# Trabalho Final -Aprendizado de Máquina

Fundação Getúlio Vargas RJ - Escola de Matemática Aplicada

Graduação em Ciência de Dados e Inteligência Artificial

Disciplina: Aprendizado de Máquina

Aluno: Gianlucca Devigili

## 1. Os dados

Para a execução do presente trabalho, utilizei o clássico dataset do <u>titanic</u>. Uma pequena amostra dos dados pode ser vista na imagem abaixo:

	Survived	Pclass	Name	Sex	Age	SibSp	Parch	Ticket	Fare	Cabin	Embarked
PassengerId											
1		3	Braund, Mr. Owen Harris	male	22.0			A/5 21171	7.2500	NaN	S
2			Cumings, Mrs. John Bradley (Florence Briggs Th	female	38.0			PC 17599	71.2833	C85	С
3		3	Heikkinen, Miss. Laina	female	26.0	0		STON/O2. 3101282	7.9250	NaN	S
4			Futrelle, Mrs. Jacques Heath (Lily May Peel)	female	35.0			113803	53.1000	C123	S
5		3	Allen, Mr. William Henry	male	35.0	0		373450	8.0500	NaN	S
6		3	Moran, Mr. James	male	NaN			330877	8.4583	NaN	Q
7			McCarthy, Mr. Timothy J	male	54.0	0		17463	51.8625	E46	S
8			Palsson, Master. Gosta Leonard	male	2.0	3		349909	21.0750	NaN	S
9		3	Johnson, Mrs. Oscar W (Elisabeth Vilhelmina Berg)	female	27.0	0	2	347742	11.1333	NaN	S
10		2	Nasser, Mrs. Nicholas (Adele Achem)	female	14.0			237736	30.0708	NaN	С

O dataset contém dados referentes à 494 sobreviventes e 815 pessoas que não sobreviveram.

#### 1.1. Dicionário de Dados

O dataset conta com:

• 5 colunas categóricas (tipo: object)

4 colunas discretas (tipo: int 64)

2 colunas contínuas (tipo: float 64)

As colunas do dataset são as seguintes:

• **Survived:** bool - {0, 1} - a coluna *target* do dataset. Indica se o passageiro sobreviveu (1) ou não (0);

- **PClass:** int {1, 2, 3} indica a classe do passageiro, sendo primeira classe a mais alta e a terceira a mais baixa;
- Name: str nome do passageiro. A coluna não foi utilizada para a realização do trabalho por conta da grande complexidade de tratar tal coluna de forma efetiva. Uma maneira da qual estes dados poderiam ser utilizados é a identificação por sobrenome e uma classificação em famílias, contudo pessoas com sobrenomes iguais porém de famílias diferentes poderiam ser impossíveis de distinguir dado as informações presentes no dataset, além da geração de uma grande quantidade de features novas que não garantiriam melhora na performance do modelo, além de acarretar em aumento da complexidade do mesmo.
- Sex: str {"male", "female"} indica o sexo do passageiro (feminino ou masculino);
- SibSp: int 0 à 8 indica a quantidade de irmãos e cônjuges a bordo do navio;
- Parch: int 0 à 9 indica o número de pais e filhos a bordo do navio;
- Ticket: tr indica o número do bilhete de embarque. A coluna não foi utilizada por conta da grande diversidade de formas de identificação do número dos bilhetes, o que poderia gerar dificuldades de tratar corretamente os dados;
- Fare: float indica o preço pago na passagem;
- Cabin: str indica a cabine do passageiro. Por conta da grande quantidade de dados faltantes, a coluna n\u00e3o foi utilizada no dataset.
- **Embarked:** str {C = Cherbourg, Q = Queenstown, S = Southampton} indica o porto de embarque do passageiro. O dataset, obviamente, apenas considera passageiros que realmente embarcaram.

### 1.2. Tratamento dos Dados

O dataset original, como tem o propósito de servir como dataset para uma competição do website Kaggle, está subdividido em 3 datasets: train.csv, test.csv e gender\_submission\_csv, sendo este último contendo a coluna Survived referente aos dados do dataset de teste. Preferi juntar todos os dados em um único dataset e então dividir novamente em treino e teste por dois motivos principais: precisei realizar algumas transformações e tratamentos nos dados de algumas colunas e a concatenação dos datasets em um só tornou tal processo mais efetivo e a possibilidade de uma análise exploratória completa com os dados dos passageiros do navio.

Primeiramente eliminei as colunas Name e Ticket pelos motivos já discutidos acima, bem como a coluna Cabin pela grande quantidade de dados faltantes na mesma.

Agora, analisando as informações do dataset mostradas pelo método pandas. Data Frame. info(), temos:

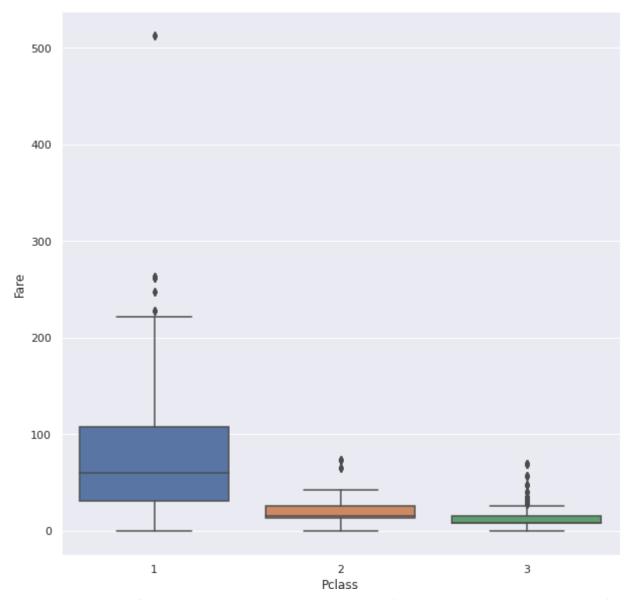
```
print(merged df.info())
✓ 0.1s
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Int64Index: 1309 entries, 1 to 1309
Data columns (total 11 columns):
    Column Non-Null Count Dtype
    Survived 1309 non-null
                           int64
0
1
    Pclass 1309 non-null
                           int64
    Name 1309 non-null object
2
3
    Sex
           1309 non-null
                            object
    Age
             1046 non-null
                            float64
4
5
    SibSp
            1309 non-null
                            int64
    Parch 1309 non-null int64
6
    Ticket
Fare
            1309 non-null
                            object
            1308 non-null float64
8
    Cabin 295 non-null
9
                            object
10 Embarked 1307 non-null
                            object
dtypes: float64(2), int64(4), object(5)
memory usage: 122.7+ KB
```

evidenciando a necessidade de tratamento de dados faltantes nas colunas Age, Fare e Embarked.

Para a coluna Age, substituí os dados faltantes pela idade média dos passageiros: 30 anos.

Para a coluna Fare, substituí os dados faltantes pela moda da coluna, no caso o porto de Southampton ("S"), que onde provavelmente foi o embarque de fato de tais passageiros já que existem 914 embarques neste porto, contra 270 em Cherbourg e 123 em Queenstown.

Para a coluna Fare, de modo a deixar ela mais próxima do que poderia ser o dado real que não está presente na base, utilizei o fato de que a classe do passageiro tem grande influência no valor de sua passagem, o que pode ser evidenciado na seguinte visualização:



portanto substituí os dados faltantes pelo preço médio da passagem referente à classe do passageiro que não tinha este dado.

Um problema encontrado na coluna Fare que pode ser visto no *boxplot* acima é a presença de valores estremos no dataset. Ao todo são 4 valores com tal problema e todos eles apresentam o valor de \$512.3292, indicando que provavelmente se trata de um *outlier*. Da mesma forma que fiz com o passageiro que não possuía um valor de passagem, substituí os dados extremos pela média do valor da passagem agrupada pela classe dos passageiros, que neste caso em particular era a primeira classe.

#### **Tratando os Dados Categóricos**

A primeira modificação para tratar os dados categóricos foi a transformação da coluna Embarked em dummies, ou seja, em 3 colunas booleanas que indicam se o passageiro embarcou (1) ou não (0) naquele determinado porto.

Em sequência, transformei a coluna Sex em uma coluna booleana, indicando se o passageiro é do sexo masculino (1) ou feminino (0).

Tal tratamento de dados foi realizado através da função pandas.get\_dummies(), no segundo caso usando o parâmetro drop\_first=True para termos apenas uma coluna chamada Sex\_male ao invés dela e a coluna Sex\_female que é apenas a contraparte da primeira coluna booleana.

#### **Dataset Final**

Como dataset final temos o dataset df\_dummies com os seguintes metadados:

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Int64Index: 1309 entries, 1 to 1309
Data columns (total 10 columns):
 # Column Non-Null Count Dtype
 0
   Survived
                1309 non-null int64
    Pclass 1309 non-null int64
Age 1309 non-null float64
SibSp 1309 non-null int64
 2
 3
    Parch 1309 non-null int64
Fare 1309 non-null float64
 4
 5
 6
     Embarked_C 1309 non-null uint8
   Embarked Q 1309 non-null
                                  uint8
 8
     Embarked S 1309 non-null
                                   uint8
 9
     Sex male 1309 non-null
                                   uint8
dtypes: float64(2), int64(4), uint8(4)
memory usage: 109.0 KB
```

e como amostra dos dados temos a tabela:

	Survived	Pclass	Age	SibSp	Parch	Fare	Embarked_C	Embarked_Q	Embarked_S	Sex_male
PassengerId										
1	0	3	22.0	1	0	7.2500	0	0	1	1
2	1	1	38.0	1	0	71.2833	1	0	0	0
3	1	3	26.0	0	0	7.9250	0	0	1	0
4	1	1	35.0	1	0	53.1000	0	0	1	0
5	0	3	35.0	0	0	8.0500	0	0	1	1
6	0	3	30.0	0	0	8.4583	0	1	0	1
7	0	1	54.0	0	0	51.8625	0	0	1	1
8	0	3	2.0	3	1	21.0750	0	0	1	1
9	1	3	27.0	0	2	11.1333	0	0	1	0
10	1	2	14.0	1	0	30.0708	1	0	0	0

que contém os dados referentes aos mesmos passageiros da amostra da primeira imagem deste documento.

# 1.3. Análise Exploratória

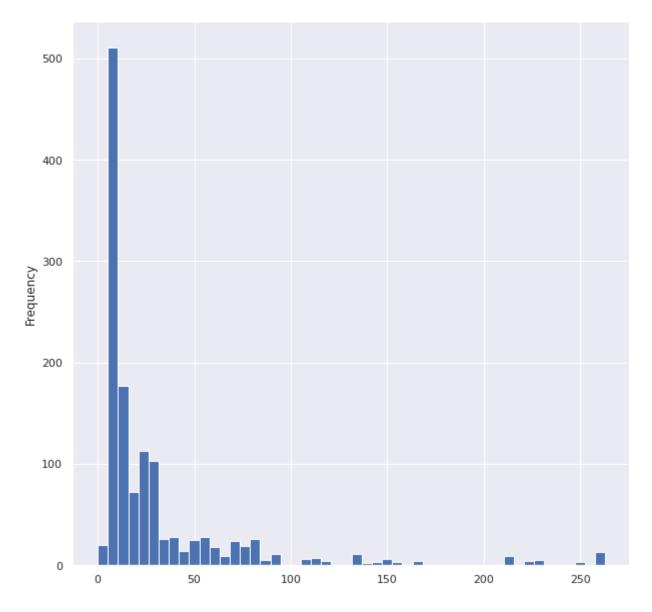
Seguem as estatísticas de cada uma das colunas numéricas do dataframe:

	Survived	Pclass	Age	SibSp	Parch	Fare
count	1309.000000	1309.000000	1309.000000	1309.000000	1309.000000	1309.000000
mean	0.377387	2.294882	29.905019	0.498854	0.385027	31.893980
std	0.484918	0.837836	12.883281	1.041658	0.865560	44.450655
min	0.000000	1.000000	0.170000	0.000000	0.000000	0.000000
25%	0.000000	2.000000	22.000000	0.000000	0.000000	7.895800
50%	0.000000	3.000000	30.000000	0.000000	0.000000	14.454200
75%	1.000000	3.000000	35.000000	1.000000	0.000000	31.275000
max	1.000000	3.000000	80.000000	8.000000	9.000000	263.000000

Podemos observar que a coluna referente à quantidade de irmãos e cônjuges (SibSp) possui uma grande quantidade de zeros, tanto que a média fica abaixo de 1 e apenas o terceiro quartil apresenta o valor 1. Outro detalhe interessante é a quantidade de pais/filhos (Parch) que desta vez apresenta valores iguais a zero em todos os quartis, evidenciando que os passageiros do Titanic, em sua maioria, estavam sozinhos ou apenas na presença do cônjuge, bem como a presença de uma grande família à bordo.

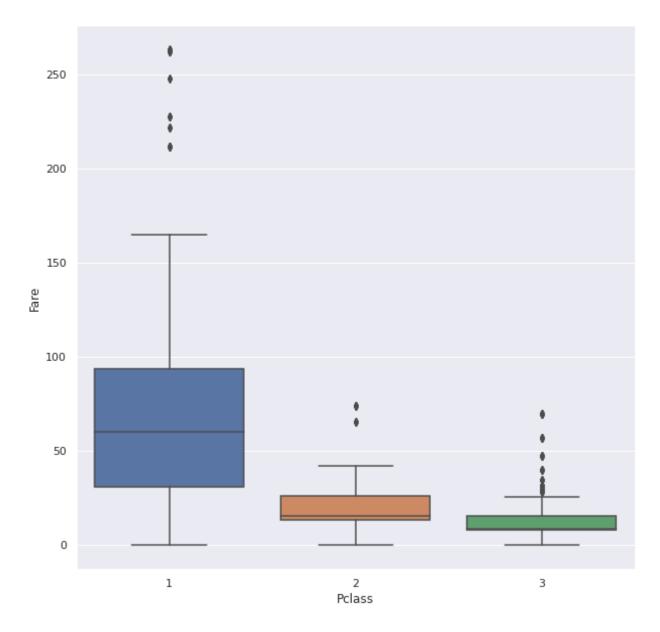
Outro ponto importante observável nessas estatísticas diz respeito à coluna Fare a média e a mediana divergem bastante, sendo que a média está mais perto do 3º quartil do que da mediana, porém apresentando um baixo desvio padrão. Tal estatísticas ficam mais fáceis de se entender visualizando-se a frequência de cada variável utilizando um histograma (bins = 50):

## Histograma de Fare (Preço da Passagem)



A maior concentração dos preços das passagens está em valores baixos, contudo existem diversos passageiros com passagens de valores altos que chegam a ser discrepantes do restante. Inclusive, este gráfico desconsidera aqueles valores extremos iniciais que estavam acima de 500 dólares.

Outra maneira de se visualizar tais dados é através de um boxplot, agora separado pela classe do passageiro:

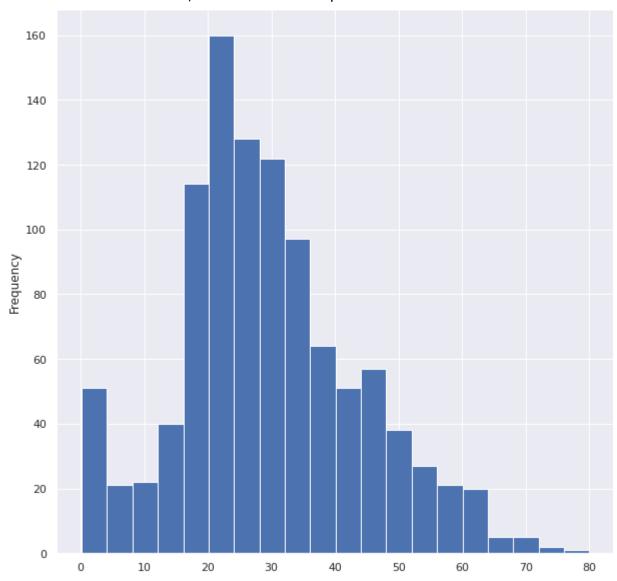


Note uma média maior agora e que os dados se encontram melhor distribuídos dentro dos respectivos desvios padrões. Uma curiosidade é que existem vários valores baixos na primeira classe por conta de funcionários que não pagaram pela passagem porém ficaram em cabines privilegiadas. O boxplot acima difere do apresentado na sessão 1.2. por não conter os *outliers*.

#### Frequência de Idade

Aqui podemos observar uma maior frequência em adultos entre 20 e 40 anos, como descrito pelas estatísticas na tabela anterior. O presente gráfico não mostra os dados tratados com os valores faltantes para uma melhor visualização, já que teríamos uma

coluna enorme na média, além de a ideia aqui ser mostrar os dados reais.



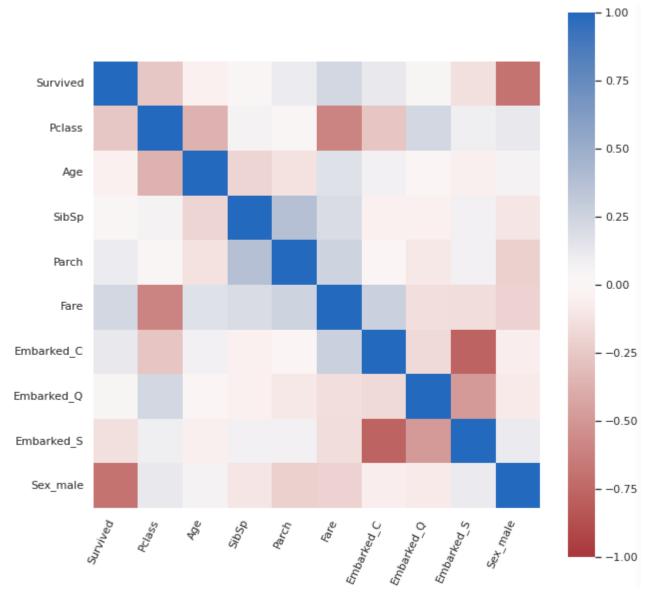
# Correlações

Utilizando o método pd. DataFrame.corr(), calculei a correlação entre colunas do dataset:

```
corr = df_dummies.corr()
corr.style.background_gradient(cmap='coolwarm_r')
```

	Survived	Pclass	Age	SibSp	Parch	Fare	Embarked_C	Embarked_Q	Embarked_S	Sex_male
Survived	1.000000	-0.264710		0.002370	0.108919	0.232247	0.121156	0.040950	-0.133020	-0.688371
Pclass	-0.264710	1.000000	-0.365598	0.060832	0.018322	-0.602317	-0.269658	0.230491	0.091320	0.124617
Age	-0.048806	-0.365598	1.000000	-0.190774	-0.131174	0.171250	0.076244	-0.011551	-0.059953	0.057627
SibSp	0.002370	0.060832	-0.190774	1.000000	0.373587	0.201606	-0.048396	-0.048678	0.073709	-0.109609
Parch	0.108919	0.018322	-0.131174	0.373587	1.000000	0.253903	-0.008635	-0.100943	0.071881	-0.213125
Fare	0.232247	-0.602317	0.171250	0.201606	0.253903	1.000000	0.272372	-0.141220	-0.150543	-0.206863
Embarked_C	0.121156	-0.269658	0.076244	-0.048396	-0.008635	0.272372	1.000000	-0.164166	-0.778262	-0.066564
Embarked_Q	0.040950	0.230491	-0.011551	-0.048678	-0.100943	-0.141220	-0.164166	1.000000	-0.491656	-0.088651
Embarked_S	-0.133020	0.091320		0.073709	0.071881	-0.150543	-0.778262	-0.491656	1.000000	0.115193
Sex_male	-0.688371	0.124617	0.057627	-0.109609	-0.213125	-0.206863	-0.066564	-0.088651	0.115193	1.000000

De uma forma visualmente mais apresentável:



Podemos observar uma forte correlação entre Fare e PClass, que aqui é negativa pois quanto maior a classe, menor seu valor numérico (primeira classe = 1, e assim por diante). Outro fato interessante é a correlação da classe com o porto de embarque e também com o sexo. Além disso há uma correlação notável entre o preço da passagem e a idade e o preço da passagem a quantidade de parentes à bordo. Por fim, os gráficos mostram mais uma curiosidade, que passageiros mais velhos tenderam à viajar sozinho (correlação negativa entre Age e SibSp e entre Age e Parch), o que pode ser explicado pelas crianças estarem acompanhadas pelos pais.

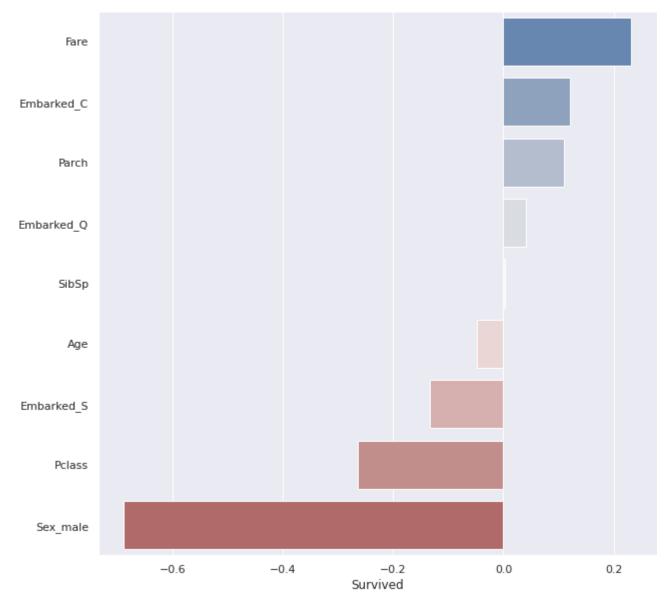
Contudo as correlações mais importantes são as entre a coluna Survived, nossa coluna target, e as demais:

```
aux_corr = corr['Survived'].drop('Survived')#.sort_values(ascending=False)
aux_corr = aux_corr.sort_values(ascending=False)
print(aux_corr)
> output:
```

```
Fare 0.232247
Embarked_C 0.121156
Parch 0.108919
Embarked_Q 0.040950
SibSp 0.002370
Age -0.048806
Embarked_S -0.133020
Pclass -0.264710
Sex_male -0.688371
```

#### Analisando graficamente:

```
sns.barplot(
    x = aux_corr,
    y = aux_corr.index,
palette='vlag');
```

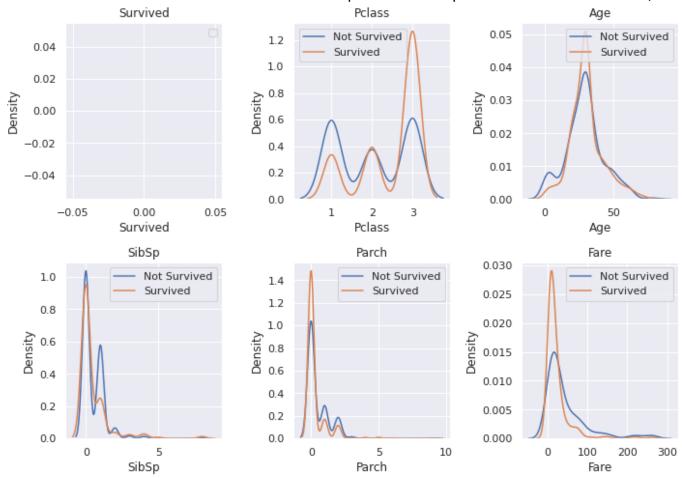


podemos observar então uma maior mortalidade entre homens e uma maior taxa de sobrevivência entre aqueles que pagaram mais por sua passagem. Além disso há uma correlação alta com o porto de embarque, que é explicada pela correlação destas colunas com a coluna Fare.

# Gráfico de Densidades das variáveis numéricas separadas pela coluna *Target*:

Por fim, observando a densidade, podemos observar novamente a confirmação das correlações, além de notar que uma pequena quantidade de irmãos possui influência na sobrevivência, enquanto muitos irmãos ou nenhum não faz diferença. Além disso a

influência da idade na sobrevivência diminui após a mesma passar da média (30 anos).



# 2. Modelos

Na execução do trabalho, utilizei os seguintes modelos:

- K-Nearest Neighbors (sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier);
- K-Nearest Neighbors (implementação própria);
- Regressão Logística (sklearn.linear\_model.LogisticRegression);
- Support Vector Machine Classifier (sklearn.svm.LinearSVC)
- Stochastic Gradient Descent (sklearn.linear\_model.SGDClassifier)
- Gaussian Process Classifier (sklearn.gaussian\_process.GaussianProcessClassifier)
- Decision Tree Classifier (sklearn.tree.DecisionTreeClassifier)
- Random Forest Classifier (sklearn.ensemble.RandomForestClassifier)
- Perceptron (sklearn.linear\_model.Perceptron)

Para a escolha dos melhores hiperparâmetros utilizei Randomized Seach CV (sklearn.model\_selection.RandomizedSearchCV). A preferência pelo mesmo ao invés do Grid Search CV foi por conta da velocidade de execução, já que ao testar alguns modelos com Grid Search o tempo de execução foi de horas. Portanto optei por testar uma maior

diversidade de modelos em detrimento de talvez não ter a combinação mais otimizada de hiperparâmetros.

Os modelos foram treinados usando uma divisão de 70% do dataset para treino e 30% para teste, resultando em 916 linhas para treino e 393 linhas para teste.

# 2.1. K-Nearest Neighbors (Implementação Própria)

Por conta da simplicidade do algoritmo de KNN, decidi por implementar manualmente o algoritmo para testar o mesmo:

```
class KnnClassifier:
        def __init__(self, k:int = 5) -> None:
                self.k = k
                self.distances = distances
        def fit(self, x_train: pd.DataFrame, y_train: pd.Series) -> None:
                self.x_train = x_train
                self.y_train = y_train
        def predict(self, x_test: pd.DataFrame) -> pd.Series:
                y_pred = []
                for idx, x in x_test.iterrows():
                        # calculate the distances
                        distances = np.sqrt(np.sum((self.x_train - x)**2,
axis = 1))
                        # sort the distances
                        knn_idx = distances.argsort()[:self.k]
                        # get the labels of the K nearest neighbors
                        knn_labels = self.y_train.iloc[knn_idx]
                        # get the label for the datapoint
                        y_pred.append(knn_labels.value_counts().idxmax())
                return pd.Series(y_pred, index = x_test.index)
# Testing for some values of K
for k in [1, 3, 5, 10, 15, 20, x_train.shape[0]]:
        knn = KnnClassifier(k)
        knn.fit(x_train, y_train)
        prediction = knn.predict(x_test)
```

```
print(f'Implemented KNN with {k} neighbors:
{accuracy_score(prediction, y_test)}')
```

Accuracies do modelo implementado:

Accuracies da implementação do sklearn:

```
Sklearn KNN with 1 neighbors: 0.6513994910941476
Sklearn KNN with 3 neighbors: 0.6895674300254453
Sklearn KNN with 5 neighbors: 0.6921119592875318
Sklearn KNN with 10 neighbors: 0.6615776081424937
Sklearn KNN with 15 neighbors: 0.6717557251908397
Sklearn KNN with 20 neighbors: 0.6564885496183206
Sklearn KNN with 916 neighbors: 0.5648854961832062
```

O modelo que implementei apresentou uma acurácia levemente melhor para a maioria dos valores de k testados, contudo a minha versão demorou em torno de 4.4 segundos para terminar a execução de todos os valores de k, em contrapartida ao modelo do *sklearn* que levou 0.3 segundos para a mesma aplicação.

# 2.2. K-Nearest Neighbors (sklearn)

Parâmetros testados:

weigths diz respeito ao cálculo da "distância" entre vizinhos;

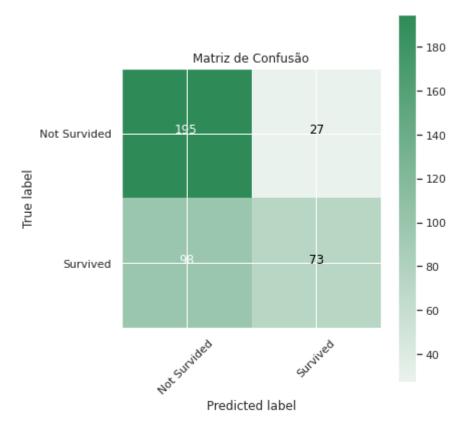
- algorithm diz respeito ao algoritmo utilizado para o cálculo da "distância" entre vizinhos;
- p = 1 calcula a distância como manhattan distance e p = 2 calcula a distância como distância euclidiana.

```
choose_knn = model_selection.RandomizedSearchCV(KNeighborsClassifier(),
params, cv=cv, scoring='accuracy', n_jobs=-1).fit(x_train, y_train)

print(f'best score: {choose_knn.best_score_}')
print(f'best params: {choose_knn.best_params_}')

> best score: 0.7270289855072464
> best params: {'weights': 'uniform', 'p': 1, 'n_neighbors': 10, 'algorithm': 'ball_tree'}
```

Treinando um modelo com os melhores parâmetros:



# 2.3. Regressão Logística

Parâmetros Testados:

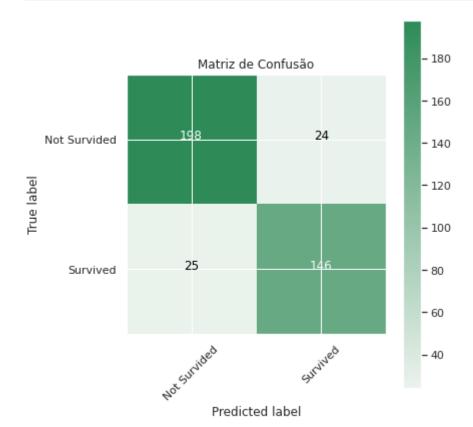
- penalty diz respeito à norma da penalidade, sendo L1, L2, ambas (elasticnet) ou nenhuma (none);
- tol (tolerância) diz respeito ao critério de parada;
- c diz respeito ao inverso da força de regularização. Como em SVM, valores menores especificam uma maior regularização;
- solver diz respeito ao algoritmo utilizado no problema de otimização;

```
choose_regression = model_selection.RandomizedSearchCV(LogisticRegression(),
params, cv=cv, scoring='accuracy', n_jobs=-1).fit(x_train, y_train)

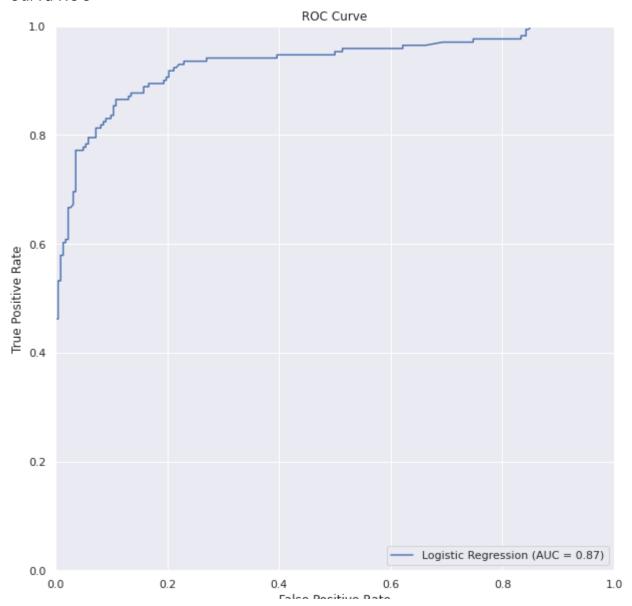
print(f'best score: {choose_regression.best_score_}')
print(f'best params: {choose_regression.best_params_}')
```

```
> best score: 0.846207729468599
> best params: {'tol': 0.01, 'solver': 'lbfgs', 'penalty': 'none',
'multi_class': 'multinomial', 'C': 0.001}
```

#### Treinando com os melhores parâmetros:



#### Curva ROC:



# 2.4. Support Vector Machine Classifier

Parâmetros testados:

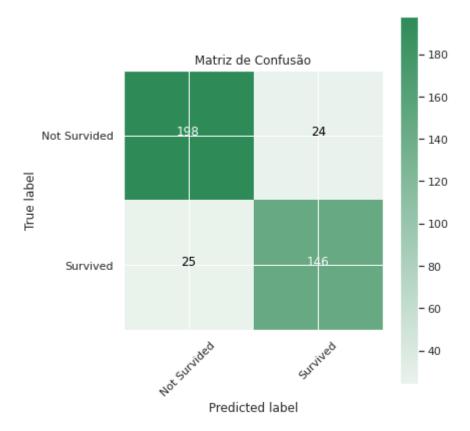
- kernel diz respeito ao tipo do kernel a ser usado pelo algoritmo;
- c diz respeito ao parâmetro de regularização com penalidade L2;
- degree diz respeito ao grau da função polinomial do kernel;

 gamma diz respeito ao coeficiente do kernel para os kernels rbf, polinomial (poly) e sigmóide.

Como o código utilizado para a escolha de parâmetros e avaliação se repete apenas mudando o modelo utilizado, irei apenas anexar os resultados a partir deste modelo.

Utilizando os melhores parâmetros:

```
best_svc = SVC(
         kernel='linear',
         C=3.0,
         degree=5,
         gamma=0.021544346900318846,
         max_iter=-1
         shrinking=True,
         tol=0.001
         probability=False,
         cache_size=200,
         random_state=0
).fit(x_train, y_train)
{\tt classifier\_evaluation}({\tt best\_svc}, \ {\tt x\_test}, \ {\tt y\_test})
> ROC Score: 0.8728465307412675
> Accuracy Score: 0.8753180661577609
> Average Precision Score: 0.7968777654358917
> f1 Score: 0.8563049853372433
```



## 2.5. Stochastic Gradient Descent

Parâmetros Testados:

```
params = {
        'loss': [
                'hinge',
                'log_loss',
                'log',
                'modified_huber',
                'squared_hinge',
                'perceptron',
                'squared_error',
                'huber',
                'epsilon_insensitive',
                'squared_epsilon_insensitive'
        ],
        'penalty': ['l2', 'l1', 'elasticnet'],
        'alpha': np.logspace(-5, 0, 7),
        'shuffle': [True, False],
        'learning_rate': ['constant', 'optimal', 'invscaling', 'adaptive'],
}
```

• loss diz respeito a função de perda a ser utilizada;

- alpha constante que multiplica o termo da regularização;
- shuffle booleano que indica se os dados devem ou não ser embaralhados após cada epoch;
- learning\_rate diz respeito à taxa de aprendizado do modelo.

## **Detalhes Técnicos:**

O trabalho foi realizado utilizando *jupyter notebook*, versão 7.1.0 com um kernel python em sua versão 3.8.10 64-bit.

Abaixo seguem as bibliotecas utilizadas:

#### **Modelos**

```
sklearn 1.0.1
```

#### Manipulação de Dados

```
pandas 1.3.5
numpy 1.21.4
scipy 1.7.3
```

#### Visualização

```
seaborn 0.11.2
matplotlib 3.5.1
```