Uczenie Maszynowe

Wstępne sprawozdanie z Projektu

Temat projektu: Techniki oceny klasyfikacji dla zestawów danych dotyczących raka piersi

Mateusz Krakowski

Bartosz Latosek

24 kwietnia 2023

Spis treści

1 Opis Projektu

1.1 Treść zadania

Zaimplementuj techniki oceny klasyfikacji dla zestawów danych dotyczących raka piersi, które dostępne są w: http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets

1.2 Użyte dane

Wykorzystaliśmy dane z datasetu Breast Cancer Data Set [LINK].

1.3 Wstępna Analiza danych

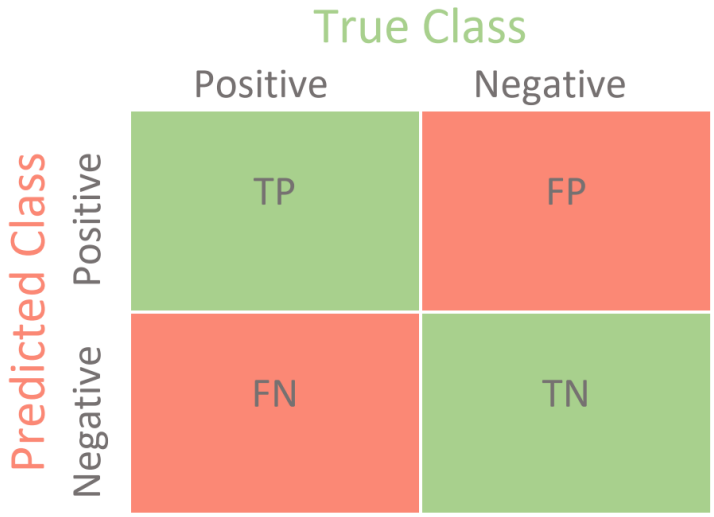
Pełna analiza danych znajduje się w pliku data_analisis.ipynb, tutaj zamieszczamy skrót naszych odkryć. Wniski z analizy danych:

- posiadamy dane 286 osób, jest to mało aby nauczyć dobry klasyfikator, ale nie będziemy się w tym projekcie na samym uczeniu dobrych klasyfikatorów, a na wizualizacji miar jakości modeli.
- Klasą większościową są osoby u których nie wystąpiły zdarzenia rekurencyjne (no-recursive-events), stanowią 70% całego datasetu. Reszta to osoby u których wystąpiły zdarzenia rekurencyjne.
- Udało nam się zauważyć silną korelację między wiekiem a posiadaniem menopałzy ge40 oraz niski wiek jest skorelowany z posiadaniem menopauzy premeno.
- Najbardziej skorelowane z atrybutem klasy są: deg-malig, node-caps, inv-nodes. Jest to jednak korelacja na poziomie 0.3, dodatkowo trzeba pamiętać że korelacja nie oznacza przyczynowości.

1.4 Miary jakości modelu

1.4.1 Macierz pomyłek

Macierz zawierająca 4 wartości mówiące o tym jak model poradził sobie z klasyfikacją danych



Rysunek 1: Macierz Pomyłek

Na podstawie macierzy pomyłek obliczane poniższe miary jakości.

1.4.2 Accuracy

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FN + FP}$$

Accuracy niesie informację o tym, jaki procent próbek testowych został poprawnie sklasyfikowany przez model.

1.4.3 Recall(Sensitivity)

$$Recall = Sensitivity = \frac{TP}{TP + FN}$$

Recall mówi nam, jak model radzi sobie z klasyfikowaniem przypadków pozytywnych danej klasy.

1.4.4 Specificity

$$Specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

Specificity mówi nam, jak model radzi sobie z klasyfikowaniem przypadków negatywnych danej klasy.

1.4.5 Precision

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Precision mówi nam, w jakich proporcjach model klasyfikuje próbki jako pozytywne w zależności od faktycznej klasy próbki.

1.4.6 Miara F1

$$F1 = \frac{2 * Precision * Recall}{Precision + Recall}$$

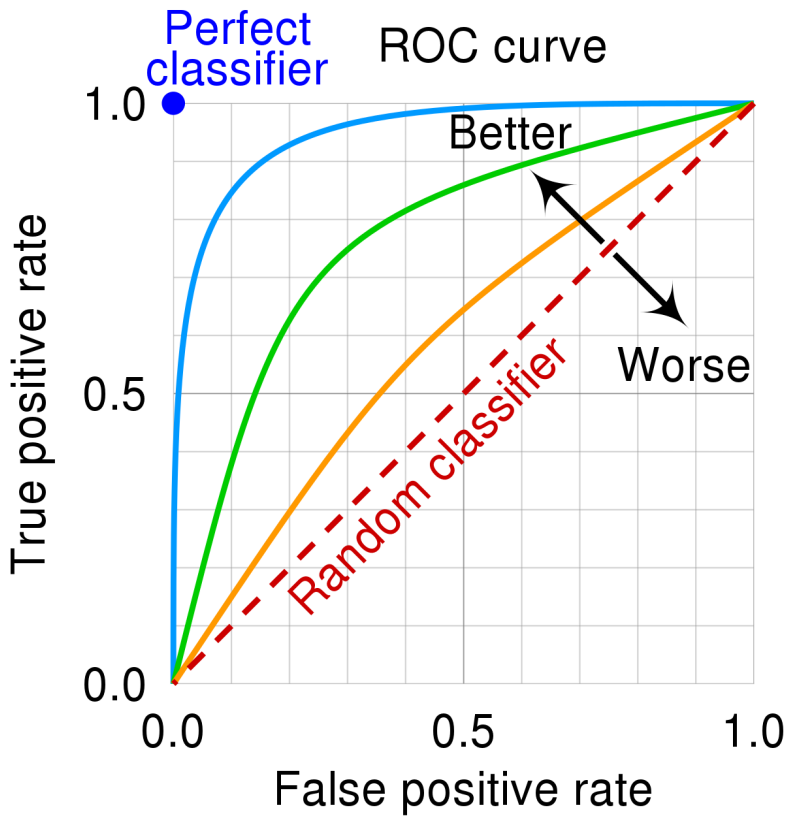
F1 score mówi nam, jak dobrze model radzi sobie z klasyfikacją przypadków TP, przy tym minimalizując liczbę przypadków FP i FN.

1.4.7 Support

$$Support = TP + FN$$

Support mówi nam ile w danych ewaluacyjnych jest osób posiadających rekursywne zdarzenia.

1.4.8 Krzywe ROC i AUC



Rysunek 2: Krzywa ROC

Krzywa rok pokazuje nam zależność TPR(true positive rate) od FPR(false positive rate).

$$TPR = Recall = Sensitivity = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$FPR = 1 - Specificity = \frac{FP}{FP + TN}$$

Rysuje się ją poprzez sprawdzenie, jak algorytm klasyfikuje przypadki dla wybranych poziomów cutoff. Cutoff to liczba z zakresu [0, 1] która definiuje które predykcje modeli są klasyfikowane jako klasa pozytywna lub negatywna. AUC to pole pod wykresem narysowanym w powyższy sposób.

1.5 Założenia odnośnie metryk oceny

W naszym zadaniu samo accuracy nie będzie dobrym wyznacznikiem jakości modelu. Ważne będzie, aby przy ocenie wziąć pod uwagę Sensitivity oraz Specificty. To, aby ustalić która z tych dwóch metryk jest ważniejsza, musi odpowiedzieć pytanie czy jesteśmy bardziej skłonni dopuścić do klasyfikacji przypadków fałszywie negatywnych, czy fałszywie pozytywnych. Osobiście zdaje mi się, że większe straty ponosimy w przypadku klasyfikacji FN, przypadki FP zawsze można wykluczyć w dogłębnym badaniu, na przykład sięgając po opinię specjalistów lub innego algorytmu. Dlatego zdaje mi się, że specificity będzie w tym problemie ważniejszą metryką. Dodatkowo dobrymi miarami do porównania algorytmów będzie miara F1 oraz krzywe ROC i AUC.

1.6 Modele badane miarami jakości

1.6.1 model losowy

Model losowy zwracający wartość losową z zakresu [0, 1], oznaczającą prawdopodobieństwo sklasyfikowania osobnika jako przynależnego do klasy 1 (wystąpiły zdarzenia rekurencyjne).

1.6.2 naiwny Bayes

Naiwny klasyfikator Bayesowski to metoda klasyfikacji, która opiera się na teorii Bayesa. Pozwala ona na przypisanie nowych obiektów do jednej z kilku klas na podstawie cech, które posiadają.

Działanie naiwnego klasyfikatora Bayesowskiego polega na wyznaczeniu prawdopodobieństwa przynależności nowego obiektu do każdej z klas na podstawie jego cech. **Klasyfikator zakłada, że cechy obiektów są niezależne od siebie**, co może być uproszczeniem, ale w wielu przypadkach działa wystarczająco dobrze.

Aby wyznaczyć prawdopodobieństwo przynależności nowego obiektu do danej klasy, naiwny klasyfikator Bayesowski korzysta z wcześniej zebranych danych treningowych, w których już zostały przyporządkowane klasy dla innych obiektów o znanych cechach. Dzięki temu można wyznaczyć, jakie cechy są typowe dla danej klasy i jakie prawdopodobieństwo przynależności do niej mają obiekty posiadające te cechy. W celu uproszczenia stworzenia modelu wykorzystaliśmy GaussianNB z modułu *sklearn.naive_bayes*.

1.6.3 drzewo decyzyjne

W drzewie decyzyjnym kolejne warunki są reprezentowane jako węzły, a decyzje jako gałęzie, które łączą węzły. Drzewo zaczyna się od węzła nadrzędnego, nazywanego korzeniem, który reprezentuje główne pytanie.

Z każdego węzła wychodzą gałęzie prowadzące do kolejnych węzłów, które reprezentują różne możliwe decyzje lub wyniki. Przechodząc w dół po drzewie, na każdym etapie podejmujemy decyzje na podstawie cech lub zmiennych, aż osiągniemy końcowy węzeł, który reprezentuje ostateczną decyzję lub w naszym przypadku - klasę. W celu uproszczenia stworzenia modelu wykorzystaliśmy DecisionTreeClassifier z modułu *sklearn.tree.DecisionTreeClassifier*.

1.6.4 XGBoost

Gradient boosting to technika uczenia maszynowego, która polega na budowaniu sekwencji słabych modeli predykcyjnych i łączeniu ich w silny model. Słabe modele są trenowane iteracyjnie w celu minimalizacji funkcji kosztu, a każdy kolejny model dostosowuje się do reszt, jakie pozostawiają poprzednie modele.

XGBoost implementuje tę technikę w sposób zoptymalizowany pod kątem wydajności i skuteczności. W przeciwieństwie do innych metod gradient boosting, XGBoost wykorzystuje regresję logistyczną jako funkcję kosztu, co zapewnia stabilność procesu uczenia. W celu uproszczenia stworzenia modelu wykorzystaliśmy XGBoost z modułu *xgboost.xgb*.

1.6.5 Sieć neuronowa

W celu uproszczenia zdecydowaliśmy się na implementację własnej sieci neuronowej. Posiada ona dwie warstwy ukryte i jedną warstwę wyjściową. W celu optymalizacji i zapobieganiu przeuczeniu - pomiędzy warstwami ukrytymi wykorzystaliśmy metodykę dropoutu oraz batchnorm.

1.6.6 Prosta sieć neuronowa

W celu porównania z bardziej zaawansowaną siecią neuronową, wprowadziliśmy prostszy model - sieć składającą się z jednej warstwy ukrytej i warstwy wyjściowej, bez ukrytego dropoutu czy batchnormingu.

2 Struktura projektu

2.1 Dane

Wszystkie modele klasyfikujące raka piersi, są trenowane a następnie sprawdzane przy użyciu danych, które dostępne są w: http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.

Do reprezentacji danych w projekcie używamy abstrakcji w postaci klasy Data. W niej jako atrybuty przechowywane są surowe dane jak i obrobione dane, wymagane przez niektóre z modeli. W wyniku obróbki danych atrybuty nominalne zakodowane są za pomocą one-hot encoding. Dodatkowo uprościliśmy dane reprezentowane przez zakres do pojedyńczej wartości będącej środkiem przedziału. Następnie wszystkie tak obrobione dane zostały znormalizowane do zakresu [0, 1].

2.2 Modele

Wszystkie modele w projekcie dziedziczą po abstrakcyjnej klasie BinaryClassificationModel, wprowadzającej wygodny w użyciu interfejs do późniejszej analizy i oceny jakości modeli. Wszystkie modele wewnętrznie wyznaczają miary oceny jakości a następnie przechowują je w atrybutach, do których w prosty sposób można się dostać.