wb km3

April 29, 2022

1 WB - milestone 2 - inżynieria cech i wstępne modelowanie

1.1 physioNet dataset

1.1.1 Autorzy:

Paulina Jaszczuk Jędrzej Sokołowski Filip Szympliński

```
[5]: import pandas as pd
     import numpy as np
     import matplotlib.pyplot as plt
     import seaborn as sns
     import copy
     from sklearn import preprocessing
     from sklearn.model_selection import train_test_split
     from sklearn.model_selection import cross_validate
     import sklearn.metrics as metrics
     from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
     from sklearn.model_selection import GridSearchCV
     import xgboost as xgb
     from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier, RandomForestRegressor, U
      {\hookrightarrow} {\tt BaggingClassifier}
     from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
     from tqdm.notebook import tqdm
     from sklearn.metrics import mean_squared_error as MSE
     from sklearn.metrics import roc_auc_score, accuracy_score, f1_score, roc_curve, u
     ⇒r2_score, balanced_accuracy_score
     import warnings
     warnings.filterwarnings('ignore')
     # ustawia domyślną wielkość wykresów
```

```
plt.rcParams['figure.figsize'] = (12,8)
# to samo tylko dla tekstu
plt.rcParams['font.size'] = 16
```

1.2 Import danych i poglądowe informacje

Zbiór danych medycznych physioNet opisujący pacjentów z oddziałów kariochirurgicznych.

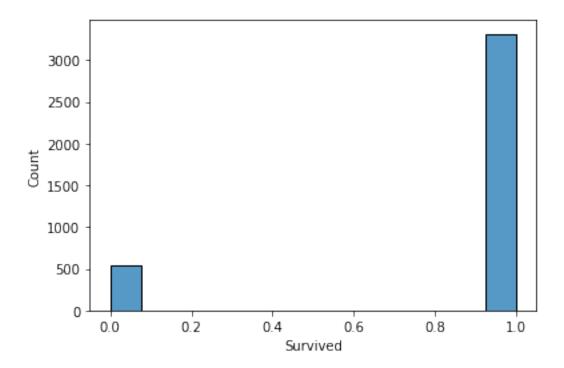
```
[7]: data = pd.read_csv("patients_data_ready.csv", sep=",", index_col=[0])
data.rename(columns = {"MechVent_max" : "MechVent"}, inplace = True)
```

Dane zawierają 5 cech statycznych (Age, Gender, Height, Weight, ICUType - rodzaj oddziału, na którym przebywał pacjent) oraz 75 cech dynamicznych, mierzonych co najmniej jednokrotnie. Wśród nich jest jedna zmienna binarna - MechVent - kolumna odpowiadająca informacji, czy pacjent został poddany wentylacji z użyciem respiratora. Zmienne dynamiczne, oprócz MechVent wyrażone są przez minimum, średnią i maximum z wszystkich pomiarów dla danego pacjenta. Zmienna celu - Survived - jest binarna (1, jeśli pacjent przeżył i 0, jeśli nie przeżył).

Nasze dane są mocno niezbalansowane - pacjentów, którzy zmarli jest zdecydawanie mniej niż tych, którzy przeżyli (stosunek mniej więcej 1:6). Jednocześnie to właśnie właściwa predykcja przypadków śmierci interesuje nas najbardziej. Między innymi z tego powodu zdecydowaliśmy się zastosować kilka metryk, a część z nich wyliczaliśmy oddzielnie dla obu klas - metryka ważona, z racji niezbalansowania klas, mogłaby być mocno zawyżona. Uznaliśmy, że główną metryką braną przez nas najbardziej pod uwagę podczas rozważania tego problemu jest recall. Dodatkowo rozpatrywaliśmy balanced accuracy score, precision, F1 score oraz Precision Recall Curve i AUPRC (AUPRC link).

W poprzednim etapie poddawaliśmy modelowaniu również ramkę danych z niektórymi zmiennymi zlogarytmowanymi, ale nie przyniosło to żadnych pozytywnych skutków, dlatego skupimy się na modelowaniu oryginalnego zbioru danych.

```
[]: #wykres niezbalansowania danych
sns.histplot( x = data['Survived'])
plt.show()
```



1.3 Modelowanie i dobór hiperparametrów

1.3.1 Sztuczne zbalansowanie danych

Najpierw postanowiliśmy wypróbować SMOTE - Synthetic Minority Over-sampling Technique (link do papera). Jest to metoda pozwalająca na sztuczne zbalansowanie danych. Jak pisaliśmy wyżej - wśród naszych danych jest bardzo mało tych dotyczących pacjentów, którzy zmarli, przez co nasz model podczas nauki często "ignoruje" te informacje. Jednocześnie to na detekcji właśnie takich pacjentów najbardziej nam zależy, dlatego wykorzystaliśmy SMOTE (tworzy nowe instancje klasy mniejszościowej na podstawie istniejących) oraz wg sugestii autora artukułu RandomUnderSampler (ograniczający liczność klasy dominującej).

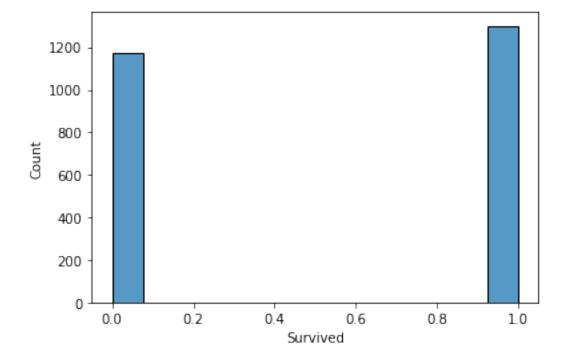
```
[]: |pip install imbalanced-learn
```

```
[]: import imblearn
from imblearn.over_sampling import SMOTE
from imblearn.under_sampling import RandomUnderSampler
from imblearn.pipeline import Pipeline

over = SMOTE(sampling_strategy=0.5)
under = RandomUnderSampler(sampling_strategy=0.9)
```

```
[]: steps = [('o', over), ('u', under)]
pipeline = Pipeline(steps=steps)
X_sm, y_sm = pipeline.fit_resample(X_train, y_train)
```

```
[]: sns.histplot(x = y_sm) plt.show()
```



```
[]: #funkcja do printowania metryk

def show_model_metrics(model, X, y):
    y_pred = model.predict(X)
    print(f"balanced accuracy score: {balanced_accuracy_score(y, y_pred)}")
    print(f"F1 score: {f1_score(y, y_pred, average=None)}")
    print(f"F1 score micro: {f1_score(y, y_pred, average='micro')}")
    print(f"F1 score weighted: {f1_score(y, y_pred, average='weighted')}")
```

Na poprzednim etapie prac Random Forest i XGBoost okazały się najbardziej perspektywicznymi modelami, dlatego teraz będziemy rozważać właśnie je.

1.3.2 Random Forest

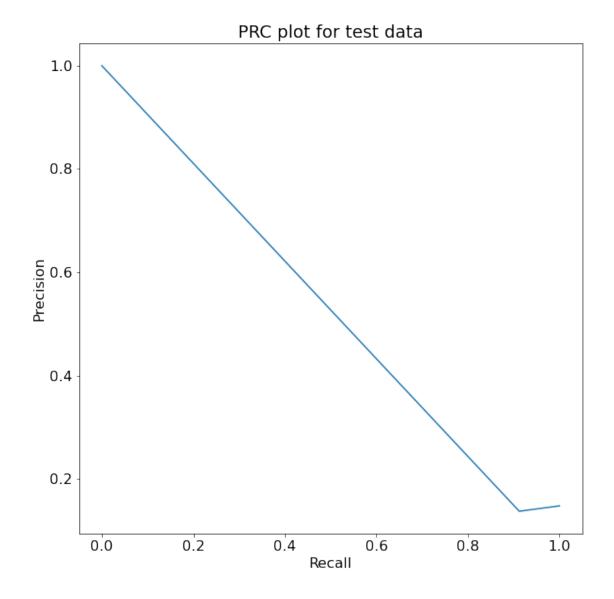
Domyślne parametry

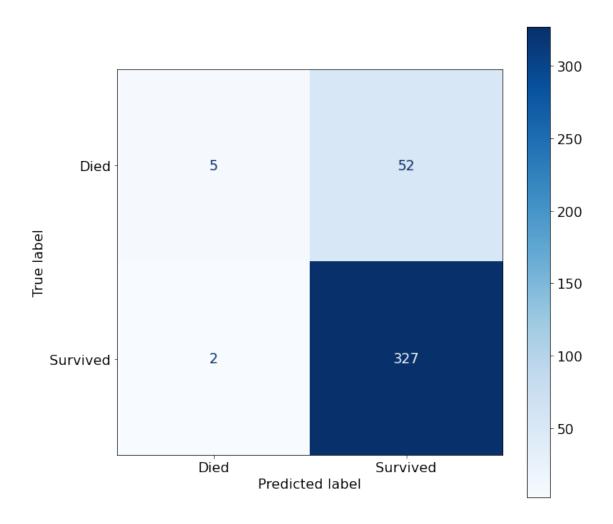
```
[]: #random forest na zbiorze oryginalnym
rForest = RandomForestClassifier()
rForest.fit(X_train, y_train)

y_pred = rForest.predict(X_val)
show_model_metrics(rForest, X_val, y_val)
```

balanced accuracy score: 0.5408201354449955

F1 score: [0.15625 0.92372881]
F1 score micro: 0.8601036269430051
F1 score weighted: 0.8103964498990077
Precision score: [0.71428571 0.86279683]
Recall score: [0.0877193 0.99392097]

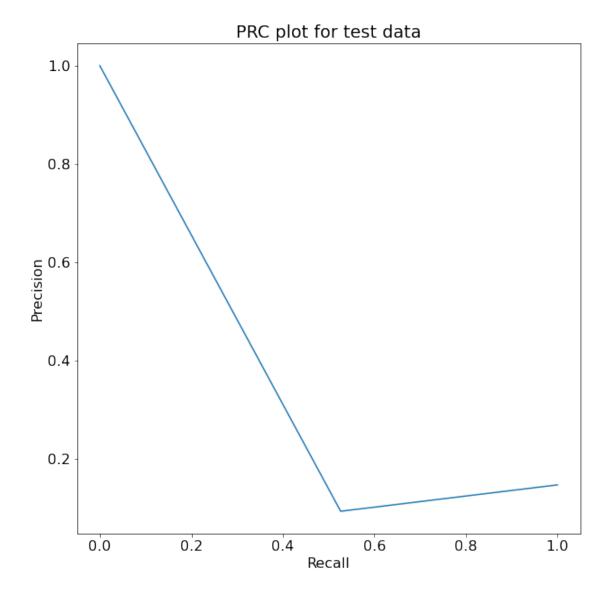


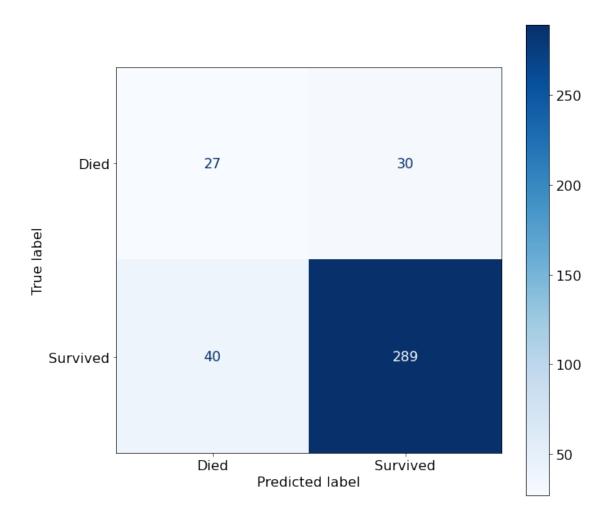


```
[]: #random forest na zbiorze zbalansowanym
    rForest_sm = RandomForestClassifier()
    rForest_sm.fit(X_sm, y_sm)

y_pred = rForest.predict(X_val)
    show_model_metrics(rForest_sm, X_val, y_val)
```

F1 score: [0.43548387 0.89197531]
F1 score micro: 0.8186528497409327
F1 score weighted: 0.8245659512652103
Precision score: [0.40298507 0.90595611]
Recall score: [0.47368421 0.87841945]





Jak widać zbalansowanie klas znacząco poprawiło recall - przypadki śmiertelne są częściej wykrywane (trzeba też zaznaczyć, że też jest ich zwyczajnie więcej), jednak jednocześnie mocno spadło precision - zalednie połowa przypadków sklasyfikowanych jako śmiertelne rzeczywiście taka była.

Spróbujmy teraz dobrać optymalne parametry

GridSearchCV

```
[]: max_depth=[3, 4, 5]
n_estimators = [80, 90, 100, 110, 120]
criterion=["gini","entrophy"]
min_samples_split = [2, 5, 10, 20, 50]
param_grid = dict(max_depth=max_depth, n_estimators = n_estimators,

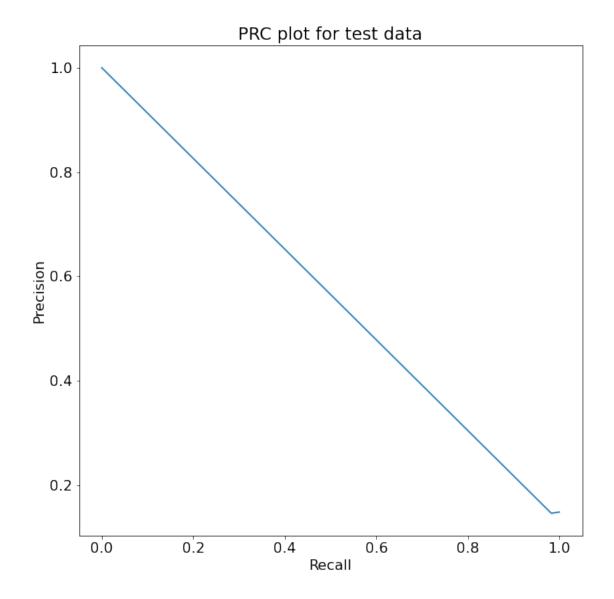
criterion=criterion, min_samples_split=min_samples_split)
```

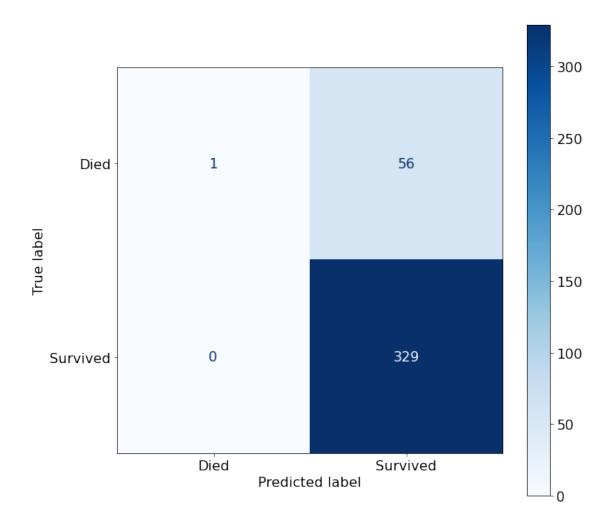
```
[]: from sklearn.model_selection import GridSearchCV

# na zbiorze oryginalnym
forest = RandomForestClassifier()
```

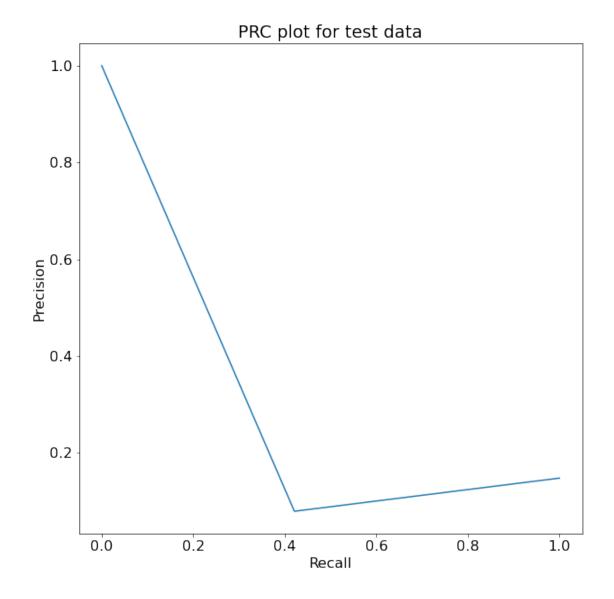
```
grid = GridSearchCV(estimator=forest, param_grid=param_grid, cv = 5, n_jobs=-1)
     grid_result = grid.fit(X_train, y_train)
     print(f"Best score: {grid_result.best_score_}")
     print(f"Best parameters: {grid_result.best_params_} ")
    Best score: 0.8754641654641656
    Best parameters: {'criterion': 'gini', 'max_depth': 5, 'min_samples_split': 5,
    'n_estimators': 90}
[]: # na zbiorze orginalnym
     rForest_param = RandomForestClassifier(min_samples_split = 5,
                                  criterion = 'gini',
                                  max_depth = 5,
                                  n = stimators = 90)
     rForest_param.fit(X_train, y_train)
     y_pred = rForest_param.predict(X_val)
     show_model_metrics(rForest_param, X_val, y_val)
    balanced accuracy score: 0.5087719298245614
    F1 score: [0.03448276 0.92156863]
```

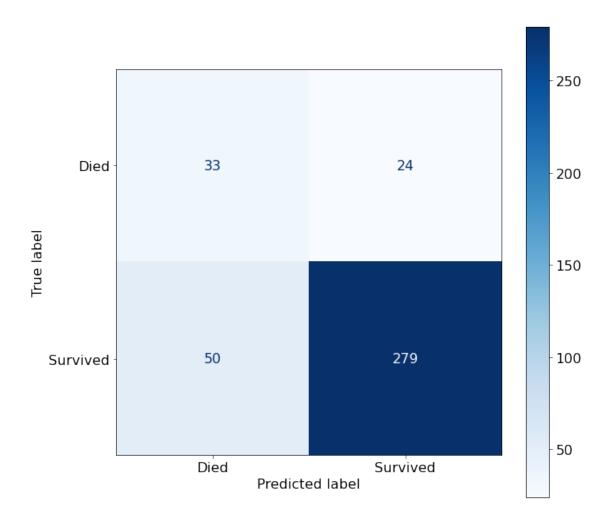
F1 score: [0.03448276 0.92156863]
F1 score micro: 0.854922279792746
F1 score weighted: 0.7905740820537612
Precision score: [1. 0.85454545]
Recall score: [0.01754386 1.]





F1 score: [0.47142857 0.88291139]
F1 score micro: 0.8082901554404145
F1 score weighted: 0.8221483851624206
Precision score: [0.39759036 0.92079208]
Recall score: [0.57894737 0.84802432]

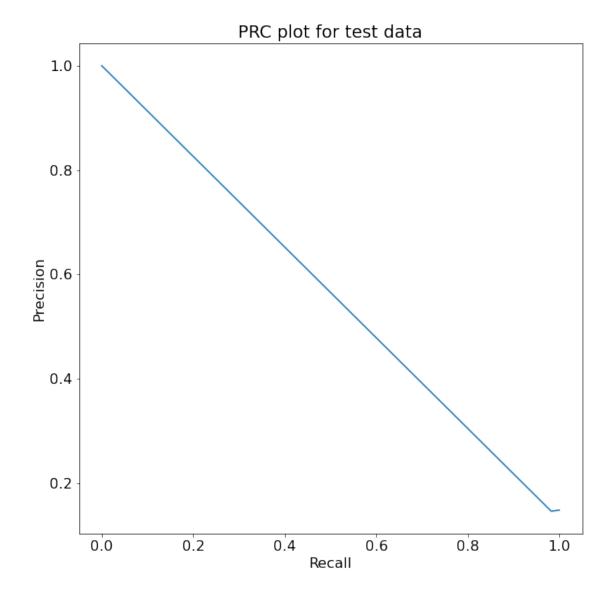


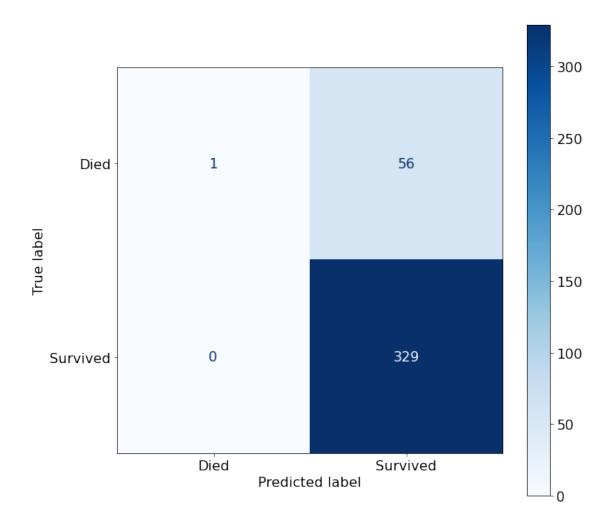


RandomizedSearchCV

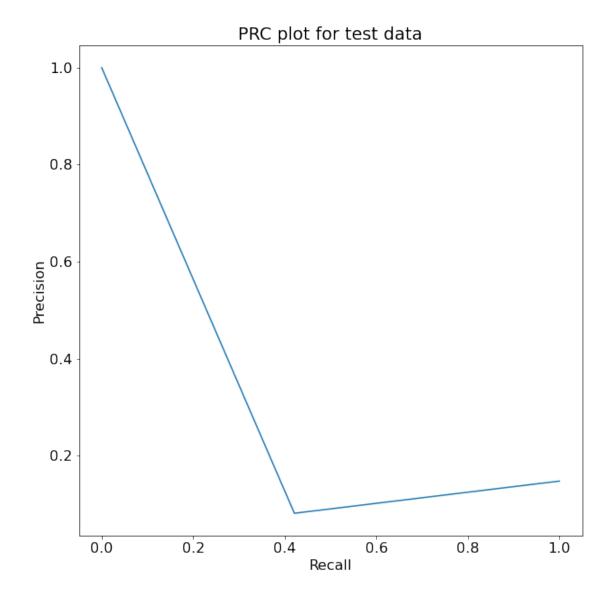
```
Best score: 0.8721267092695664
Best parameters: {'n_estimators': 80, 'min_samples_split': 50, 'max_depth': 4,
'criterion': 'gini'}
```

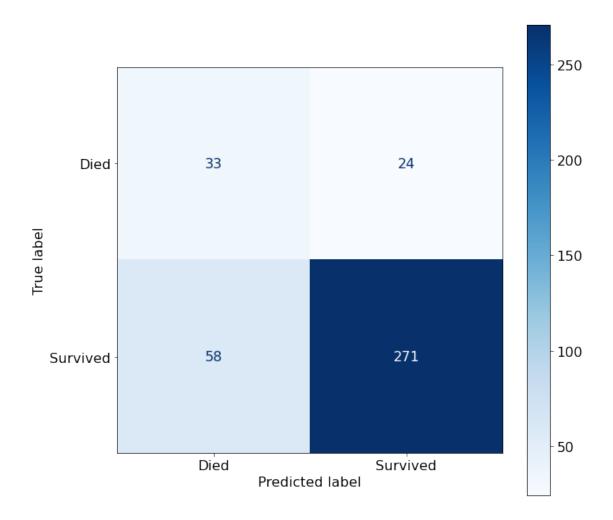
F1 score: [0.03448276 0.92156863]
F1 score micro: 0.854922279792746
F1 score weighted: 0.7905740820537612
Precision score: [1. 0.85454545]
Recall score: [0.01754386 1.]





F1 score: [0.44594595 0.86858974] F1 score micro: 0.7875647668393783 F1 score weighted: 0.8061786128495972 Precision score: [0.36263736 0.91864407] Recall score: [0.57894737 0.82370821]





Zastosowanie GridSearchCV oraz RandomizedSearchCV dla zbioru zbalansowanego dało podobne rezulaty, było to poprawienie precision, oraz lepszy recall dla pacjentów którzy zmarli lecz gorszy dla tych którzy przeżyli.

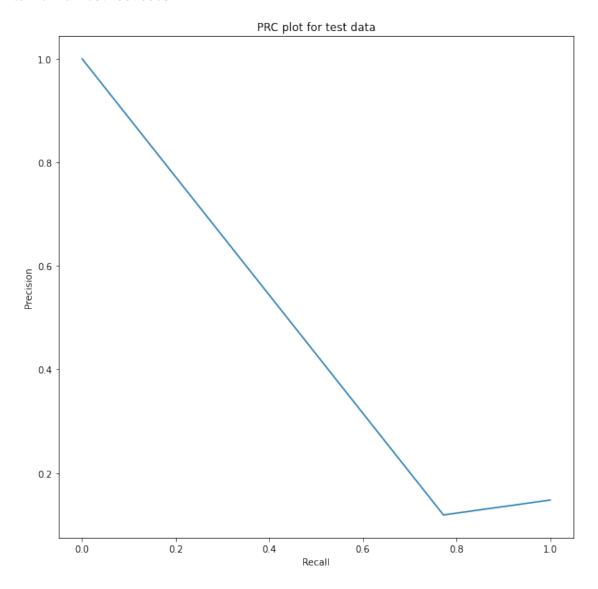
W przypadku orginalnego zbioru danych dobranie parametrów wpłynęło na poprawienie precision, ale nie skutkowało poprawieniem wyników recall.

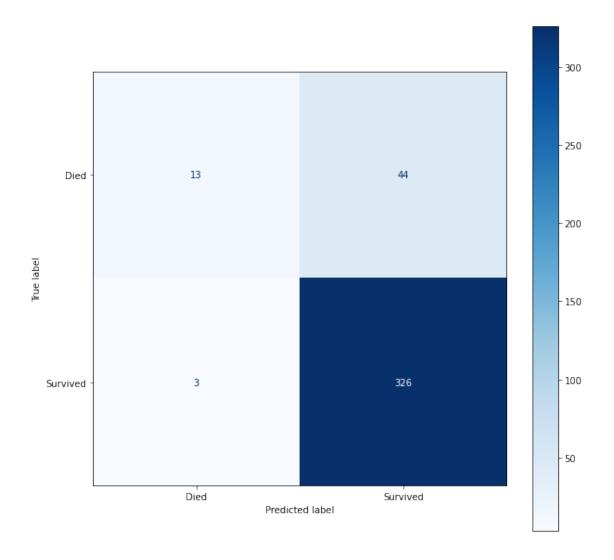
1.3.3 XGBoost

Domyślne parametry

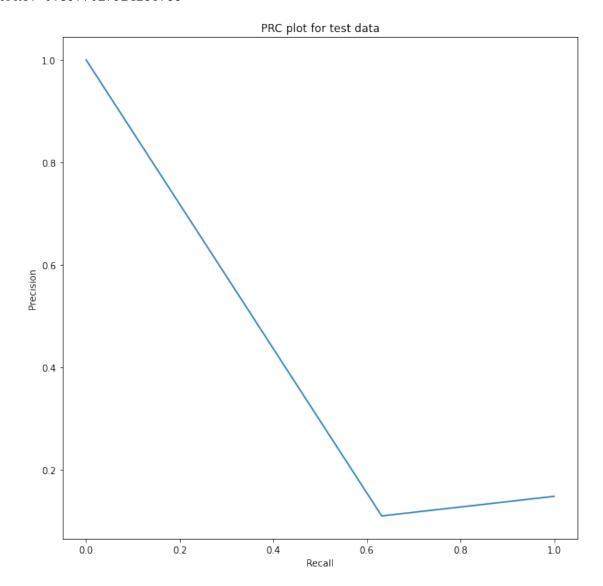
```
y_pred = xgb_clf.predict(X_val)
show_model_metrics(xgb_clf, X_val, y_val)
```

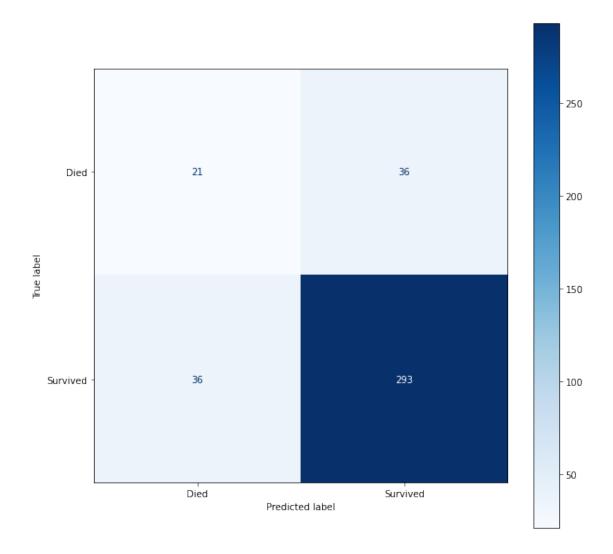
F1 score: [0.35616438 0.93276109]
F1 score micro: 0.8782383419689119
F1 score weighted: 0.8476159781710605
Precision score: [0.8125 0.88108108]
Recall score: [0.22807018 0.99088146]





F1 score: [0.36842105 0.89057751] F1 score micro: 0.8134715025906736 F1 score weighted: 0.8134715025906736 Precision score: [0.36842105 0.89057751] Recall score: [0.36842105 0.89057751]



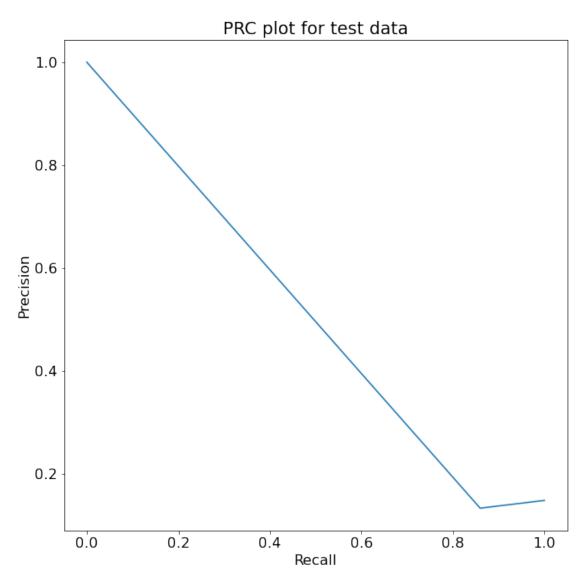


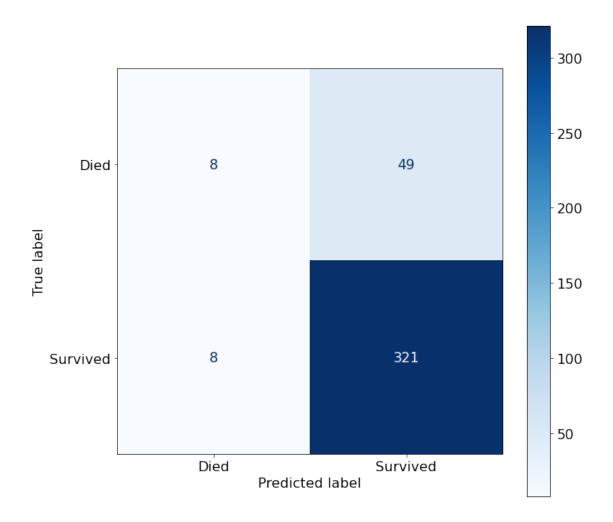
Podobnie jak w przypadku Random Forest dla zbioru zbalansowanego (wzgledem oryginalnego) lepiej wykrywamy śmiertelne przypadki pacjentów - wzrost recall dla zmarłych pacjentów z 0.22807018 do 0.36842105. Niestety doprowadziło to do znacznego spadku precision z 0.8125 do 0.36842105. Pomimo takiej sytuacji, gdzie w wyniku wzrostu jednej metryki spada druga, możemy uznać taką sytucję za korzystną. Lepiej bowiem przewidzieć, że dany pacjen może umrzeć (mimo że przeżyje), ażeby była sytuacja odwrotna.

GridSearchCV

```
[ ]: xgb_model = xgb.XGBClassifier(
                         booster='gbtree',
                         use_label_encoder=False,
                         verbosity = 0
     grid = GridSearchCV(estimator=xgb_model, param_grid=param_grid_xgb, cv = 5,__
     \rightarrown_jobs=-1)
     grid_result = grid.fit(X_train, y_train)
     print(f"Best score: {grid_result.best_score_}")
     print(f"Best parameters: {grid_result.best_params_} ")
    Best score: 0.8758311001168144
    Best parameters: {'gamma': 0.2, 'learning_rate': 0.3, 'max_depth': 10}
[ ]: xgb_model = xgb.XGBClassifier(
                         booster='gbtree',
                         use_label_encoder=False,
                         verbosity = 0
     grid = GridSearchCV(estimator=xgb_model, param_grid=param_grid_xgb, cv = 5,_
      \rightarrown_jobs=-1)
     grid_result = grid.fit(X_sm, y_sm)
     print(f"Best score: {grid_result.best_score_}")
     print(f"Best parameters: {grid_result.best_params_} ")
    Best score: 0.8793522267206477
    Best parameters: {'gamma': 0.0, 'learning_rate': 0.3, 'max_depth': 10}
    Zbiór oryginalny
[]: # na zbiorze orginalnym
     xgb_param_clf = xgb.XGBClassifier(
                         booster='gbtree',
                         use_label_encoder=False,
                         verbosity = 0,
                         learning_rate=0.3,
                         max_depth=10,
                         gamma=0.2
     xgb_param_clf.fit(X_train, y_train)
     y_pred = xgb_param_clf.predict(X_val)
     show_model_metrics(xgb_param_clf, X_val, y_val)
```

F1 score: [0.21917808 0.91845494]
F1 score micro: 0.8523316062176166
F1 score weighted: 0.8151938458670311
Precision score: [0.5 0.86756757]
Recall score: [0.14035088 0.97568389]

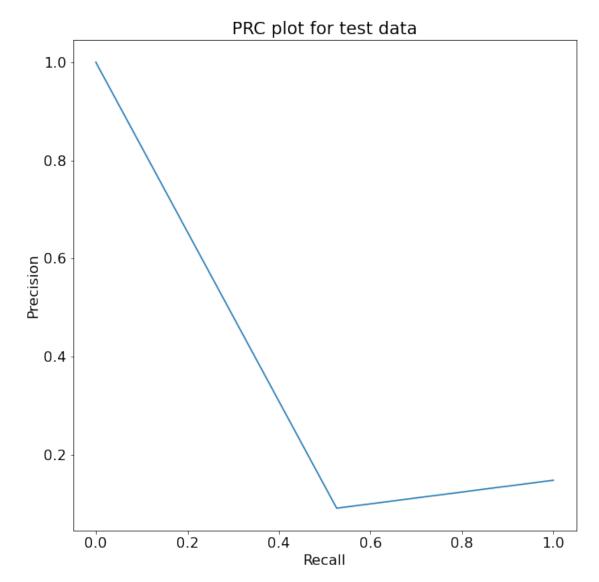


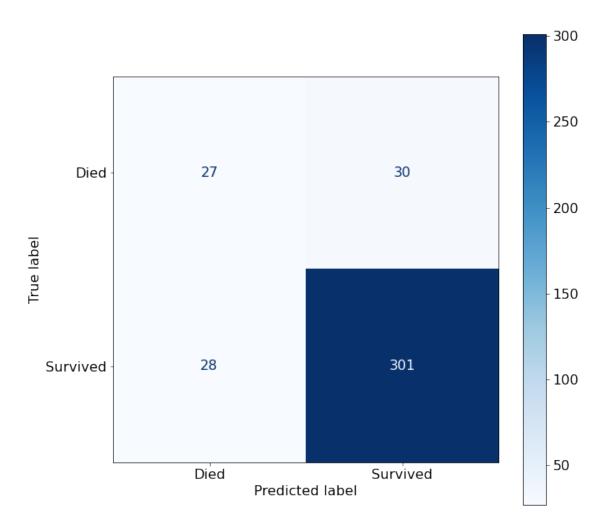


Zbiór zbalansowany

balanced accuracy score: 0.6942889137737962

F1 score: [0.48214286 0.91212121]
F1 score micro: 0.8497409326424871
F1 score weighted: 0.8486269990803669
Precision score: [0.49090909 0.90936556]
Recall score: [0.47368421 0.91489362]





${\tt RandomizedSearchCV}$

Best score: 0.8793522267206477
Best parameters: {'gamma': 0.0, 'learning_rate': 0.3, 'max_depth': 10}

```
Best score: 0.8793522267206477
Best parameters: {'gamma': 0.0, 'learning_rate': 0.3, 'max_depth': 10}
```

Uzyskane parametry są takie same jak w przypadku GridSearchCV, więc i wyniki oraz wnioski będą takie same.

W wyniku dobierania hiperparametrów udało się polepszyć krytyczne metryki, co skutkuje lepszą wykrywalnością pacjentów, którzy zmarli.

Jak widać zbalansowanie klas znacząco poprawiło recall - przypadki śmiertelne są częściej wykrywane (trzeba też zaznaczyć, że jest ich zwyczajnie więcej), jednak jednocześnie mocno spadło precision - zaledwie połowa przypadków sklasyfikowanych jako śmiertelne rzeczywiście taka była.

1.3.4 AutoML

TPOT AutoML wyboru modeli (link do papera).

```
[]: |pip install tpot

[]: from tpot import TPOTClassifier

[9]: #NIE DOTYKAĆ!!1!!1! KRĘCI SIĘ PÓŁ DNIA
tpot = TPOTClassifier(generations=4,verbosity=2)
tpot.fit(X_train, y_train)

Optimization Progress: 0%| | 0/500 [00:00<?, ?pipeline/s]

Generation 1 - Current best internal CV score: 0.8787974987974987

Generation 2 - Current best internal CV score: 0.8802817288531575

Generation 3 - Current best internal CV score: 0.8802817288531575

Generation 4 - Current best internal CV score: 0.8802817288531575
```

```
Best pipeline: XGBClassifier(input_matrix, learning_rate=0.1, max_depth=2, min_child_weight=1, n_estimators=100, n_jobs=1, subsample=0.650000000000001, verbosity=0)
```

[9]: TPOTClassifier(generations=4, verbosity=2)

```
[]: etc.fit(X_train, y_train)
```

```
[]: etc_metrics = show_model_metrics(etc, X, y)
```

Model ma bardzo dobre precision, natiomiast słabe recall. Być może jest tak dlatego, że TPOT w założeniu maksymalizuje Accuracy.

HyperOptEstimator

```
[]: !pip install hyperopt
```

```
[]: !pip install git+https://github.com/hyperopt/hyperopt-sklearn
```

```
[]: from hpsklearn import HyperoptEstimator
from hpsklearn import any_classifier
from hyperopt import tpe
```

```
[]: he = HyperoptEstimator(classifier=any_classifier('clf'), algo=tpe.suggest, 

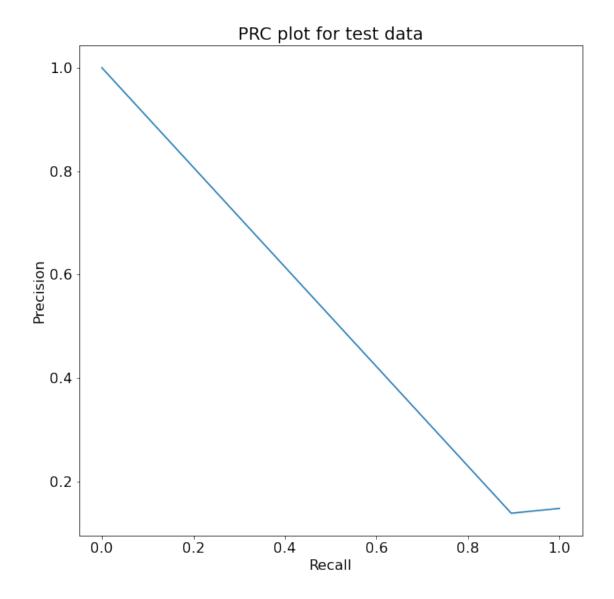
→max_evals=10, trial_timeout=60)
he.fit(X_train,y_train)
```

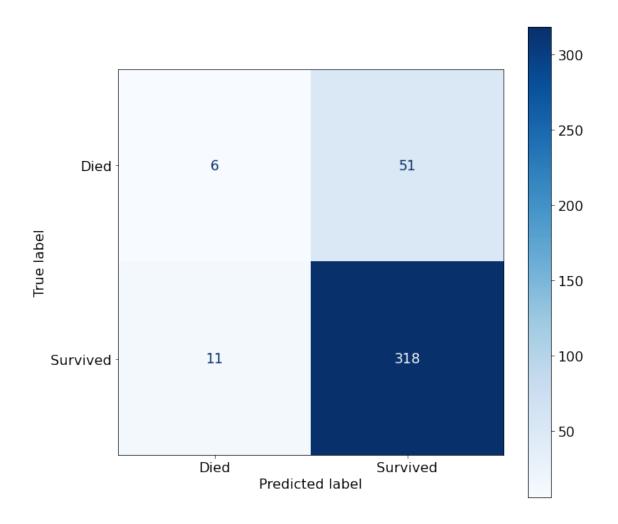
```
100%|
     | 1/1 [00:00<00:00, 2.30trial/s, best loss: 0.14074074074074072]
100%
     | 2/2 [00:06<00:00, 6.50s/trial, best loss: 0.14074074074074072]
100%|
     | 3/3 [00:25<00:00, 25.52s/trial, best loss: 0.14074074074074072]
100%|
     100%|
     100%|
     100%|
     100%|
100%|
     | 9/9 [00:00<00:00, 4.12trial/s, best loss: 0.12037037037037035]
100%|
     | 10/10 [00:00<00:00, 3.78trial/s, best loss:
0.12037037037037035]
```

```
[]: print(he.best_model())
```

^{{&#}x27;learner': KNeighborsClassifier(algorithm='brute', leaf_size=35,

F1 score: [0.16216216 0.91117479]
F1 score micro: 0.8393782383419688
F1 score weighted: 0.8005692941482837
Precision score: [0.35294118 0.86178862]
Recall score: [0.10526316 0.96656535]

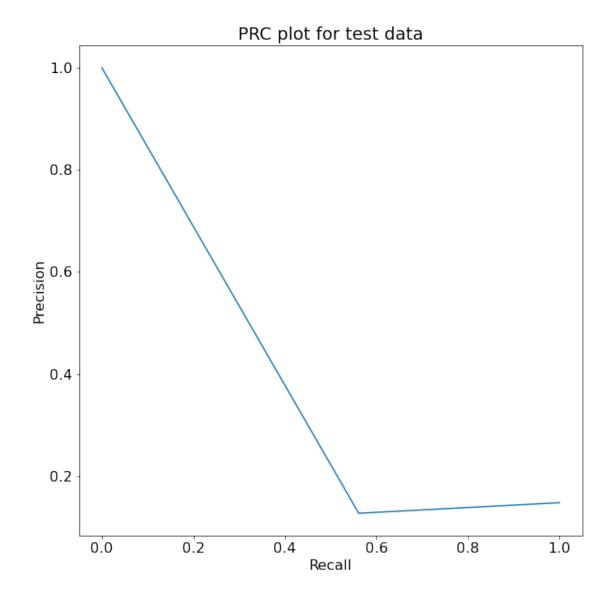


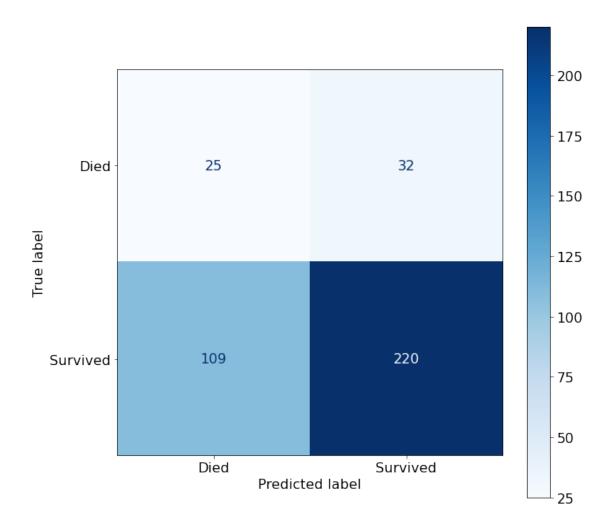


[]: knc.fit(X_sm, y_sm) show_model_metrics(knc, X_val, y_val)

balanced accuracy score: 0.5536447501733056

F1 score: [0.2617801 0.75731497]
F1 score micro: 0.6347150259067358
F1 score weighted: 0.6841401359445868
Precision score: [0.18656716 0.87301587]
Recall score: [0.43859649 0.66869301]





1.4 Podsumowanie

Ze względu na charakter naszych danych, najbardziej interesującymi nas metrykami do oceny modeli były Recall i Precision.

Najlepsza wartość średniej dokładności modelu na przestrzeni obu przewydywanych klas wynosiła około 70%. Takie wyniki otrzymały modele RandomForest oraz XGBoost będące po doborze optymalnych parametrów oraz wytrenowane na zbalansowanym zbiorze danych.

W wielu przypadkach, zastosowanie zbalansowanego zbioru danych, wpływało na znaczne poprawienie wartości recall dla pacjentów którzy zmarli, lecz niosło ze sobą równiez pogorszenie dla pozostałych pacjentów oraz ogólnie słabsze wyniki metryki precision. Tak czy inaczej, średnia dokładność była w tych sytuacjach lepsza.

Biorąc pod uwagę, że wykrywanie przypadków śmiertelnych interesuje nas najbardziej, można stwierdzić, że zbalansowanie danych miało istotny wpływ na działanie modelu.