

Wykrywanie występowanie chorób serca z
wykorzystaniem wybranych modeli uczenia
maszynowego

Magdalena Szulc

Toruń, 2022-05-01

Spis Treści

Abstrakt	1
Wstęp	2
Cel i zakres pracy	4
1 Wprowadzenie teoretyczne	5
1.0.1 Klasyfikacja a Regresja	7
1.1 Ścieżka działania algorytmów uczenia maszynowego nadzorowanego	7
1.2 Dane	8
1.2.1 Terminologia	8
1.2.2 Repozytorium uczenia maszynowego UCI	8
1.2.3 Wstępna obróbka danych	9
1.3 Wybrane algorytmy uczenia maszynowego nadzorowanego	12
1.3.1 Losowe lasy decyzyjne	12
1.3.2 Maszyna wektorów nośnych	14
1.3.3 K najbliższych sąsiadów	15
2 Opis praktycznej części projektu	17
2.1 Narzędzia i biblioteki zastosowane w projekcie	17
2.1.1 Python	17
2.1.2 Scikit-learn	17
2.1.3 Środowisko wykonania	18
2.2 Moduły projektu:	18
2.3 Trening algorytmu	19
2.3.1 Wstęp	19
2.3.2 Przygotowanie danych	19
2.3.3 Trening algorytmu	20
2.3.4 Wizualizacja wyników	22
2.4 Opis działania aplikacji webowej	24
2.5 Porównanie działania modeli	25
2.5.1 Wskaźniki wydajności	25
2.5.2 Zestawienie efektywności działania algorytmów	26
2.5.3 K-najbliższych sąsiadów	27
2.5.4 Losowe lasy decyzyjne	29
2.5.5 Maszyna wektorów nośnych	31

3 Podsumowanie

35

Bibliografia

36

Abstrakt

The aim of the work is to compare selected algorithms of supervised machine learning and build a model based on medical data, which diagnoses the presence or absence of cardiovascular disorders.

Medical data is distinguished by the fact that it is difficult to access, in most cases it is restricted information not available for public use. Therefore, a key step is to choose the features taken into account when creating the model. The data obtained from the UCI repository has already undergone pre-processing. The dataset itself, due to its small size, allows checking effects of algorithms without getting rid of redundant and insignificant features.

The main motive is to answer the question of how data deficiency strongly influences the outcome and whether there is a difference between the use of selected supervised learning algorithms requires a comparison of the difficulty level of creating a model, accuracy, complexity and time to obtain an answer.

Wstęp

Uczenie maszynowe jako spopularyzowana dziedzina metod uczenia, zainteresowanie sobą w dużej mierze zawdzięcza rozwojowi procesorów graficznych pozwalających na wykorzystanie algorytmów w optymalnym czasie. Ze względu na chodliwość tematu, powstało nowe oprogramowanie, jak i przystosowania ułatwiające wydajną pracę z obszernymi zasobami danych. Pojęcie sztucznej inteligencji pochodzi od próby odtworzenia ludzkiego sposobu myślenia, jedną z bardziej znanych historycznie postacią z tym związaną jest psycholog Frank Rosenblatt z Cornell University. Badacz przyczynił się do powstania projektu zbudowania maszyny o nazwie “perceptron” mającej za zadanie rozpoznawać litery i jest prawozorem nowoczesnych sztucznych sieci neuronowych. To dzięki jego badaniom nad perceptronem rozpropagowany został koncept algorytmu uczenia w skończonej liczbie wywołań. Z czasem liczba przetwarzanych informacji stopniowo się zwiększała dzięki zastosowaniu procesorów równoległych oraz wydajności pamięci. Wartą wspomnienia datą jest rok 2006, w tym roku zaprezentowano opensource’owy odpowiednik MapReduce od *Google*, który dał sposobność do przenoszenia między procesorami obróbki Big Data. Rok ten jest również znaczący ze względu na wydanie przez Nividia procesora graffitiing monopolizującego rynek uczenia maszynowego. Zmniejszenie kosztów pamięci RAM zaowocowało powstaniem kolejnych algorytmów uczenia, a istniejące podejścia są sukcesywnie ulepszone.[[1],[2]

Sztuczna inteligencja wśród szerokiego zakresu swoich zastosowań może zostać wykorzystana do analizy bardziej lub mniej złożonych danych medycznych, w celu przewidzenia wystąpienia choroby u konkretnej osoby, bez udziału procesu myślowego od strony specjalisty. Diagnoza medyczna to rozległa dziedzina, z której zasoby pod postacią danych tekstowych czy obrazów idealnie nadają się do analizy przez uczenie maszynowe. Zadanie postawienia diagnozy to typowe zagadnienie klasyfikacji, ale nie jedyny sposób wykorzystania. Przykładem systemu uczącego może być wycena akcji na giełdzie na podstawie danych z poprzedniego kwartału lub optymalizacja strony na podstawie historii odwiedzeń .[3]

Do tego przeznaczenia istnieje możliwość zastosowania uczenia nadzorowanego (ang. *supervised learning*) tj. rodzaj uczenia maszynowego zakładający istnienie zbioru danych testowych zawierających odpowiedzi, na których podstawie wyszukiwane są zależności, cechy znaczące oraz budowany jest w ten sposób model służący przykładowo do przewidywania przyszłych wartości.

W przypadku danych dotyczących chorób zależności typujące występowanie choroby bazują na podstawie konkretnych wyników badań zgromadzonych w repozytorium UCI.

W dzisiejszych czasach choroby sercowo-naczyniowe stanowią najczęstszą przyczynę zgonów, a liczba osób cierpiących na te dolegliwości stale rośnie. Głównymi przyczynami zachorował-

ności diagnozowanymi przez specjalistów są niski poziom świadomości i profilaktyki chorób serca. Dlatego prowadzone są intensywne prace nad zwiększeniem dostępności badań, które wspomogą diagnostykę kardiologiczną na jak najwcześniejszym etapie[4].

Powodem szukania dokładniejszych sposobów diagnozowania są również wysokie koszty leczenia generowane przez choroby układu krwionośnego. Według analityków firmy consultingowej KPMG [5] w 2011 r. koszty diagnostyki i terapii chorób serca wyniosły ponad 15 miliardów polskich złotych.

Uczenie maszynowe poprzez przetwarzanie dużych zasobów klinicznych danych historycznych pod kątem zależności przyczynowo skutkowych, może zostać wykorzystane do wczesnej diagnostyki lub wspomagania leczenia pacjentów [6].

Słowa kluczowe: uczenie maszynowe, uczenie nadzorowane, lasy losowe, maszyna wektorów nośnych, k-najbliższych sąsiadów

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest porównanie wybranych algorytmów uczenia maszynowego nadzorowanego, przy założeniu że dane wejściowe są wybrakowane, a w rezultacie zbudowanie modelu który na podstawie danych medycznych wystawia diagnozę o występowaniu zaburzeń sercowo-naczyniowych lub ich braku.

Dane medyczne wyróżniają się tym, że trudno uzyskać do nich dostęp, najczęściej nie są to informacje, które się udostępnia do użytku publicznego, z tego powodu, kluczowym krokiem jest wybór cech branych pod uwagę przy tworzeniu modelu. Dane pozyskane z repozytorium UCI przeszły już wstępną obróbkę, sam dataset ze względu na swoje niewielkie rozmiary pozwala na sprawdzenie działań algorytmów bez pozbywania się nadmiarowych i mało znaczących cech.

Zatem odpowiedź na pytanie jak wybrakowanie danych mocno wpływa na rezultat i czy istnieją różnicę między zastosowaniem wybranych algorytmów nauczania nadzorowanego wymaga przedstawienia porównania łatwości tworzenia modelu, dokładności, złożoności oraz czasu uzyskania odpowiedzi.

W pracy opisano następujące algorytmy uczenia nadzorowanego:

- losowe lasy decyzyjne (ang. *random decision forests*)
- maszyna wektorów nośnych (ang. *support vector machines*, SVM)
- k-najbliższych sąsiadów (ang. *k-nearest neighbours*, KNN)

Chapter 1

Wprowadzenie teoretyczne

Omówienie teoretyczne rozpoczynają definicje podstawowych pojęć wykorzystywanych w dalszych częściach, zaczynając od Algorytmu.

Algorytm to pojęcie matematyczne odpowiadające za szereg działań prowadzących do uzyskania żadanego rozwiązania. Bazując na wynikach działań, krokami opisujemy np.: problem znajdowania najkrótszej drogi lub tłumaczenie języka na podstawie analizy mowy.

Uczenie maszynowe (ang. *machine learning*, ML) to dziedzina zajmująca się tworzeniem modeli do analizy obszernych zasobów danych. Modele utworzone za pomocą algorytmów uczenia maszynowego są w stanie z wysokim prawdopodobieństwem wystawić predykcję lub dokonać klasyfikacji na temat zadanego problemu.

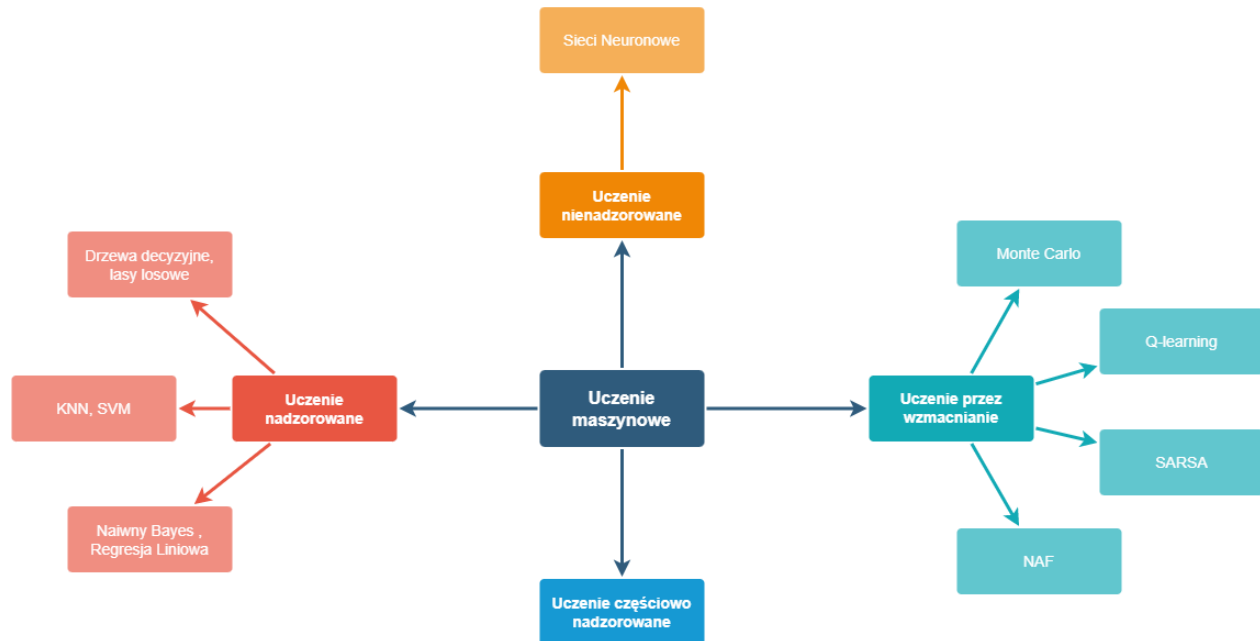
Model *klasyfikacyjny* służy do przewidzenia etykiety klasy poprzez mapowanie na już z góry ustalony jednowymiarowy podział, model *regresyjny* natomiast mapuje przestrzeń, ustalając liczbę klas podziału oraz grupując wartości. [7] Istnieje możliwość przekształcenia problemu regresyjnego na klasyfikację i odwrotnie poprzez zamianę wartości oczekiwanego wyniku. Taką modyfikację zastosowano w praktycznej części projektu. Wyniki dla danych występowały w wartościach od 0 do 4, dla wartości $<1,4>$ przypadek testowy uznawany był za sklasyfikowany pozytywny (chory), dlatego przekształcenie z modelu regresyjnego do modelu klasyfikacyjnego polega na konwersji wyników do wartości liczbowych 0 - brak stwierdzenia stanu chorobowego oraz 1 - stwierdzenie o chorobie układu krążenia.

Sposób wykorzystania segreguje algorytmy uczenia maszynowego na dwie kategorie, jednak powszechnie stosowanym podziałem jest podział zależnie od sposobu *trenowania* algorytmu. Algorytmy dzieli się na m.in.: uczenie nadzorowane, uczenie częściowo nadzorowane, uczenie bez nadzoru oraz uczenie przez wzmacnianie[8].

Dobór typu uczenia oraz algorytmu uzależniony jest od danych wejściowych, oraz oczekiwanego rezultatu. Dane wyjściowe mogą przyjmować format odpowiedzi TAK/NIE, klasyfikacji do danego zbioru czy np. procentowej oceny ryzyka.

Uczenie maszynowe nadzorowane (ang. *supervised learning*) to klasa algorytmów uczenia maszynowego, która bazuje na poetykietowanych danych. Nadzór polega na porównaniu rezultatów działania modelu z wynikami, które są zawarte w danych wejściowych (*dane oznaczone*) [9]. Algorytm po osiągnięciu żądanej efektywności jest w stanie dokonać klasyfikacji

przykładu, dla którego nie posiada odpowiedzi. Sprawdza się to obecnie w rekomendacji produktów oraz diagnozie chorób. Z matematycznego punktu widzenia dopasowanie danych oznaczonych nazywane jest aproksymacją funkcji[8].



Uczenie maszynowe bez nadzoru (ang. *unsupervised learning*) to klasa algorytmów uczenia maszynowego, która wiodąco rozwiązuje problemy grupowania. Dane dostarczane do modelu nie zawierają *oznaczeń*, zatem nauczanie polega na wyciąganiu konkluzji z poprzednio wykonanych iteracji. Na skuteczność modeli budowanych w oparciu o uczenie bez nadzoru wpływ ma rozmiar dostarczonego do nauki zbioru danych, im jest on większy, tym bardziej wzrasta efektywność. Takie zbiory można uzyskać rejestrując dane na bieżąco dlatego do najczęstszych zastosowań tej klasy algorytmów zaliczamy rozpoznawanie mowy czy obrazu[8].

Uczenie maszynowe przez wzmocnienie (ang. *reinforcement learning*) to klasa algorytmów uczenia maszynowego, której nauczanie nie opiera się na danych wejściowych czy wyjściowych a rezultatami otrzymanymi podczas testu nazywanych tzw. sygnałami wzmocnienia, które mogą przyjmować wartość pozytywną lub negatywną. Algorytm generując dane wejściowe dostosowuje reguły by uzyskać zwrotnie sygnał pozytywny w jak największej liczbie przypadków[10].

Uczenie częściowo nadzorowane (ang. *semi-supervised learning*) to klasa algorytmów uczenia maszynowego która wykorzystuje zbiór danych w większości niepoetykietowany na podstawie których tworzony jest model[11], wykorzystywany głównie w przypadkach niewydajności zastosowania osobno modeli nadzorowanych i nienadzorowanych. Zastosowanie tej klasy algorytmów pozwala również na maksymalizację wykorzystania zebranych informacji [2] .

Uczenie nadzorowane przedstawiając oficjalną matematyczną definicję:

$$DL = ((x_i, y_i))_1 \quad \text{gdzie} : i=1$$

(x_i, y_i) to punkt z zakresu $x_i \in X$ oznaczony etykietą y_i dla danych wejściowych oznaczonych jako X .

Zbiór (x_i, y_i) to tzw. dane uczące, na podstawie których metody uczenia próbują wywnioskować funkcję, która ustali y dla nieoznakowanego x .

Większy zasób punktów sprawdzający działanie, czyli dane testowe definiujemy następująco[12]:

$$DU = (x_i)_{l+1}^u \quad \text{gdzie} \quad : \quad i=l+1$$

1.0.1 Klasyfikacja a Regresja

Oba przedstawione poniżej typy sysytematyzją w oparciu o dostarczone dane wejściowe i mają one wspólną część polegającą na budowaniu modelu separującego kategorie docelowe w użyteczny i dokładny sposób.[2]

Klasyfikacja - decyduje o przynależności do zbioru, kategorii, grupy lub klasy.

Regresja - daje ciągłą prognozę korelacji między zmiennymi, standardowym przykładem zastosowania jest prognoza pogody. Realne pomiary temperatury, prędkości wiatru, ciśnienia wpływają na finalną odpowiedź. Sama regresja dzieli się również na kategorie ze względu na skomplikowanie, najprostszym przykładem jest regresja liniowa.

Analogiczne typy i stanieją dla uczenia bez nadzoru jak na przykład *grupowanie*, które klasyfikuje dane w zbiory. Rozbieżność z klasyfikacją polega na wykorzystaniu do wykonania oceny korelacji podobnych cech, a nie wsadu danych testowych.

Redukcja wymiarowa to jak nazwa wskazuje pozbycie się nieistotnych atrybutów i odrzuceniu duplikatów, a co za tym idzie wymiaru data set'u. Dobrym przykładem byłoby tutaj analiza zawartości skrzynki pocztowej i szukanie spamu.

Podział osób na kategorie cierpiące na choroby sercowo-naczyniowe oraz zdrowe to dylemat klasyfikacyjny nadający się do rozwiązania za pomoc algorytmów uczenia maszynowego nadzorowanego i na nich skupia się dalsza część pracy.

1.1 Ścieżka działania algorytmów uczenia maszynowego nadzorowanego

Bazowy schemat budowania i oceniania modeli uczenia nadzorowanego to kolejno:

1. Przygotowanie danych.
2. Implementacja modelu.
3. Trening oraz ocena.

Wykorzystanie utworzonego modelu wymaga:

1. Zbudowania modelu oraz jego wytrenowania
2. Wykonania predykcji na danych, które nie posiadają oznaczenia[3]

Ten schemat można zastosować do dowolnego modelu uczenia, wykonanie kolejnych bloków zadaniowych różnić się będzie specyfiką dla danego modelu:

- przygotowanie danych dla algorytmów uczenia nadzorowanego musi zawierać również zebranie odpowiedzi/wyników dla danych testowych

- implementacja modelu za każdym razem jest specyficzna dla zastosowanego algorytmu, który również zależy od typu uczenia
- ewaluacja modeli regresyjnych różni się od ewaluacji modeli klasyfikacyjnych ze względu na wykorzystanie innych miar oceny dokładności
- zastosowanie modeli może posiadać wielorakie formy realizacji.

1.2 Dane

1.2.1 Terminologia

Analiza uczenia maszynowego wymusza stosowanie rozróżnienia przy pojęciach parametru i argumentu. Cechy, dla których szukamy optymalnych wartości, które stanowią podstawę modelu i ich dostrajanie wykonywane jest podczas treningu nazywane są parametrami i hiperparametrami. Argumenty natomiast to liczby znajdujące się w wierszach zbioru danych, które podlegają zmianie tylko podczas preprocesingu. Nazewnictwo hiperparametrów wykorzystywane jest w przypadku zastosowania dla nich walidacji krzyżowej.

Nadmierne dopasowanie (ang. overfitting)

Istnieje możliwość wytrenowania algorytmu tylko pod zadany zbiór testowy, wyniki dotyczące dokładności modelu, pomimo iż będą wysokie, nie będą świadczyły o rzeczywistej skuteczności, gdyż będą uwzględniały tylko pojedynczy przypadek zasymulowany daną próbką danych testowych. Przed wyborem cech do hiperparametryzacji warto sprawdzić macierz korelacji cech, aby nie wybrać tylko tych silnie ze sobą sprzężonych[13].

1.2.2 Repozytorium uczenia maszynowego UCI

Sensem wykorzystania uczenia maszynowego jest prognoza lub klasyfikacja rzeczywistych wartości z dużego zbioru danych, które mogą znaleźć zastosowanie w praktycznych dziedzinach. Im bardziej dokładne i rzeczywiste dane do testowania i tworzenia modelu tym większe prawdopodobieństwo otrzymania realnych wyników na końcu ścieżki uczenia.



[14]

W celu gromadzenia miarodajnej bazy dostępnych zbiorów danych testowych powstało repozytorium uczenia maszynowego UCI. Jak podaje strona informacyjna:

... było ono cytowane ponad 1000 razy, co czyni je jednym ze 100 najczęściej cytowanych „artykułów” w całej informatyce ... [14]

Repozytorium gromadzi dane z wielu rozbieżnych dziedzin, dane medyczne umieszczone w repozytorium nie zawierają wrażliwych danych pacjentów, a niektóre zbiory są poddane już wstępnej obróbce tak jak zbiór danych „Heart Disease Databases” wykorzystany w tym dokumencie, który powstał na podstawie realnych danych medycznych zebranych z lokalizacji:

1. Fundacja Cleveland Clinic [15]
2. Węgierski Instytut Kardiologii, Budapeszt [16]
3. V.A. Centrum medyczne, Long Beach, Kalifornia [15]
4. Szpital Uniwersytecki, Zurych, Szwajcaria [17].

1.2.2.1 Stratyfikacja

Wyróżniono 14 atrybutów spośród 76 zebranych do wykorzystania w algorytmach uczenia maszynowego, wszystkie z nich mają wartości liczbowe. Lista atrybutów wykorzystanych w algorytmie:

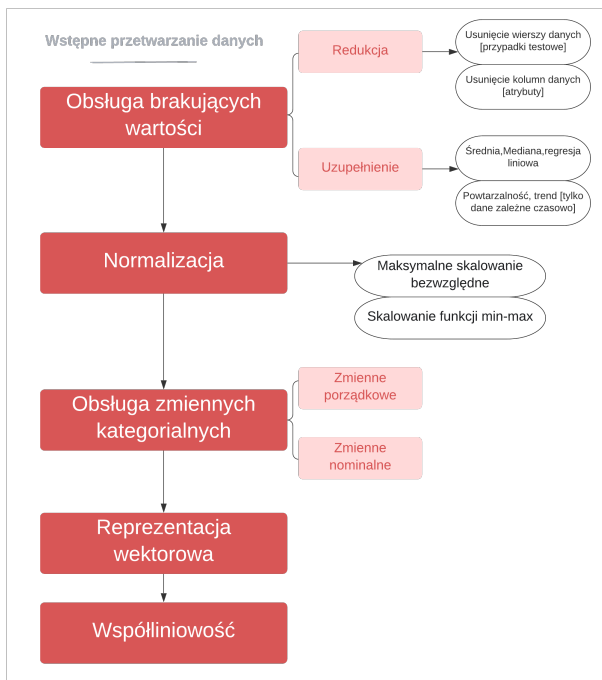
- wiek
- płeć
- rodzaj bólu w klatce piersiowej
- spoczynkowe ciśnienie krwi
- cholesterol w surowicy w mg/dl
- poziom cukru we krwi na czczo > 120 mg/dl
- spoczynkowe wyniki elektrokardiograficzne
- osiągnięto maksymalne tętno
- dławica piersiowa wywołana wysiłkiem fizycznym
- obniżenie odcinka ST wywołane wysiłkiem fizycznym w stosunku do odpoczynku
- nachylenie szczytowego odcinka ST ćwiczenia
- liczba głównych naczyń pokolorowanych fluorozopią
- skan serca z talem lub test wysiłkowy
- stan (brak choroby serca/choroba serca)

Rozkład chorób serca w danych testowych to 44.67% chorych, czyli 509 prób pozytywnych oraz 411 negatywnych. W danych testowych znajduje się 726 przypadków osób płci męskiej oraz 194 żeńskiej. Dla zachorowań widać nierówność, ale jest ona spowodowana rzeczywistą statystyką. Tylko u 25.77% badanych kobiet stwierdzono występowanie chorób wieńcowych, natomiast wśród badanych mężczyzn jest to aż 63.22%. [14]

W przypadku danych testowych z repozytorium UCI fakt, iż dane pochodziły z różnych lokalizacji ma duże znaczenie, gdyż od placówki medycznej zależy jakim badaniom poddani zostali pacjenci a co za tym idzie, w jakich kolumnach tabelarycznego przedstawienia będą mieć uzupełnione bądź puste wartości. Scalenie ze sobą wyników badań dostarcza większej różnorodności również dzięki temu że dane pochodzą z wielu krajów. Jeżeli zestaw wejściowy zostałby ograniczony do jednej lokalizacji to cecha, dla której nie uzupełniono wartości zostałaby pominięta podczas treningu ze względu na brak danych, co skutowało by uboższym modelem i możliwe, że pominięciem kluczowej cechy wpływającej na działanie.

1.2.3 Wstępna obróbka danych

Proces przetwarzania danych może składać się z wielu różnych kroków zależnie od typu, w uczeniu nadzorowanym operującym na danych tekstowo-liczbowych poprawne będzie zastosowanie schematu przedstawionego poniżej:



Po złączeniu można przeprowadzić szereg działań w celu sztucznego uzupełnienia pustych wartości bazując na wartościach, które już istnieją.

Obsługa brakujących wartości

Możliwościami obsługi brakujących wartości są: mniej polecana ze względu na utratę danych, redukcja zestawu danych lub uzupełnienie go zgodnie z wybranym przez siebie założeniem. Biblioteki do nauczania maszynowego dostarczają już gotowe rozwiązania do upuszczenia wierszy lub kolumn zawierających wartości *null*. Uzupełnienie danych inaczej *imputacja* rozwiązuje problem w mniej stratny sposób i tak samo, jak do redukcji są już gotowe rozwiązania w bibliotece *sklearn*.

Istnieją 4 różne strategie uzupełniania wykorzystujące proste matematyczne obliczenia takie jak:

- średnia,
- mediana,
- stała,
- najczęściej występująca wartość.

Do wyznaczenia wartości uzupełniających można również użyć regresji liniowej.

Standaryzacja

Przekształcenie danych również bazujące na statystycznych założeniach i również ustandaryzowane w popularnych bibliotekach. Dążymy, aby średnia wartość wynosiła 0, a odchylenie standardowe 1 dla liczbowych reprezentacji danych. Z matematycznego punktu widzenia wykonujemy działanie

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X - \bar{X})^2}{N - 1}}$$

[18]

Obsługa zmiennych kategorialnych

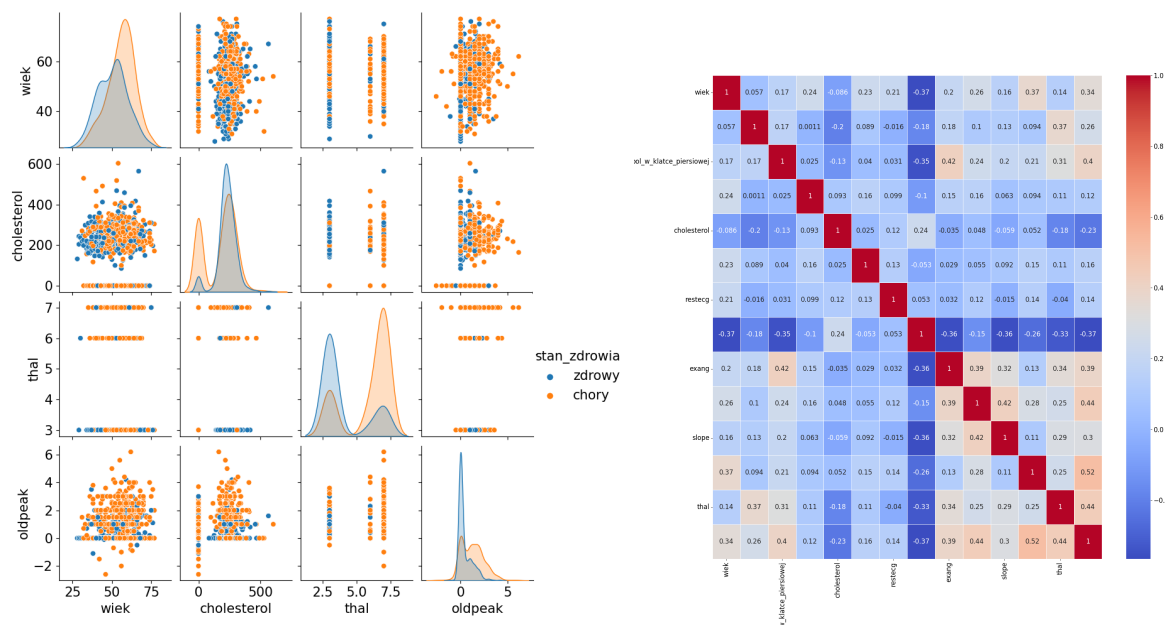
Cechy kategorialne dzielą się na dwie zasadnicze grupy ze względu na możliwość uporządkowania, dane takie jak wykształcenie, rozmiar podlegają mapowaniu, dane typu kolor lub płeć podlegają kodowaniu. W ten sposób dane kategorialne stają się wartościami liczbowymi.

Reprezentacja wektorowa

Obsługa danych kategorialnych pozwoliła zmapować/zakodować je w postaci liczbowej, ale można pójść o krok dalej i te same dane mieć w postaci 0 lub 1 na odpowiedniej kolumnie. Rozwiązanie reprezentacji wektorowej polega na utworzeniu tylu kolumn ile jest unikalnych wartości dla kategorii i wpisanie 0 lub 1 dla każdego rekordu danych [19].

Współliniowość cech

Znalezienie korelacji współliniowości polega na szukaniu liniowej zależności pomiędzy danymi, najłatwiej zauważyć to tworząc wykresy z danych testowych dla każdej pary [19].

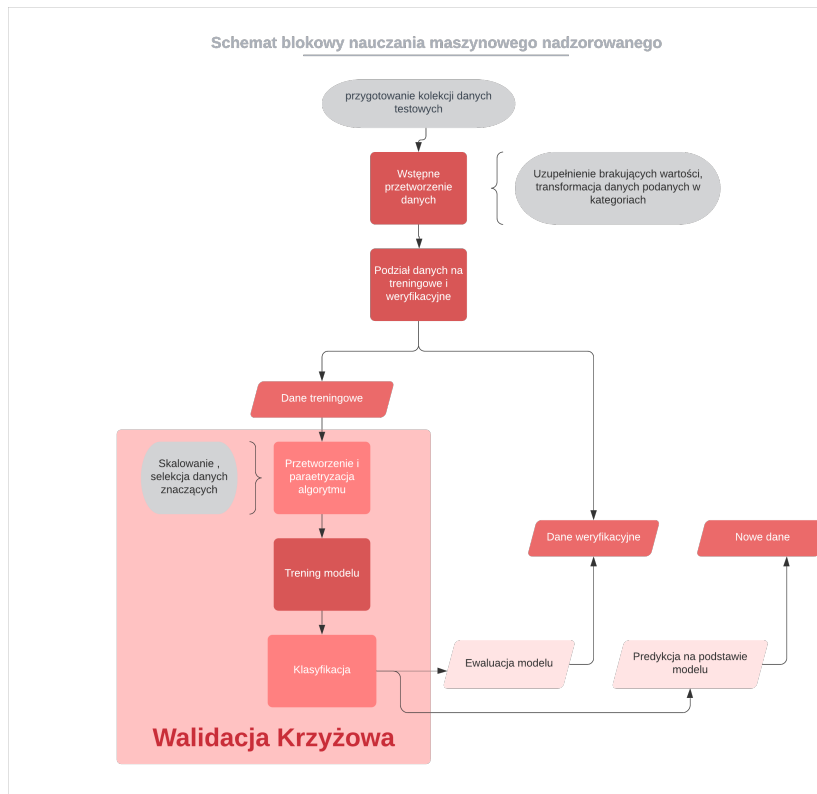


Zgodnie z schematem po przetworzeniu wejściowego zbioru danych, należy go podzielić na dane treningowe oraz ewaluacyjne. Powszechnie stosowana K krzyżowa walidacja umożliwia maksymalne wykorzystanie dostarczonego wejścia do dostrajania parametrów modelu, ponieważ optymalizacja hiperparametrów połączone z ciągłą weryfikacją poprawności to sedno treningu.

K-krotna walidacja krzyżowa (ang. *K-fold Cross Validation*) - metoda weryfikacji działa-

jąca poprzez podział zbioru danych na k podzbiorów, z których każdy przynajmniej raz jest zbiorem oceniającym wydajność, zaznaczając, że K musi być równe lub mniejsze niż liczba elementów w zbiorze[20], [21].

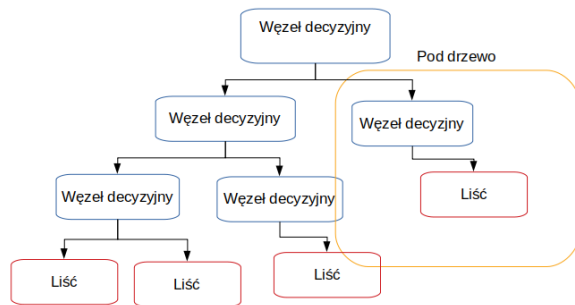
Kluczowym elementem jest ewaluacja, która odbywa się na końcu każdej z $k-1$ iteracji w celu dostosowania parametrów, po osiągnięciu wymaganych lub ustalonych wartości dokładności modelu, lub weryfikacji wszystkich możliwych opcji i znalezienie najlepszego modelu można go wykorzystać do weryfikacji na danych spoza zestawu testowego.



1.3 Wybrane algorytmy uczenia maszynowego nadzorowanego

1.3.1 Losowe lasy decyzyjne

Drzewa decyzyjne (ang. *decisions trees*) są uznawane za najprostszy i najbliższy ludzkiemu zrozumieniu algorytm uczenia, który swoją nazwę zawdzięcza graficznej reprezentacji w postaci drzewa. Każdy węzeł oznacza atrybut, na podstawie którego następuje rozróżnienie. W modelu kluczowa jest kolejność cech, które występują po sobie, ponieważ determinuje to otrzymany rezultat[8], [22].



Prawie każdy algorytm uczenia maszynowego nadzorowanego można podzielić na dwa etapy. W pierwszym opracowywany jest wzorec, na którym bazują późniejsza predykcja. Uczenie składa się z dwóch części, w wariancie drzew decyzyjnych uczenie to tworzenie rozgałęzień reprezentujących atrybuty dzielące zastaw testowy aż dalszy podział jest niemożliwy. Takie drzewo może mieć dowolnie długą drogę po węzłach, niestety taki sposób rozwiązywania jest przyczyną powstania przypadku *overfittingu*. Ograniczenie głębokości drzewa lub minimalna liczba wartości w liściu zmniejsza ale nie niweluje ryzyka. [3]

Na metodologie drzew decyzyjnych oparta jest dokładniejsza forma nauczania nadzorowanego: *losowe lasy decyzyjne*.

Losowe lasy decyzyjne (ang. *random decision forests*) to technika polegająca na połączeniu wielu drzew decyzyjnych w celu uniknięcia problemu z *nadmiernym dopasowaniem* do treningowego zestawu danych, na którym został przeszkolony.

Utworzony szablon, aby poprawnie działać na danych testowych i służących weryfikacji, nie może stać się charakterystycznym przypadkiem rozwiązującym przypadek testowy[8], [22]. W tym celu dla losowych lasów decyzyjnych najpierw stosuje się **agregację bootstrapową**. Z treningowego zestawu danych losuje się, z możliwymi powtórzeniami, wiersze danych, dla których trenowany będzie model. Jako rezultat brana jest większość lub średnia wartości uzyskanych wyników dla poszczególnych drzew decyzyjnych. Dodatkowo dla drzew decyzyjnych w lasach losowych, atrybuty odpowiadające za kategoryzację są wybierane z wylosowanego podzbioru.[23]

Działanie biblioteki sklearn dla lasów losowych wygląda następująco:

0. Wylosowanie podzbioru cech włączanych w dane drzewo.
1. Typowanie kombinacji podziału poprzez obliczanie prawdopodobieństwa wyboru i uśrednianie wyników. Wybierany jest podział na klasy o najwyższym średnim prawdopodobieństwie.
2. Utworzenie nowego węzła.
3. W każdym podwęźle należy zweryfikować powiązania i jeżeli spełniony jest warunek wartości docelowych, co oznacza, że w węźle dane są wystarczająco podobne, zwracana jest prognozowana wartość. W przeciwnym razie należy powtórzyć od kroku 1.

Technika bootstrap

Główną wartością z jej zastosowania jest nadanie losowości tworzenia drzew, podział można wykonać pobierając próbki ze zwracaniem lub bez. Brak możliwości ponownego wyboru wcześniejszej cechy uniezależnia je od siebie. Metoda ze zwracaniem wymaga powtarzania aż do wybrania próbki liczącej tyle samo co macierzysta kolekcja. Potem po podliczeniu

statystyki i ich średnich dla każdego wykonania proces powtarzany jest aż do uzyskania warunku końcowego. [3]

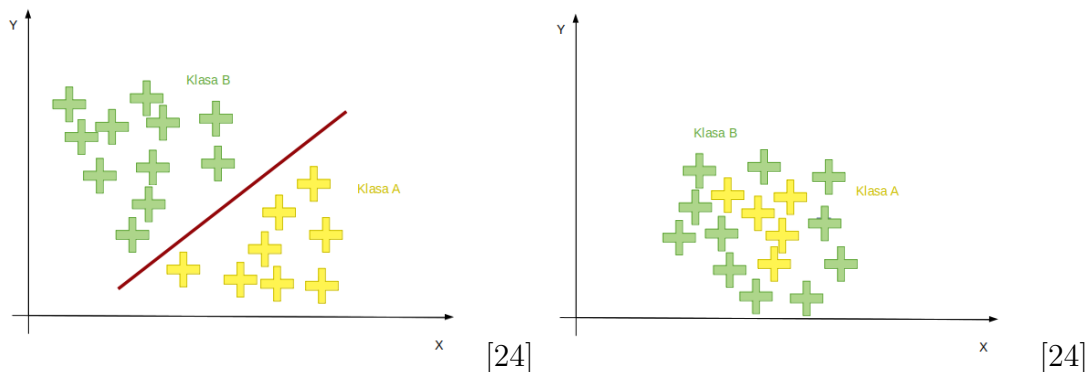
Ekstremalne lasy losowe Ekstremalność polega na wyselekcjonowaniu losowego podzbioru punktów podziału i dla tego podzbioru przeprowadzana jest ewaluacja. W związku z tym do kroków procesu oprócz losowania cech dodatkowo losowo określone są też podziały.

Wśród zalet lasów losowych należy wyróżnić, iż potrafią one trafnie wykalkulować brakujące wartości cech. Idealnie znajdują zastosowanie dla realnych danych, których zasadniczym problemem jest ich niekompletność.

Dane medyczne posiadają szeroką wariację zmiennych z dużym prawdopodobieństwem wybrakowania, zastosowanie do nich lasów decyzyjnych ma potencjał na pozytywne rezultaty.

1.3.2 Maszyna wektorów nośnych

Metoda wektorów nośnych (ang. *support vector machines*, skr. **SVM**) to algorytm uczenia maszynowego nadzorowanego, który każdy parametr z dostępnych cech dla danych wejściowych, traktuje jako punkt w przestrzeni. Na podstawie ułożenia punktów dzieli się je na 2 klasy. Graficznie jest to reprezentowane przez prostą, dla której odległość między najbliższymi dwoma punktami dla wektorów jest możliwie największa.



Taka prosta nazywana jest *prostą marginalną* i powstaje ona poprzez generowanie i selekcję tych prostych, które rzetelnie szufladkują klasy danych [8], [22].

Technika ta gwarantuje precyzyjniejsze regulatory niż drzewa decyzyjne, niestety dla dużych zbiorów danych czas trwania szkolenia znacznie się wydłuża oraz istnieją przypadki, dla których podział jedną prostą jest niewykonalny, taki przypadek reprezentuje rozkład na drugim schemacie.

Z powyższego schematu widać, że prosta marginalna ma zastosowanie w przypadku dwóch wymiarów, dla większej ilości stosowane jest przekształcenie do innego systemu współrzędnych i szukanie hiperpłaszczyzny brzegowej dzielącej tak samo, jak prosta punkty w przestrzeni na dwa zbiory. [25]

1.3.2.1 Wyszukiwanie podziału

Idea działania maszyny wektorów nośnych opiera się na wyznaczeniu minimalnej wartości wektora wag oraz przesunięcia (ang. *bias*), który geometrycznie opisuje współrzędne hiper-

płaszczyzny.

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2$$

pod warunkiem $y_i(w \cdot x_i + b) - 1 \geq 0, i = 1, \dots, n.$

[26]

W przypadku prostej wersji podziału poprzez prostą optymalizacja polega na redukcji danych potrzebnych do uzyskania rozbitcia. Margines między kategoriami powinien być maksymalny, żeby zminimalizować błąd dla próby testowej. Nawet w przypadku zastosowania hiperpłaszczyzny punkty dzielone są na 2 klasy dlatego nie stosuje się go do grupowania i klasyfikacji dla większej ilości. W bibliotece sklearn konwencja przyjmuje stosowanie zasady podziału ang. *one-versus-rest* i oferuje ponad trzy podejścia formułowania estymatora klasyfikacji: *SVC*, *LinearSVC*, *NuSVC* itd.

1.3.3 K najbliższych sąsiadów

K najbliższych sąsiadów (ang. *k nearest neighbours*, skr. **KNN**) to algorytm uczenia maszynowego nadzorowanego opierający swoje estymacje dla konkretnego przypadku danych na wartościach jego K najbliższych sąsiadów (punktów) liczonych m.in. dla przestrzeni Euklidesowej[8]. Koncepcja polega na:

0. Wyszukanie k prób do porównania zgodnie z metryką.
1. Analiza podobieństwa dla wybranej próbki.
2. Selekcja najczęściej pojawiającej się odpowiedzi i oznaczenie sklasyfikowanych wartości.[3]

Do wyznaczenia odległości w metryce Euklidesowej stosowany jest wzór:

$$d_{(x,y)} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2} \quad [27]$$

popularne są również przestrzenie Manhattan:

$$d_{(x,y)} = \sum_{i=1}^n |(x_i - y_i)| \quad [27]$$

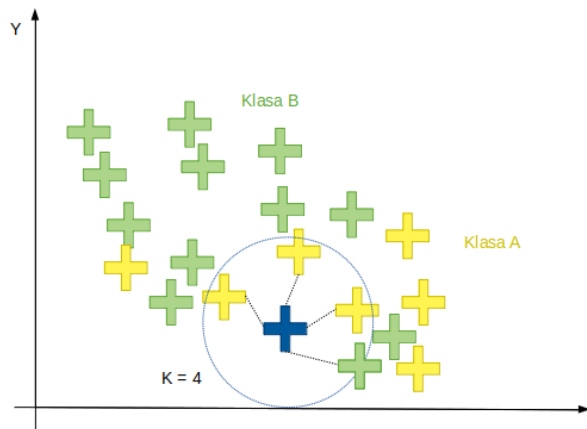
oraz Mińkowskiego:

$$d = \left(\sum_{i=1}^m |u_i - v_i|^p \right)^{1/p} \quad [28]$$

Atrybut, który nastraja proces uczenia się modelu i ma na niego największy wpływ określany jest mianem hiperparametru. Dla KNN jest to liczba sąsiadów i może przyjmować maksymalnie wartości do rozmiaru zbioru cech. Im większa ilość jednostek mających wpływ, tym potęguje się niestety złożoność czasowa algorytmu, znacząco już większa od przedstawionych powyżej innych algorytmów,[8] oraz tym bardziej wzrasta ryzyko nadmiernego dopasowania do modelu testowanego.

W celu przewidzenia wartości dla nowych danych należy odnaleźć K najbliższych punktów wyliczając odległości, a następnie przepisać odpowiedź implikowaną przez większość sąsiadów.

Dla wartości K równej jeden, metoda ta nazywana jest algorytmem najbliższego sąsiada.



[24]

Dla lekarza wartością dodatnią jest wykrycie zależności, które decydują o uznaniu lub zaprzeczeniu występowania choroby. Zastosowanie algorytmu KNN może nie tylko zakwalifikować osoby chorujące na serce, ale również ułatwić swoją graficzną reprezentacją wpływ cech na ostateczny osąd próbki.

Chapter 2

Opis praktycznej części projektu

2.1 Narzędzia i biblioteki zastosowane w pojeckie

Biblioteki w większości posiadają otwarty kod źródłowy, napisany w języku Python[29].

2.1.1 Python

Język programowania wysokopoziomowego umożliwiający programowanie zorientowane obiektowo. Pozwala na tworzenie klas, dziedziczenie, polimorfizm oraz hermetyzację atrybutów w klasie. Python wykorzystywany jest również do pisania skryptów. Sam interpreter można rozbudowywać o nowe typy danych zaimplementowane w C lub C++. Na oficjalnej stronie <https://www.python.org/> można zajrzeć do kodu źródłowego, który jest udostępniony publicznie. Darmowa biblioteka ułatwia tworzenie szybkich aplikacji oraz integrację z zewnętrznymi projektami[11].

2.1.2 Scikit-learn

Praktyczna część pracy napisana została w języku Python z wykorzystaniem *scikit-learn*, obsługującym wiele algorytmów maszynowego uczenia się w tym uczenia nadzorowanego i docelowo wybranych algorytmów przedstawionych w teoretycznej części pracy.



Biblioteka rozwijana przez ponad 10 lat opiera się o *Numpy* oraz *Scipy*, daje zestaw narzędzi do obliczeń na macierzach, wektorach oraz umożliwiający metody numeryczne takie jak całkowanie, różniczkowanie i temu podobne[30]. W rezultacie można za jej pomocą wykonać elementy procesu nauczania algorytmu, takie jak: przetwarzanie wstępne, redukcja wymiarowości, klasyfikacja, regresja.[29] Pomimo cieszenia się dużym zaufaniem, implementacja niekoniecznie musi być najoptymalniejszą. Dodatkowo korzystanie z Numpy zwiększa ryzyko

błędów samej biblioteki. Za jej pomocą można wygenerować przykładowe dane, wyliczyć metryki wydajności oraz zinterpretować wyniki klasyfikacji.[13]

Pandas Do przygotowania danych wykorzystano zestaw narzędzi *Pandas*, ułatwiający tworzenie struktur danych i ich analizę.

Matplotlib W celu wizualizacji wyników w postaci wykresów zastosowano, opartą na *Matplotlib*, bibliotekę *Seaborn* powszechnie stosowaną do rysowania estetycznej grafiki statystycznej.

Flask Część prezentacyjna, czyli możliwość wprowadzenia danych w formularzu na stronie i weryfikacja wyniku dla wyuczonych już modeli wykorzystuje bibliotekę *Flask*. Framework *Flask* ułatwia pisanie aplikacji internetowych i jest rozwiązaniem, które daje duży zakres dowolności oraz możliwości. *Flask* sam z siebie nie definiuje warstwy bazy danych czy formularzy, pozwala za to na obsługę rozszerzeń, które ubogacają aplikację o wybraną funkcjonalność. [31]

JsonPickle i *JobLib* Przekazywanie obiektów o bardziej skomplikowanej budowie i ich *serializacja* oraz *deserializacja* do formatu JSON wykonane są za pomocą biblioteki *jsonpickle*, a zapis modeli wykonano za pomocą *joblib* która zapewnia obsługę obiektów Pythona i jest zoptymalizowana pod kątem pracy na dużych tablicach Numpy. [29]

2.1.3 Środowisko wykonania

Wykonanie programu i analizę danych testowych wykonano na maszynie o parametrach:

Procesor Intel(R) Core(TM) i5 –6300U CPU @ 2.40GHz 2.50 GHz
 Zainstalowana pamięć RAM 8,00 GB (dostępne: 7,82 GB)
 Typ systemu 64-bitowy system operacyjny , procesor x64

Wersje bibliotek wykorzystanych w projekcie:

```
setuptools~=49.2.1
Flask~=2.0.1
matplotlib~=3.4.2
numpy~=1.20.3
pandas~=1.2.4
scikit-learn~=0.24.2
pytest~=6.2.5
joblib~=1.0.1
scipy~=1.6.3
seaborn~=0.11.2
jsonpickle~=2.1
```

Interpreter Python w wersji 3.9.

2.2 Moduły projektu:

- Config-zawiera statyczne zasoby oraz konfigurację logowania projektu

- Data-moduł odpowiada za wczytywanie i obróbkę danych testowych, zawiera definicje obiektów wykorzystywanych przy uczeniu oraz zapisu modelu oraz przekazywaniu wyników prezentowanych na stronie
- Management:
 - PlotGeneration-moduł odpowiedzialny za prezentację wyników w postaci wykresów porównujących algorytmy oraz odpowiedzi na zadany problem, oraz przechowuje obiekty, które przy wywoływaniu funkcji od strony www są jedynie formatowane i zwracane
 - Prediction-przygotowanie parametryzacji oraz implemmentacja treningu dla każdego z 3 algorytmów:
 - * RF-przygotowanie, trening i zapis modelu sprecyzowany dla klasyfikatora lasów losowych
 - * KNN-przygotowanie, trening i zapis modelu sprecyzowany dla klasyfikatora k-najbliższych sąsiadów
 - * SVM-przygotowanie, trening i zapis modelu sprecyzowany dla maszyny wektorów nośnych
- Static-folder z grafikami, plikami stylów, skryptami *javascript* oraz *jQuery*
- Templates-folder ze stronami html wykorzystującymi dyrektywy Flask

Projekt posiada dwa tryby pracy:

- tryb nauczania na podstawie danych testowych
machine learning z wykorzystaniem 3 algorytmów (*Run_Learning_Proces.xml*), musi być wykonany przynajmniej raz przed wykorzystaniem programu jako aplikacja
- tryb aplikacji web
wykorzystanie Flask do prezentacji i wykorzystania utworzonych modeli (*Run_Web_Application.xml*)
strona prezentuje analizę danych oraz uczenia algorytmów, przy czym głównym zadaniem jest wykonanie predykcji na podstawie danych wpisanych do formularza.

2.3 Trening algorytmu

2.3.1 Wstęp

Głównym zadaniem trybu nauczania jest utworzenie i wytrenowanie modeli dla 3 algorytmów nauczania nienadzorowanego, w tym celu wykonywany jest preprocessing danych, czyli kolejno:

2.3.2 Przygotowanie danych

Proces przygotowania danych zastosowany w projekcie składa się z następujących kroków:

1. Załadowanie i konkatencja datasetu, standardowo również wybranie cech znaczących głównie odbywające się poprzez odrzucenie nadmiarowych parametrów, ale istnieje też

możliwość dodania nowych np. utworzenie powierzchni na podstawie wymiarów zawartych w danych testowych. Następnie należy wyeliminować cechy niewpływających na odpowiedź i dopiero po dokonaniu selective przystąpić do przetwarzania zebranych informacji.

2. Uzupełnienie pustych wartości dla późniejszego porównania w projekcie tworzone są imputery dla 4 różnych form uzupełnienia, ale są to najbardziej podstawowe działania typu średnia wartość, najczęściej występująca wartość. Idealnym rozwiązaniem byłoby w przypadku posiadania eksperckiej wiedzy z danej dziedziny uzupełnienia brakujących wartości własnymi propozycjami. Innym sposobem może być wykorzystanie heurystyk specyficznych dla tworzonego modelu[3].
3. Standaryzacja
4. Konwersja danych dla kategorii
5. Normalizacja z wykorzystaniem MinMaxScaler, zmiana skali w formie przykładu to na przykład przeliczenie temperatury ze stopni Celcjusza do Fahrenheita. Wykonuje się ją, by przesunąć wartości skrajne i pozbyć się nierówności w zbiorze[3].

2.3.3 Trening algorytmu

Podział danych na dane treningowe i testowe wykorzystuje zdefiniowane w bibliotece sklearn predefiniowaną funkcję `train_test_split` zwracającą cztery obiekty tablic dla `x_testowych`, `y_testowych`, `x_treningowych` oraz `y_treningowych`[3]. Tak spreparowany zestaw danych poddawany jest treningowi modelu kolejno dla każdego z algorytmów. Do dostrojenia parametrów oraz znalezienia najlepszego modelu wykorzystywany jest:

`GridSearchCV`

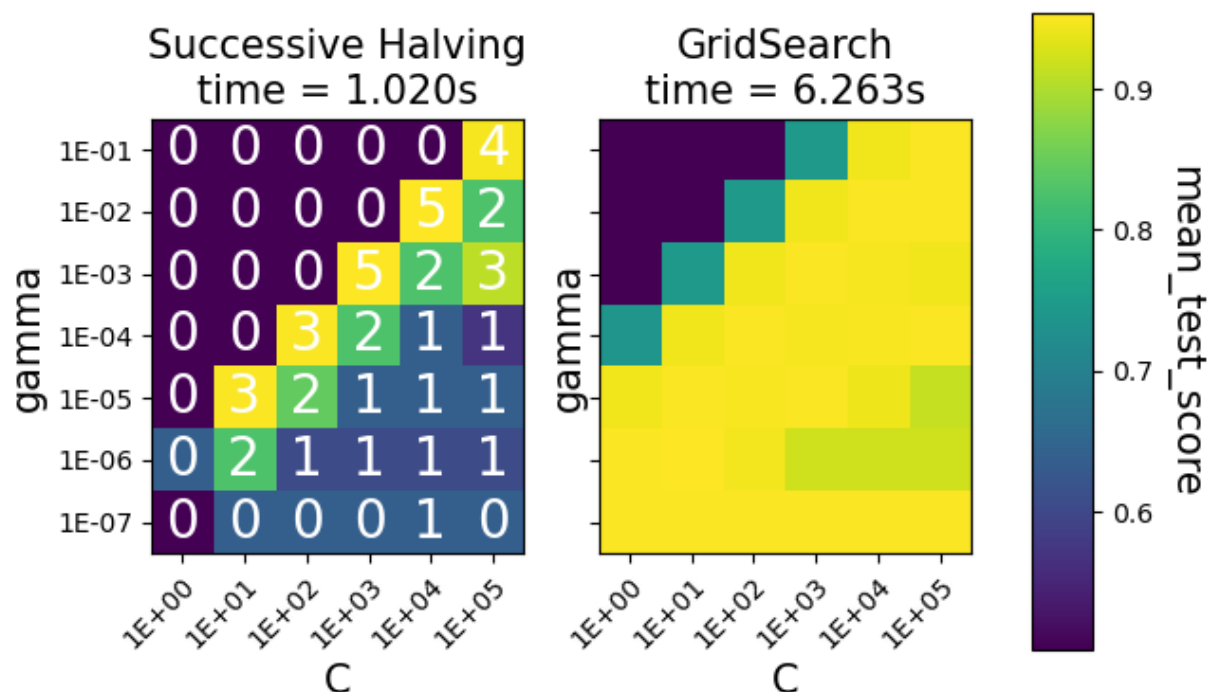
Model trenowany jest na podstawie siatki parametrów i sprawdzana jest każda kombinacja by uzyskać konfigurację parametrów dla najlepszego estymatora.

Wykorzystane parametry wykonania `GridSearchCv`[30]:

- `estimator`: implementacja interfejsu obiekt estymatora scikit-learn,
- `param_grid`: słownik parametrów, które są potem testowane w dowolnej sekwencji ustawień,
- `refit`: dopasowanie `best_estimator__`, `best_index__`, `best_score__` i `best_params__` dla najlepszej sekwencji ustawień parametrów
- `cv`: parametr `k` dla `KFold` walidacji krzyżowej,
- `verbose`: obszerność logowanych informacji

HalvingGridSearchCV

Sklearn-learn udostępnia również inne implmentacje zastosowania walidacji krzyżowej np. *HalvingGridSearchCV* lub *HalvingRandomSearchCV*. *HalvingGridSearchCV* polega na zmniejszaniu o połowę zbioru parametrów po każdej iteracji algorytmu krzyżowego. Ta strategia wyszukiwania sukcesywnie zmniejsza ilość wymaganych iteracji dla danego zestawienia, przez co wykonania jest szybsze niż w przypadku zwykłego `GridSearchCv`. Na poniższym wykresie przedstawiającym średni wynik dla algorytmu SVC widać, że czas wykonania zmniejszył się ponad 6 krotnie w stosunku do `GridSearch`.



[30]

Umieszczone oznaczenia od 0 do 5 informują o tym, w której iteracji kombinacja parametrów została oznaczona jako najlepsze zestawienie. Implementacja ta nie została wykorzystana ze względu na nadal pozycjonowanie jej jako eksperymentalnej.

Podczas uczenia i wykonania funkcji *fit* w rezultacie otrzymujemy zadane wcześniej informację, jakie hiperparametry po przejściu sprawdzianu krzyżowego zostały uznane za wystarczająco precyzyjne do utworzenia modelu[3].

Pierwszym z wymaganych argumentów *GridSearchCV* są estymatory. W projekcie ich implementacja pochodzi z biblioteki oraz dostępną dla nich parametryzację daje w wyniku następujące zestawienie najlepszych osiągniętych estymatorów:

KNeighborsClassifier [30] :

- *n_neighbors*: 6 - liczba sąsiadów, z których wnioskowany jest jednostkowy rezultat.
- *weights*: 'distance' - wagi, na podstawie których wyliczana jest predykcja, można zastosować wagę 1:1 lub nałożyć wagi zgodnie z dystansem.
- *algorithm*: auto - algorytm zastosowany do znalezienia najbliższych sąsiadów, w projekcie wykorzystano: brute-force oraz auto
- *leaf_size*: 1 - rozmiar liścia dla algorytmów BallTree or KDTree
- *p*:1 - wykorzystanie miar odległości dla manhattan
- *metric*: 'canberra' -metryka odległości

RandomForestClassifier :

- *criterion*: poisson - funkcja pomiaru dokładności rozgałęzienia
- *min_samples_leaf*: 1 -minimalna liczba próbek wymagana na liściu.
- *min_weight_fraction_leaf*: 0.0 -minimalny ułamek sumy wag wymagany na liściu
- *min_impurity_decrease*: 0.0 - większe lub równe zmniejszenie zanieczyszczenia powoduje podział danego węzła

Zmniejszenie zanieczyszczenia liczone jest zgodnie ze wzorem:

$$N_t / N * \\ (impurity - \\ N_t_R / N_t * right_impurity \\ - N_t_L / N_t * left_impurity)$$

gdzie N to całkowita liczba próbek, N_t to liczba próbek w bieżącym węźle, N_t_L to liczba próbek w lewym liściu, a N_t_R to liczba próbek w prawym liściu.

- `max_features`: `None` - liczba funkcji najlepszego podziału
- `random_state`: `1` - wykorzystywany przy próbkowaniu cech przy poszukiwaniu najlepszego podziału w węźle
- `cpp_alpha`: `0.0` - zastosowanie to przycinanie drzewa o największej złożoności mniejszej niż `cpp_alpha`

SVC :

- `C`: `1` - czyli domyślna wartość dla parametru regularyzacji,
- `kernel`: `poly` - jądro wykorzystane w algorytmie,
- `degree`: `5` - stopień dla funkcji jądra *poly*,
- `gamma`: `scale` - współczynnik jądra dla wartości *scale* parametr jądra ustawiany jest na wartość:

$$1 / (n * X.var())$$

dla wartości `auto` jest to:

$$1 / n$$

gdzie n to liczba cech.

- `coef0`: `0.3` - niezależny parametr funkcji jądra, wykorzystywany tylko przy jądrach *poly* i *sigmoid*.
- `shrinking`: `True` - heurystyka kurcząca
- `cache_size`: `500` - cache jądra (w MB)[30].

2.3.4 Wizualizacja wyników

Po odnalezieniu najlepszego estymatora model jest zapisywany oraz generowane są wykresy dla trybu aplikacji webowej:

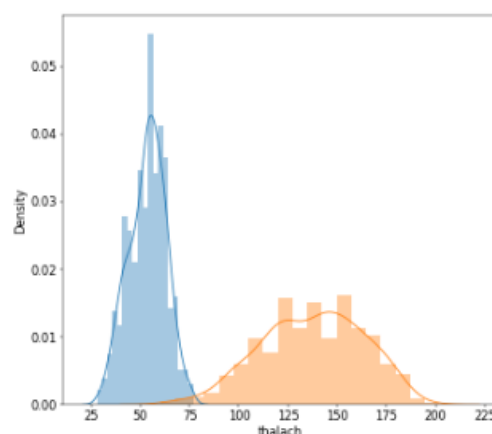
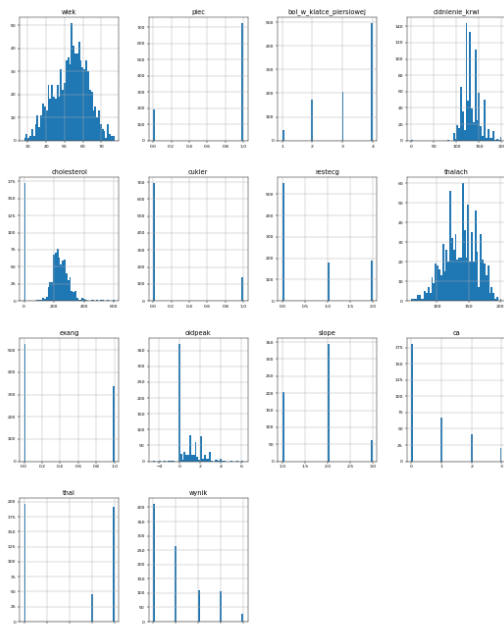
- wykresy modeli datasetu wejściowego i rozłożenia cech
- wykresy prezentujące zestawienia danych zebranych na temat algorytmu podczas wykonywania treningu.

Podczas dokonywania finalnej predykcji tworzone są jeszcze wykresy rozmieszczenia danych z zaznaczeniem umiejscowienia nowych danych testowych .

Wykresy dla danych testowych wykonywane są na niepoddanych wstępnej obróbce (normalizacja, standaryzacja, itp.) danych. Zestawienie zawiera wykres rozłożenia przypadków

chorobowych oraz to samo z uwzględnieniem podziału na płeć, wykres zależności danych między sobą oraz rozkład wartości dla każdego parametru.

Interesujące rezultaty widać już z samej analizy danych testowych, poniżej przedstawiono wykres dla cechy *maksymalnego osiągniętego tętna* widać na nim dużą zależność stwierdzenia choroby układu krążenia. Na niebiesko zaznaczono przypadki osób zdrowych, na pomarańczowo chorych. Na pierwszy rzut oka widać, że grupa chorych osiąga wyższe wartości dla tego parametru.



Rozkład chorób serca dla osiągniętego maksymalnego tętna

Analiz algorytmów w postaci wykresów przedstawia osoby wykres dla każdego zdefiniowanego imputera per parametr. Podczas treningu przechodzi jeszcze pętla po metodach ewaluacji wartości:

- precyzja,
- dokładność,
- uśredniona dokładność,
- zrównoważona dokładność,
- recall,
- r2

ale sam model jest zapisywany i analizowany tylko dla wartości `scorer = 'accuracy'`.

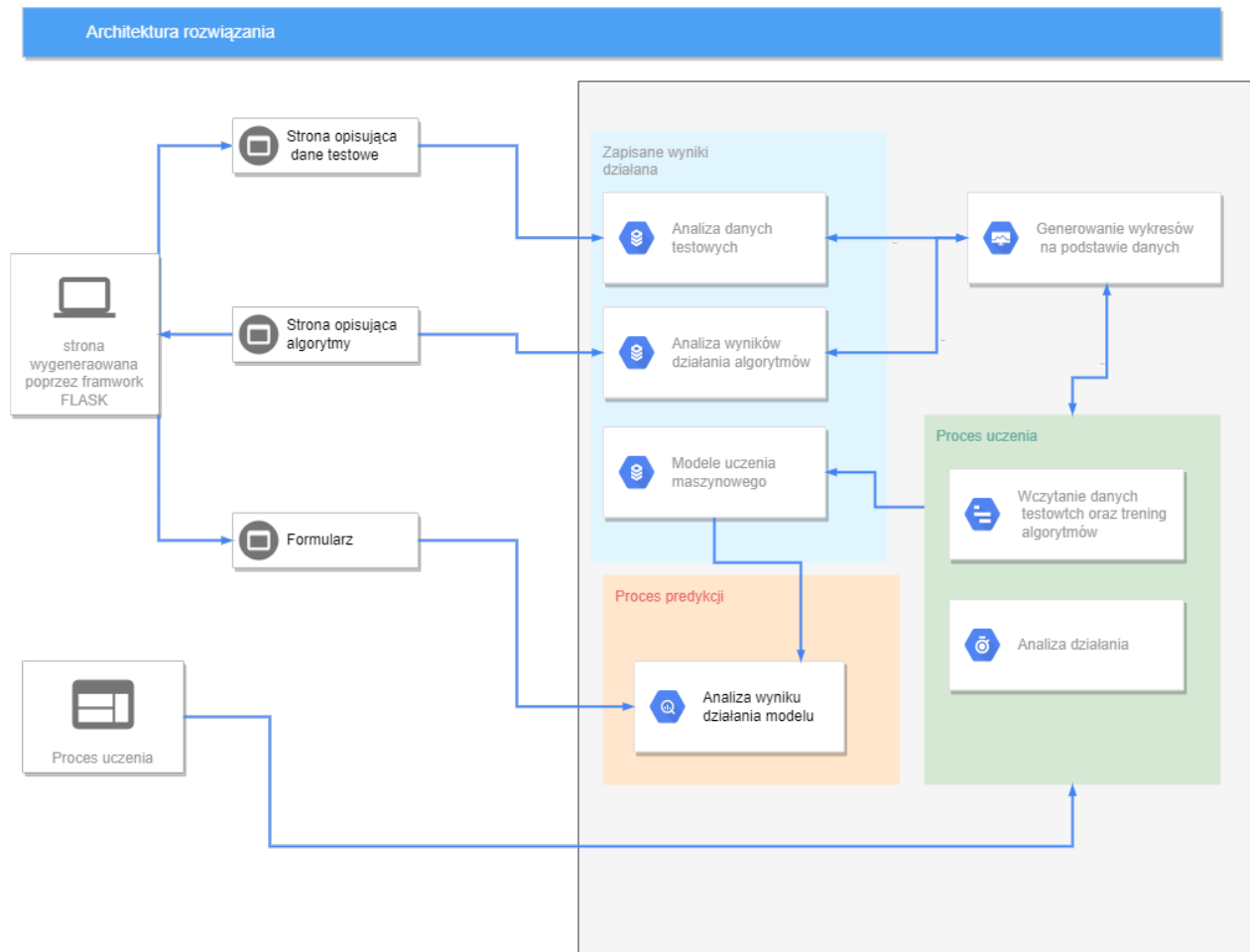
Tworzone są 3 typy wykresów:

- porównanie oparte na danych dla *wyniku*: `'mean_test_score'`, `'std_test_score'`, `'rank_test_score'`, `'split0_test_score'`
- porównanie oparte na danych dla *czasu*: `'mean_fit_time'`, `'std_fit_time'`, `'mean_score_time'`, `'std_score_time'`

- porównanie oparte na *metodach oceny*, które zostały przedstawione powyżej jako metody ewaluacji.

2.4 Opis działania aplikacji webowej

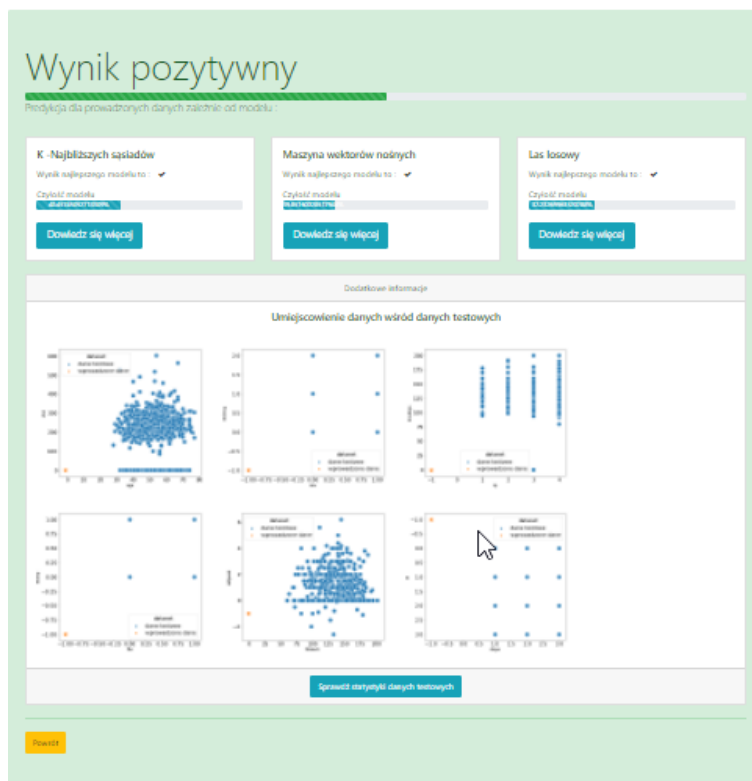
Poniżej przedstawiono architekturę działania:



Aplikacja posiada 4 widoki:

- widok główny strony
- widok prezentacji danych wejściowych
- widok omówienia treningu algorytmów
- widok formularza pozwalającego na wykonanie predykcji na wyuczonych modelach na podstawie własnych danych wejściowych

Zatwierdzenie formularza wyzwała odczytanie zapisanych modeli, iteracje i wykonanie predykcji na każdym z nich, następnie prezentowane są wyniki dla najlepszych estymatorów oraz wykresy wskazujące na umiejscowienie nowych danych na tle zbioru testowego.



2.5 Porównanie działania modeli

W tym podrozdziale zamieszczone zostały wyniki oraz wykresy wygenerowane podczas treningu i weryfikacji danych testowych.

2.5.1 Wskaźniki wydajności

Dokładność

Określenie stopnia, w jakim skonstruowany model z powodzeniem realizuje wyznaczone zadanie, należy do wskaźnika wydajności. Przykładem nieprawidłowego wyboru może być próba przewidzenia wystąpienia rzadkiej choroby u pacjenta wykorzystując do oceny pomiar *dokładności* dla przykładu z rzadkimi wystąpieniami osób chorych. W takim scenariuszu klasyfikacja wszystkich pacjentów jako zdrowych daje niewiele odbiegającą od perfekcji dokładność, a jednocześnie błędnie osądzać każde wystąpienie choroby. Wynika to z definicji dokładności :

$$\frac{\text{poprawne odpowiedzi}}{\text{próby testowe}}$$

Dla takiego działania przy sporadycznych przypadkach zachorowania uznawanie, że wszystkie przypadki są zdrowe (negatywne) uzyskujemy wysoki współczynnik dokładności, pomimo że zadanie zlokalizowania niezdrowych pacjentów zakończyło się niepowodzeniem. Informacją, która powinna wynikać z oceny algorytmu to ile pozytywnych (cierpiących na choroby wieńcowe) przykładów zlokalizowano poprawnie, taki rodzaj oceny nazywany jest czułością.

Dokładność w %								
Parametryzacja	wyznaczanie parametrow				parametry domyślne			
Algorytm / Imputer	średnia	mediana	stała	naj. wartość	średnia	mediana	stała	naj. wartość
Losowe lasy decyzyjne	83.9%	81.4%	81.2%	81.1%	81.6%	81.3%	81.2%	81.1%
Maszyna wektorów nośnych	81.7%	80.6%	82.9%	81.1%	81.8%	80.5%	82.8%	81.1%
K- najbliższych sąsiadów	83.6%	79.0%	79.0%	78.4%	78.5%	79.4%	79.0%	78.4%

•

Parametry domyślne dla zbioru testowego zwracają bardzo wysokie rezultaty jednak zastosowanie dodatkowej parametryzacji jest widoczne w zwiększeniu wartości dokładności na każdym z algorytmów. Dla lasów losowych poprawie uległa estymacja dla mediany i średniej, przy maszynie wektorów nośnych poprawa to 0.1% na co drugim imputerze, a dla k-najbliższych sąsiadów wynik dla średniej zwiększył się o ponad 5%.

Utarło się, że wśród problemów machine learningowych dotyczących danych medycznych najbardziej powszechnie stosowanym parametrem oceny jest *czułość* (ang. *true positive _rate*), czyli ocena ile przypadków pozytywnych zostało tak sklasyfikowanych. Do problemu można również podejść z drugiej strony, czyli skupiając się na błędnie sklasyfikowanych przykładach. Rozróżniamy błąd negatywny (ang. *false negative*) oraz błędny pozytywny (ang. *false positive*), czyli błędnie sklasyfikowane osoby chore oraz, niepoprawnie uznane za chore przypadki osób zdrowych.

Kolejnym rozpowszechnionym parametrem oceny jest specyficzność inaczej współczynnik poprawnie negatywnych (ang. *true negative rate*), wyznaczającą częstotliwość występowania przypadków negatywnych.[3]

2.5.2 Zestawienie efektywności działania algorytmów

Konfrontacja technik uczenia maszynowego zależnie od zestawu danych będzie dawała odmienne wyniki ze względu na ich predyspozycje do zajmowania się odpowiednimi zbiorami danych.

Potencjał algorytmów dla niewielkiego kompletu danych zawierającego wartości

Zaczynając od drzew decyzyjnych, można od razu stwierdzić, że mają niższy potencjał niż pozostałe dwa algorytmy. Istnieje zbyt duże prawdopodobieństwo dopasowania się do modelu treningowego, gdyż wspomniany zbiór mordancy wejściowych nie jest wystarczająco liczny. Dlatego w pracy omówione zostały lasy decyzyjne.

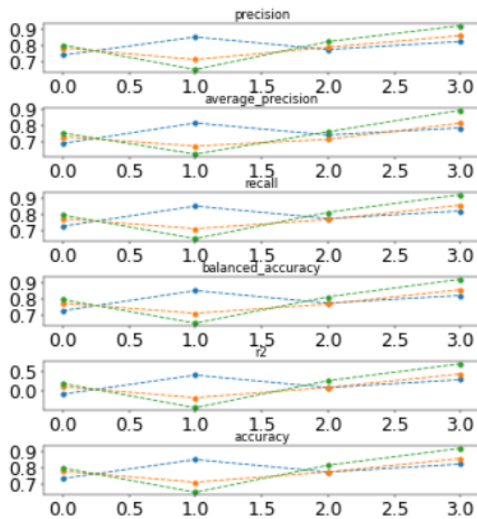
Większej dokładności można się spodziewać po metodzie wektorów nośnych, ale jego złożoność czasowa oraz pamięciowa mogą zaniżyć jego ogólną klasyfikację.

K-najbliższego sąsiada może być przydatny w przypadku danych nieliniowych oraz łatwo wykorzystany w problemach regresji. Wartość wyjściowa obiektu jest obliczana przez średnią k wartości najbliższych sąsiadów. Niestety tak samo, jak w przypadku maszyny wektorów nośnych jest wolniejsza i bardziej kosztowna pod względem czasu i pamięci. Wymaga dużej pamięci do przechowywania całego zestawu danych treningowych do przewidywania oraz nie nadaje się również do dużych danych wymiarowych.

2.5.3 K-najbliższych sąsiadów

Wynik dla danych utworzonych z modelu, który puste wartości zastępuje:

- średnią wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 83.56131641845927%,
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7880434782608695,
 - zrównoważoną dokładność: 0.7917690417690417,
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.21195652173913043,
- medianą wartości dla danej kolumny:
 - precyzja: 79.48887663173377%,
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7880434782608695,
 - zrównoważoną dokładność: 0.7873464373464374,
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.21195652173913043,
- stałą wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 79.08071336642764%,
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7989130434782609,
 - zrównoważoną dokładność: 0.8030712530712532,
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.20108695652173914,
- najczęstszą wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 78.40319911748483%,
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7554347826086957,
 - zrównoważoną dokładność: 0.749017199017199,
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.24456521739130435.



Parametry najwydajniejszego modelu dla danych utworzonych z modelu, który puste wartości zastępuje:

- średnią wartością dla danej kolumny:

```
'algorithm': 'auto', 'leaf_size': 1, 'metric': 'canberra',
'n_neighbors': 6, 'p': 1, 'weights': 'distance'
```

- medianą wartości dla danej kolumny

```
'algorithm': 'auto', 'leaf_size': 30, 'metric': 'minkowski',
'metric_params': None, 'n_jobs': -1, 'n_neighbors': 6,
'p': 2, 'weights': 'distance'
```

- stałą wartością dla danej kolumny

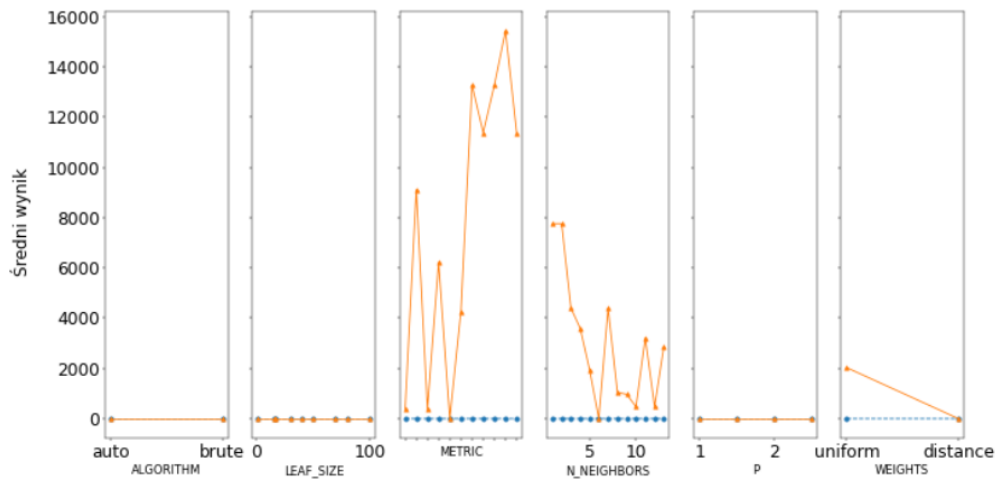
```
'algorithm': 'auto', 'leaf_size': 30, 'metric': 'minkowski',
'metric_params': None, 'n_jobs': -1, 'n_neighbors': 6,
'p': 2, 'weights': 'distance'
```

- najczęstszą wartością dla danej kolumny

```
'algorithm': 'auto', 'leaf_size': 30, 'metric': 'minkowski',
'metric_params': None, 'n_jobs': -1, 'n_neighbors': 6,
'p': 2, 'weights': 'distance'
```

Z powyższego zestawienia tylko średnia wyznacza inne parametry, to dla niej uzyskujemy najwyższy wynik zatem do poniższego porównania wykorzystany zostanie model dla uzupełnienia brakujących danych średnią wartością. Przyglądając się można zauważyć że uzupełnienie danych dowolną stałą wartością oraz najczęściej występującą wartością dla estymatora generują te same hiperparametry, natomiast wynik dla stałej wartości równej -1 jest wyższy niż dla wartości najczęstszej. Nie jest to oczywiste i ludzkie postrzeganie mogłoby podpowiadać że wartość specjalnie wybrana i zależna od zbioru będzie dawać lepsze rezultaty niż dowolna wartość. Ważnym do przeanalizowania parametrem dla algorytmu k-najbliższych sąsiadów jest $N = 6$. Maksymalnie N mogło równać się liczbie zależności czyli 13, największy

procent został osiągnięty w mniej więcej połowie wartości, co ciekawe każdy imputer wybiera tę samą wartość.



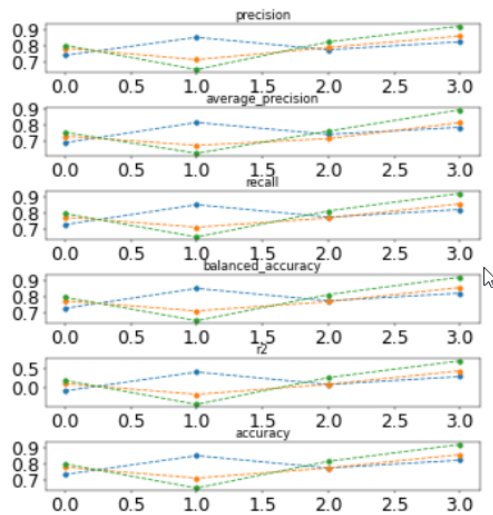
Zestawienie przedstawione powyżej podpowiada, że do cechą znaczącą jest również metryka, ta cecha jednak jest oczywista ze względu na specyfikę działania algorytmu. Zastosowanie wyszukiwania gridSearch wykazuje, że skupiając się na parametrach: metryki, wagach oraz liczbie sąsiadów jesteśmy w stanie uzyskać optymalne wartości dla modelu algorytmu, pozostałe nie posiadają zbyt dużego wpływu przy braku specyficznych danych testowych.

2.5.4 Losowe lasy decyzyjne

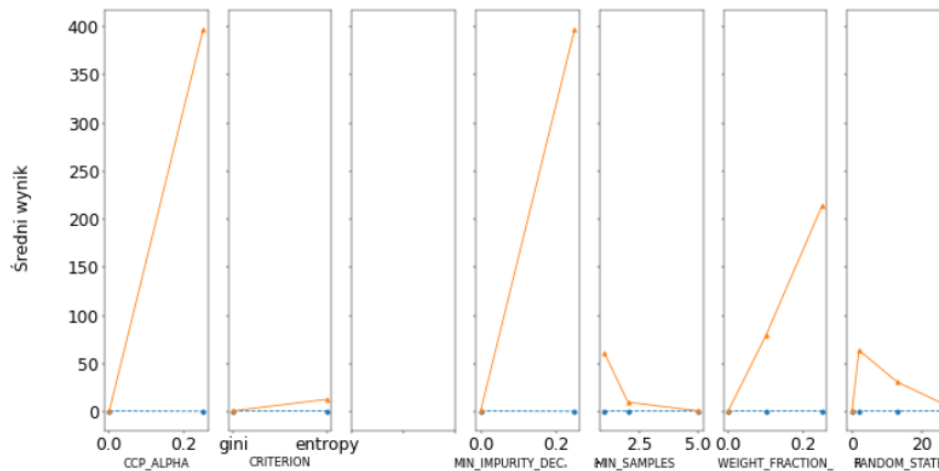
Wynik dla danych utworzonych z modelu, który puste wartości zastępuje:

- średnią wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 81.65986394557824%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7934782608695652
 - zrównoważoną dokładność: 0.7941031941031941
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.20652173913043478
- medianą wartości dla danej kolumny:
 - precyzja: 81.3904761904762%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.8043478260869565
 - zrównoważoną dokładność: 0.8076167076167076
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.1956521739130435
- stałą wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 81.25170068027212%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.8043478260869565
 - zrównoważoną dokładność: 0.8031941031941032
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.1956521739130435
- najczęstszą wartością dla danej kolumny:

- precyzja: 81.1156462585034%
- wynik klasyfikacji dokładności: 0.8152173913043478
- zrównoważoną dokładność: 0.8122850122850123
- utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.18478260869565216

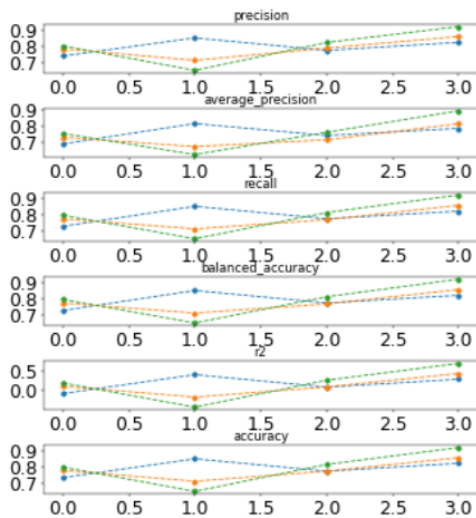


Tak samo jak w przypadku algorytmu k-najbliższych sąsiadów najlepszy wynik uzyskany dla imputera w postaci średniej.



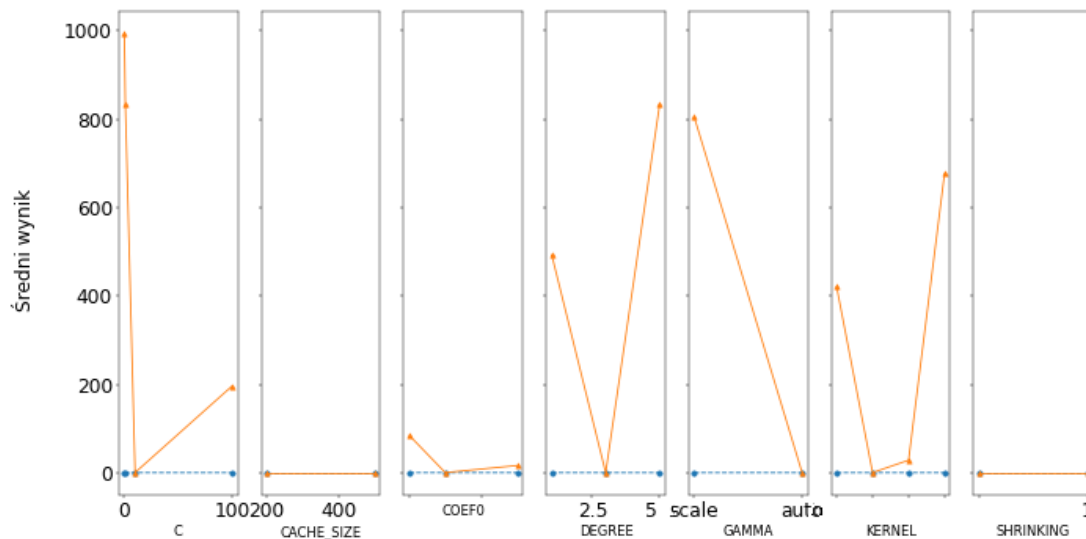
Każdy parametr ma wpływ na wydajność modelu, ale ccp_alpha oraz min_impurity_decrease mają największy udział w zwiększaniu dokładności. Algorytm w porównaniu do Knn zwraca mniejszą dokładność, ale wartości taka była spodziewana ze względu na to, iż jest to jeden z najprostszych algorytmów.

2.5.5 Maszyna wektorów nośnych



Algorytm maszyny wektorów nośnych uzyskuje następujące wyniki przy uwzględnieniu, że puste wartości są zastępowane:

- średnią wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 81.79863945578231%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.8152173913043478
 - zrównoważoną dokładność: 0.8122850122850123
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.18478260869565216
- medianą wartości dla danej kolumny:
 - precyzja: 80.57959183673469%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.7989130434782609
 - zrównoważoną dokładność: 0.7986486486486486
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.20108695652173914
- stałą wartością dla danej kolumny:
 - precyzja: 82.88435374149661%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.8097826086956522
 - zrównoważoną dokładność: 0.80995085995086
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.19021739130434784
- najczęstszą wartością dla danej kolumny
 - precyzja: 81.11836734693878%
 - wynik klasyfikacji dokładności: 0.8043478260869565
 - zrównoważoną dokładność: 0.7987714987714988
 - utrata regresji błędu średniokwadratowego: 0.1956521739130435



Dla wykorzystania funkcji SVC wymagany parametrem jest C, jak już wcześniej wspomniano jest to własność odpowiadająca za wyznaczenie złotego środka między obciążeniem a wariancją.

Wpływ parametrów na model uczący się

Wykorzystanie parametrów przy tworzeniu modelu uczącego się wpływa negatywnie na czas wykonania, przez zwiększenie ilości wariantów do weryfikacji. Konfiguracja parametrów im bardziej sprecyzowana, tym większe prawdopodobieństwo wyższej dokładności. Nie wszystkie parametry wykorzystane powinny być dostrajane jako hiperparametry ze względu na mały wpływ na model, jednak samo ich ustawienie wpływa pozytywnie lub neutralnie na wyniki.

Porównanie czasu wykonania

Czas uczenia w sekundach dla jednego imputera dla domyślnych parametrów prezentuje się następująco:

- algorytm K najbliższych sąsiadów: 0.2740
- algorytm wektorów nośnych: 0.8999
- algorytm lasów losowych: 7.6909

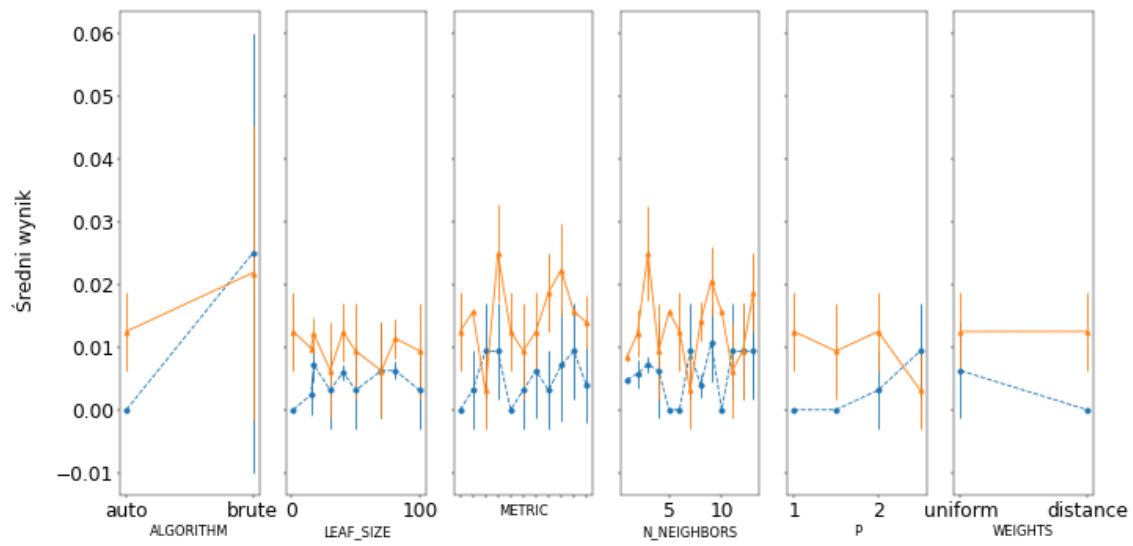
Czas uczenia w sekundach dla jednego imputera dla listy spreparowanych parametrów to:

- algorytm K najbliższych sąsiadów: 0.1718
- algorytm wektorów nośnych: 0.6093
- algorytm lasów losowych: 6.302

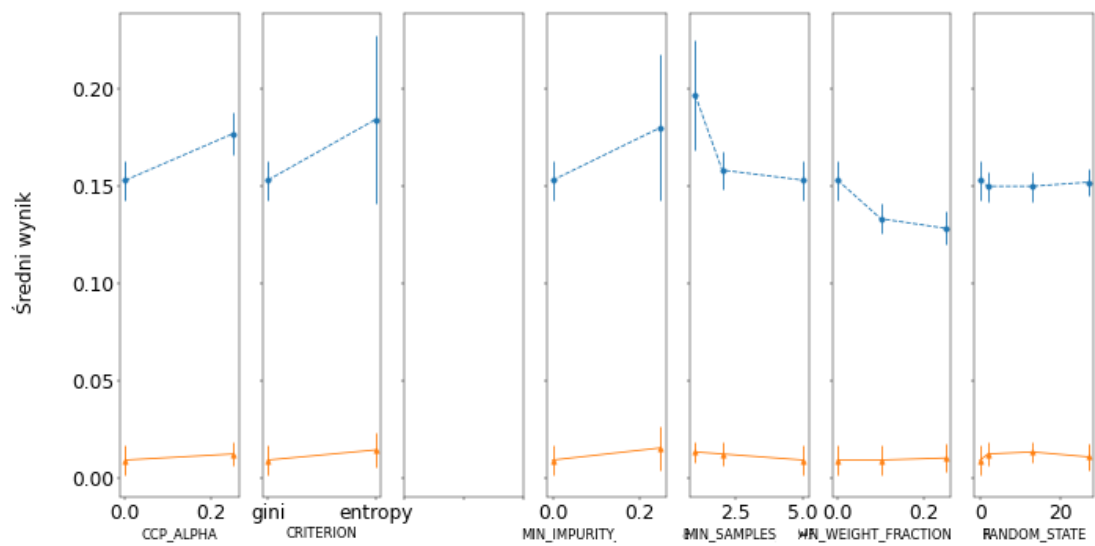
W obu przypadkach trening danych dla lasów losowych jest dłuższy niż w przypadku algorytmów KNN i SVM. Wszystkie pomiary wykonano na tej samej maszynie dlatego można wykonać porównanie nie biorące pod uwagę szybkości procesora lub wielkości zasobów pamięciowych.

Czas uczenia zależnie od wartości parametru przedstawiono poniżej:

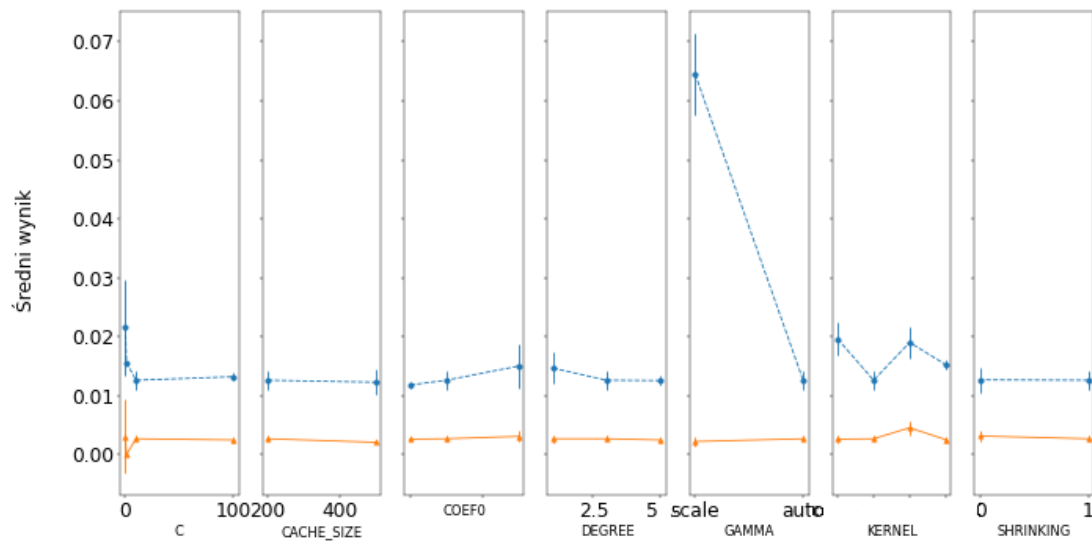
K- najbliższych sąsiadów



Lasy losowe



Maszyna wektorów nośnych



Porównanie implementacji

Implementacja każdego z algorytmów z wykorzystaniem biblioteki sklearn jest analogiczna i łatwa w utworzeniu. Do każdego z modeli można zastosować te same metody oceny dokładności.

Chapter 3

Podsumowanie

W pracy utworzony został model dla 3 algorytmów maszynowego nadzorowanego, które są w stanie zdiagnozować występowanie choroby serca z dokładnością do ponad 70%. Projekt nadaje się do rozszerzenia o kolejne algorytmy uczenia maszynowego nadzorowanego tj.: Regresja Logistyczna, Naiwny Bayes. W tym celu wystarczy zaimplementować i klasę realizującą zadania z `TrainingManager.py`. W projekcie wykorzystano uczenie maszynowe nadzorowane, ponieważ dane testowe zawierały odpowiedzi dla każdego przypadku testowego, nie było potrzeby wykorzystywać uczenia nienadzorowanego. Strona realizuje zadanie analityczne i może być wykorzystana w praktyce, a zawarte na niej informacje dotyczące wyników działania algorytmów mogą zwiększyć zaufanie do wykorzystywania uczenia maszynowego do zastosowań medycznych.

Bibliografia

- [1] A. L. Fradkov, "Early history of machine learning," *IFAC-PapersOnLine*, vol. 53, no. 2, pp. 1385–1390, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2020.12.1888>.
- [2] 2. Jesper E. van Engelen¹ · Holger H. Hoos¹, *A survey on semi-supervised learning*.
- [3] M. E. FENNER, *Machine learning with python for everyone*.
- [4] W. Modrzejewski and W. J. Musiał, "Stare i nowe i czynniki ryzyka sercowo-naczyniowego - jak zahamować epidemię miażdżycy? Część i. Klasyczne czynniki ryzyka," *Forum Zaburzeń Metabolicznych*, vol. 1(2), pp. 106–114, 2010.
- [5] "Międzynarodowa sieć firm audytorsko-doradczych ze szczególnym uwzględnieniem branży dóbr konsumpcyjnych, usług finansowych, nieruchomości i budownictwa, technologii informacyjnych, mediów i komunikacji (TMT), transportowej (TSL), produkcji przemysłowej, a także sektora publicznego."
- [6] K. Karol, *Uczenie maszynowe w opiece zdrowotnej*. Roczniki Kolegium Analiz Ekonomicznych/Szkoła Główna Handlowa 56, 2019, pp. 305–316.
- [7] V. Nasteski, "An overview of the supervised machine learning methods."
- [8] J. Grus, *Data science from scratch: first principles with python*. pp. r11 pp140.
- [9] T. Łysiak, *The use of machine learning methods in predicting stock prices on the stock exchange*.
- [10] J. Laska, "An overview of machine learning methods used in sentiment analysis."
- [11] H. van Engelen J. E., "A survey on semi-supervised learning," *Technologie informatyczne w administracji publicznej i służbie zdrowia*, pp. 373–440, 2020.
- [12] G. ;. G. Pedregosa F.; Varoquaux, *Scikit-learn: Machine learning in Python* Scikit-learn: Machine learning in python. 2011, pp. 2825–2830.
- [13] *J. P. M. and J. S. Bojanowski, "Comparison of the novel probabilistic self-optimizing vectorized earth observation retrieval classifier with common machine learning algorithms."
- [14] D. Dua and C. Graff, "UCI machine learning repository [<http://archive.ics.uci.edu/ml>]," *Machine Learning Technical Reports*, vol. 1(1), pp. 1–6, 2019.
- [15] dr n. med. Robert Detrano,.

- [16] M. Andras Janosi,.
- [17] W. S. M. M. P. MD,.
- [18] R. H. F. Peshawa J. Muhammad Ali, “Data normalization and standardization: A technical report,” *Machine Learning Technical Reports*, vol. 1(1), pp. 1–6, 2014.
- [19] D. Kumar, “Introduction to data preprocessing in machine learning beginners guide for data preprocessing.”
- [20] A. G. D. Anguita L. Ghelardoni, “The ‘k’ in k-fold cross validation,” *Journal of Machine Learning Research*.
- [21] G. Bonaccorso, *Mastering machine learning algorithms: Expert techniques to implement popular machine learning algorithms and fine-tune your models*.
- [22] K. Matthew, *Thoughtful machine learning with python a test-driven approach*. pp. r.1 pp8.
- [23] T. D. Breiman L., *Random forests, machine learning*. StatSoft Polska Sp. z o. o, 2001.
- [24] .
- [25] S. HUANG, N. CAI, P. P. PACHECO, S. NARRANDES, Y. WANG, and W. XU, “Applications of support vector machine (SVM) learning in cancer genomics,” *Cancer Genomics & Proteomics*, vol. 15, no. 1, pp. 41–51, 2018, Available: <https://cgpi.iarjournals.org/content/15/1/41>
- [26] A. Pielowska, “Maszyna wektorów nośnych.”
- [27] H. S. R. Sudip Karki, “Comparison of a*, euclidean and manhattan distance using influence map in ms. Pac-man,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 12, pp. 2825–2830, 2011.
- [28] C. B. Binbin Lua Martin Charltonb and P. Harrisc, “The minkowski approach for choosing the distance metric in geographically weighted regression.”
- [29] V. S. W. Samrudhi Rajendra Kaware, *Podejście porównawcze do algorytmów uczenia się maszynowego*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1993.
- [30] F. Pedregosa *et al.*, “Scikit-learn: Machine learning in Python,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 12, pp. 2825–2830, 2011.
- [31] M. Grinberg, *Flask web development: Developing web applications with python*. ” O’Reilly Media, Inc.”, 2018.