowego bez jakiegokolwiek zastanowienia, licząc na poprawę wyników klasyfikacji, ponieważ nie w każdej sytuacji otrzymamy oczekiwane rezultaty. Przede wszystkim, trzeba przeanalizować czy wybrany bazowy klasyfikator nie jest dla nas wystarczający, żeby poradzić sobie z analizowanym problemem i zwrócić zadowalające wyniki. Natomiast jeśli zdecydujemy się, że podstawowy klasyfikator to za mało, to przy dzisiejszej mnogości różnych technik i metod z zakresu uczenia zespołowego, a także tego, ile w każdej z tych metod trzeba dostroić różnych parametrów, należy się zastanowić i spróbować wielu różnych potencjalnych rozwiązań w pogoni za oczekiwaną poprawą wyników.

Literatura

- [1] https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.countplot.html
- [2] https://matplotlib.org/stable/api/_as_gen/matplotlib.axes.Axes.hist.html
- [3] https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.qcut.html
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Violin_plot
- [5] https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.violinplot.html

- [6] https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.crosstab.html
- [7] https://pl.wikipedia.org/wiki/Drzewo_decyzyjne
- [8] https://en.wikipedia.org/wiki/Bootstrap_aggregating
- [9] https://pl.wikipedia.org/wiki/Bootstrap_(statystyka)
- [10] https://pl.wikipedia.org/wiki/Las_losowy
- [11] https://en.wikipedia.org/wiki/Boosting_(machine_learning)
- [12] https://en.wikipedia.org/wiki/Sample-rate_conversion
- [13] https://en.wikipedia.org/wiki/AdaBoost
- [14] Freund, Yoav; Schapire, Robert E. (1995), A desicion-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting, Lecture Notes in Computer Science, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, pp. 23–37
- [15] Freund, Y.; Schapire, R.E., et al., (1996), Experiments with a new boosting algorithm. In: Icml, Vol. 96. Citeseer, pp. 148–156
- [16] Alfaro, E.; Gamez, M., García, N. (2013). adabag: An R Package for Classification with Boosting and Bagging. Journal of Statistical Software, 54(2), 1–35
- [17] https://en.wikipedia.org/wiki/Sensitivity_and_specificity
- [18] https://geek.justjoin.it/ensemble-learning-czym-czym-polega/#Glosowanie_i_usredniani
- [19] https://en.wikipedia.org/wiki/Ensemble_learning
- [20] https://www.educba.com/decision-tree-hyperparameters/
- [21] https://towardsdatascience.com/ensemble-methods-bagging-boosting-and-stacking-c9214a10a205
- [22] https://www.javatpoint.com/machihttps://twitter.com/home?lang=plne-learning-random-forest-algorithm
- [23] Adam Zagdański, wykłady data mining, Politechnika Wrocławska
- [24] https://pl.frwiki.wiki/wiki/Boosting
- [25] https://miroslawmamczur.pl/005-wykres-skrzypcowy-violin-plot/