Data Mining
Trabalho Prático

Adson Leal
Caio Cargnin Cardoso
Diego Marzarotto

Objetivo

- desenvolver um modelo de classificação capaz de inferir o desfecho do caso
- proposta inicial: inferir o tratamento indicado para cada caso
- problema: múltiplos tratamentos para um mesmo caso
- classes como combinações dos tratamentos aplicados para cada caso
- inviável pela explosão combinatória de classes
- decidiu-se por usar o desfecho do caso como classe (11 classes)

Motivação

- o modelo pode ser utilizado para realizar uma pré-triagem dos casos
- inferir o desfecho poderia ser útil para priorizar o atendimento
- detalhes do caso de uso dependem de melhor conhecimento do domínio
- exemplo: como priorizar um caso que o desfecho provável seja óbito?

Análise Exploratória

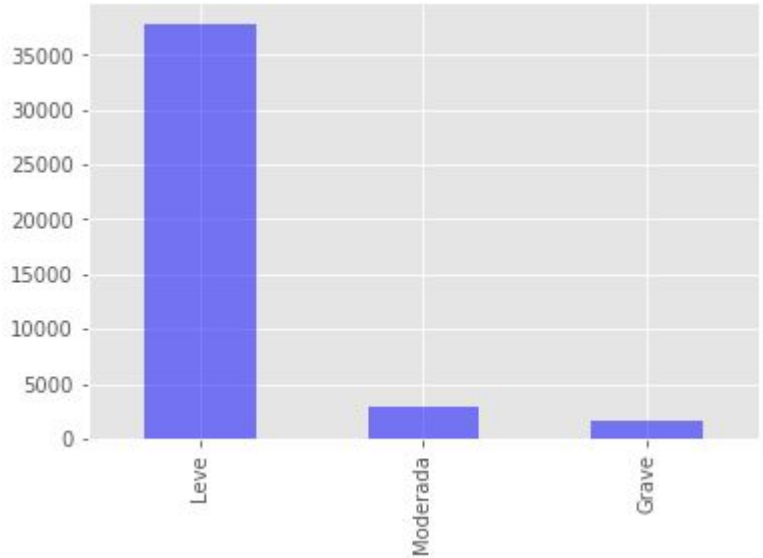
- "classificacao_gravidade" (01_caso_intoxicacao)
- "manifestacao_clinica" (01_caso_intoxicacao)
- "idade" (04_paciente)
- "especificacao_idade" (04_paciente)
- "periodo_gestacao" (04_paciente)
- "peso" (04_paciente)
- "sexo" (04_paciente)
- "intensidade_exposicao" (05_exposicao)
- "tempo_decorrido" (05_exposicao)
- "especificacao_tempo_decorrido" (05_exposicao)
- "via_exposicao" (05_exposicao)
- "circunstancia_exposicao" (05_exposicao)
- "classe_agente" (06_agente_intoxicante)
- "subclasse_agente" (06_agente_intoxicante)
- "grupo_agente" (06_agente_intoxicante)
- "manifestacao_apresentada" (07_manifestacao)
- "classificacao_manifestacao" (07_manifestacao)

Tabela 01_caso_intoxicacao

- um registro por caso
- "*classificacao_gravidade*" (01_caso_intoxicacao)
- "*manifestacao_clinica*" (01_caso_intoxicacao)

Atributo *classificacao_gravidade*

- Leve 37837
- Moderada 2913
- Grave 1575



Atributo *manifestacao_clinica*

- Sim 35414
- Não 7237
- Ignorada 28

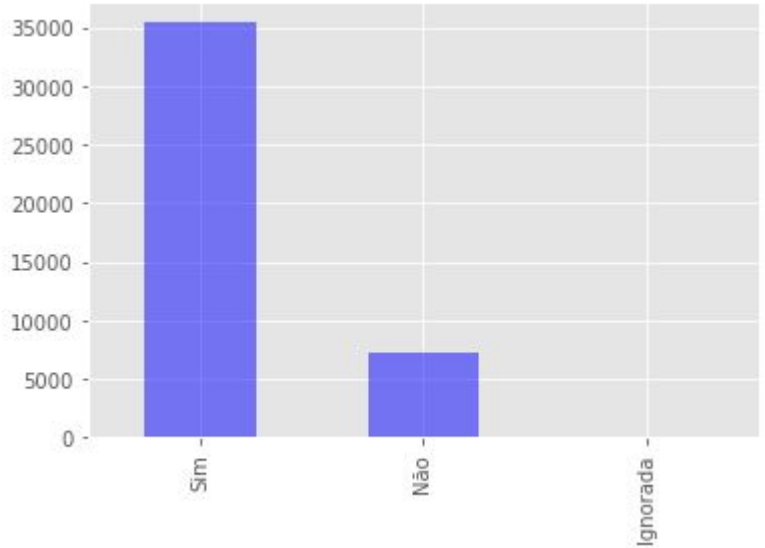
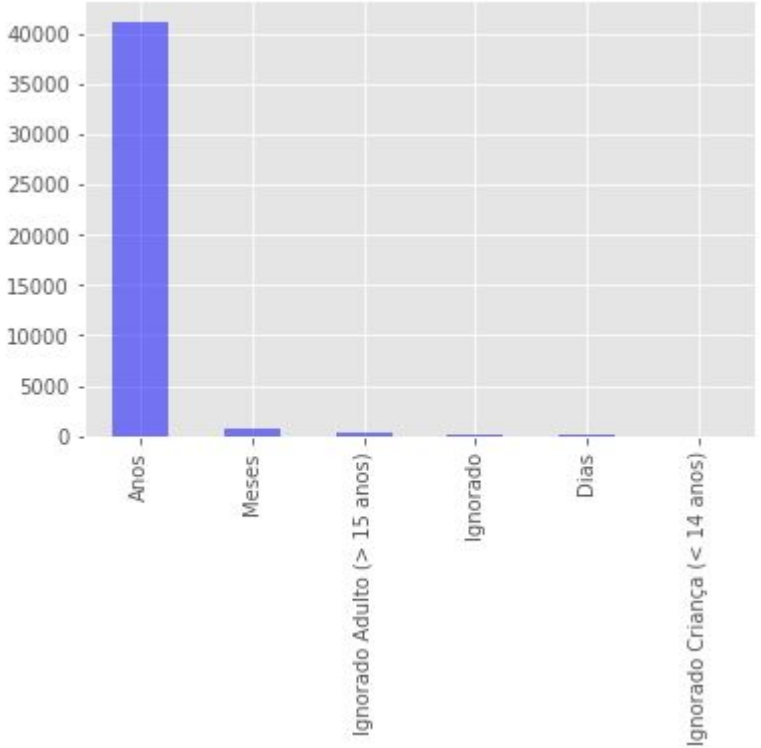


Tabela 04_paciente

- um registro por caso
- "*idade*" (04_paciente)
- "*especificacao_idade*" (04_paciente)
- "*periodo_gestacao*" (04_paciente)
- "*peso*" (04_paciente)
- "*sexo*" (04_paciente)

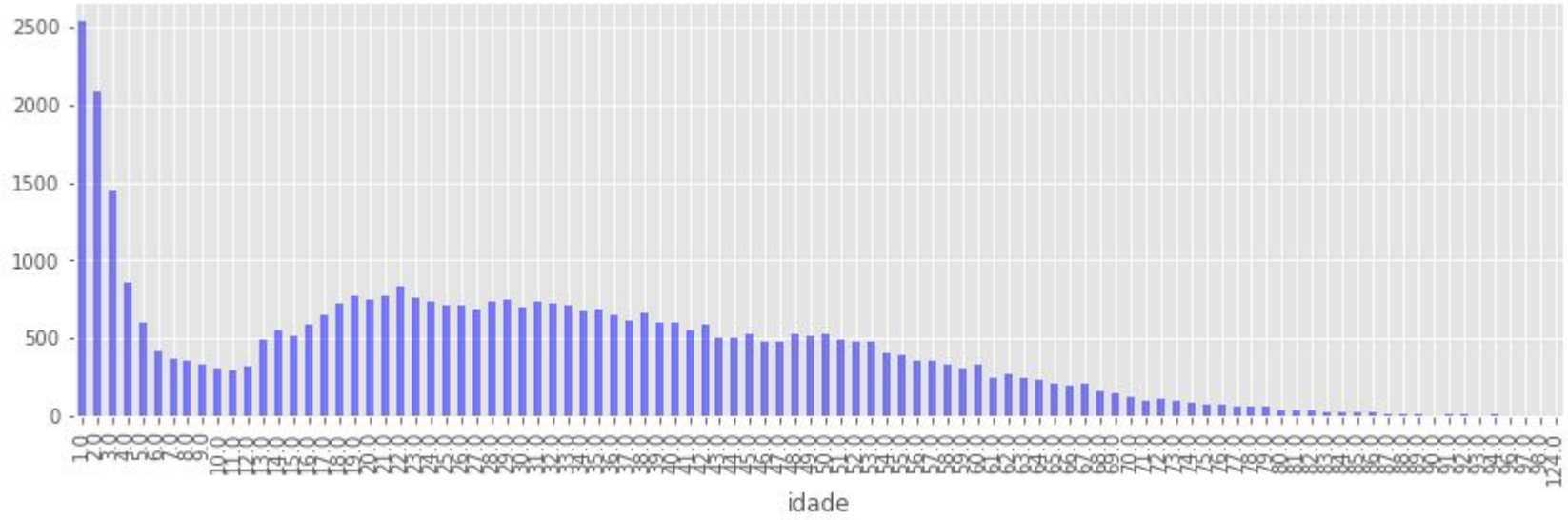
Atributo *especificacao_idade*

- Anos 41204
- Meses 813
- Ignorado Adulto (> 15 anos) 312
- Ignorado 113
- Dias 46
- Ignorado Criança (< 14 anos) 18



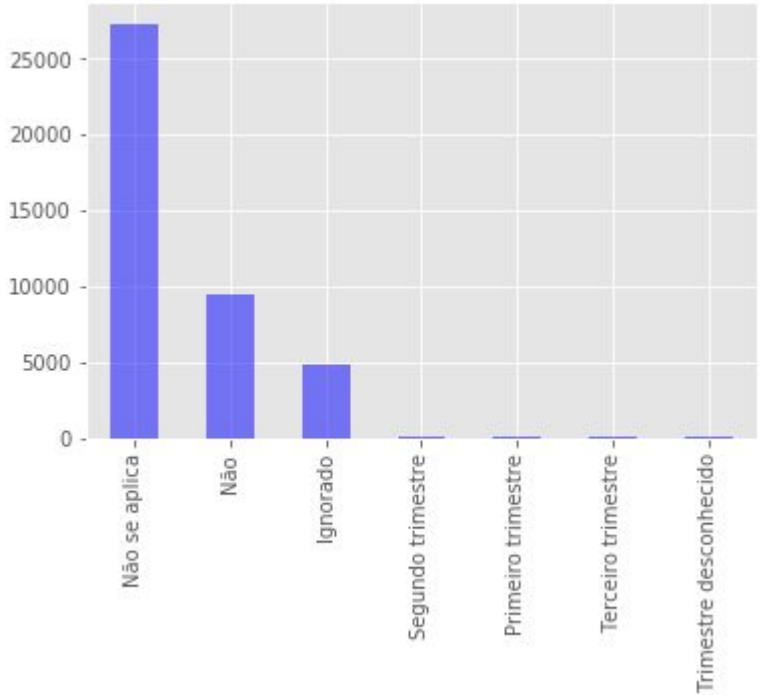
Atributo *idade*

- bebê (até 2 anos)
- criança (2 até 10 anos)
- pré-adolescente (10 até 13 anos)
- adolescente (13 até 16 anos)
- jovem (18 até 30 anos)
- adulto (30 até 60 anos)
- idoso (acima de 60 anos)



Atributo *periodo_gestacao*

- Não se aplica 27308
- Não 9485
- Ignorado 4873
- Segundo trimestre 135
- Primeiro trimestre 119
- Terceiro trimestre 104
- Trimestre desconhecido 34



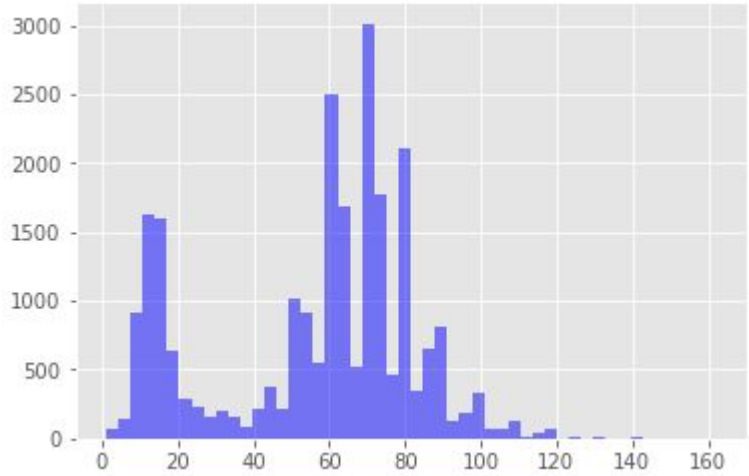
* *Atributo generalizado (gestante: 0/1)*

Atributo *peso*

- 500.0
- 500.0
- 200.0
- 200.0
- 162.0
- 150.0
- ...

* *Outliers removidos (> 200)*

- até 5 kg
- 5 até 15 kg
- 15 até 25 kg
- 25 até 35 kg
- 35 até 45 kg
- 45 até 60 kg
- 55 até 70 kg
- 65 até 80 kg
- 75 até 90 kg
- 85 até 95 kg
- acima de 95kg



Atributo *sexo*

- Feminino 21777
- Masculino 20651
- Ignorado 81

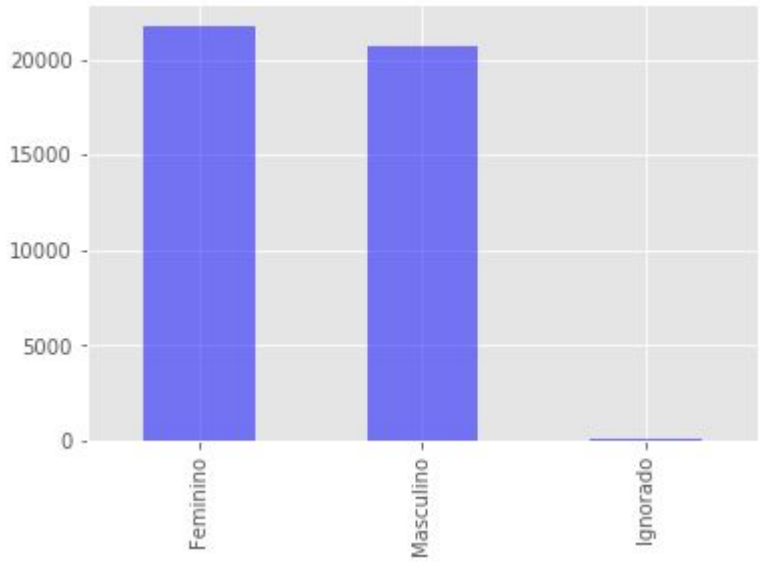
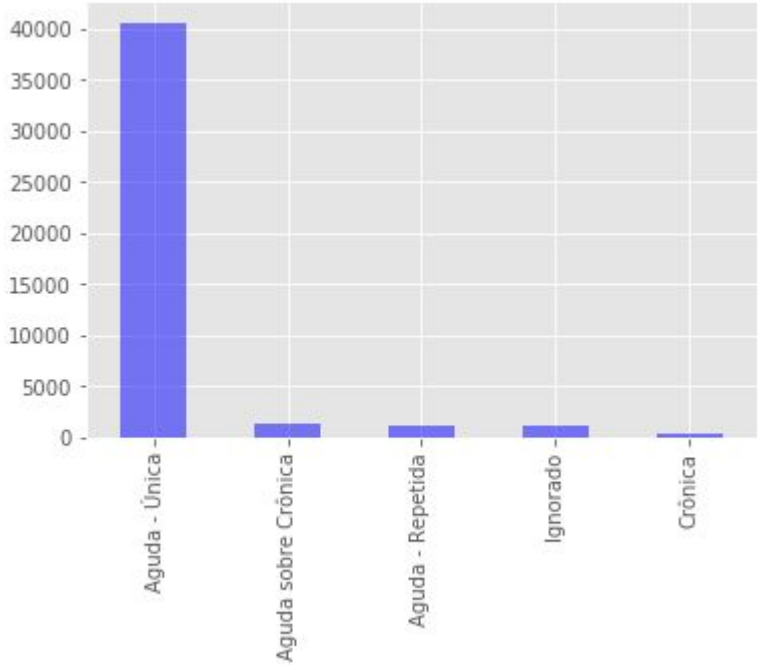


Tabela 05_exposição

- múltiplos registro por caso
- "*especificacao_tempo_decorrido*" (05_exposicao)
- "*via_exposicao*" (05_exposicao)
- "*circunstancia_exposicao*" (05_exposicao)

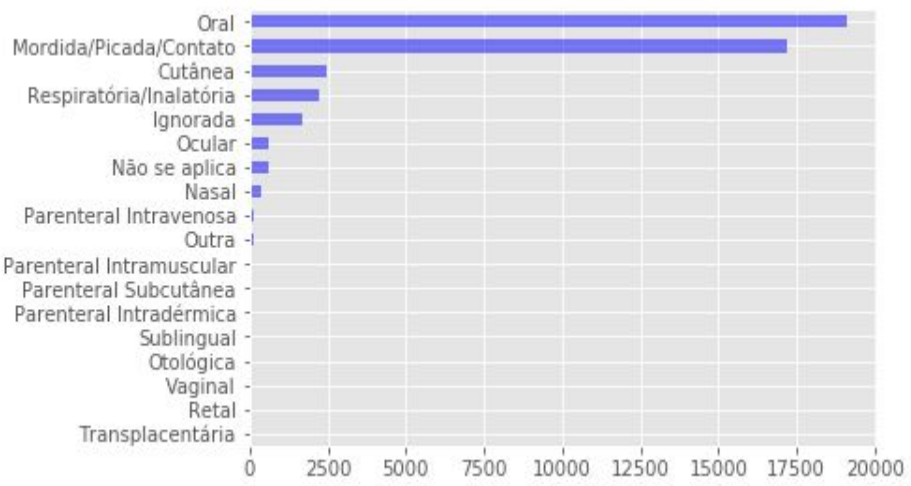
Atributo *intensidade_exposicao*

- Aguda - Única 40592
- Aguda sobre Crônica 1238
- Aguda - Repetida 1145
- Ignorado 1143
- Crônica 351



Atributo *via_exposicao*

- Oral 19087
- Mordida/Picada/Contato 17204
- Cutânea 2451
- Respiratória/Inalatória 2239
- Ignorada 1707
- Ocular 630
- Não se aplica 587
- Nasal 365
- Parenteral Intravenosa 116
- Outra 111
- Parenteral Intramuscular 71
- ...



Atributo *circunstancia_exposicao*

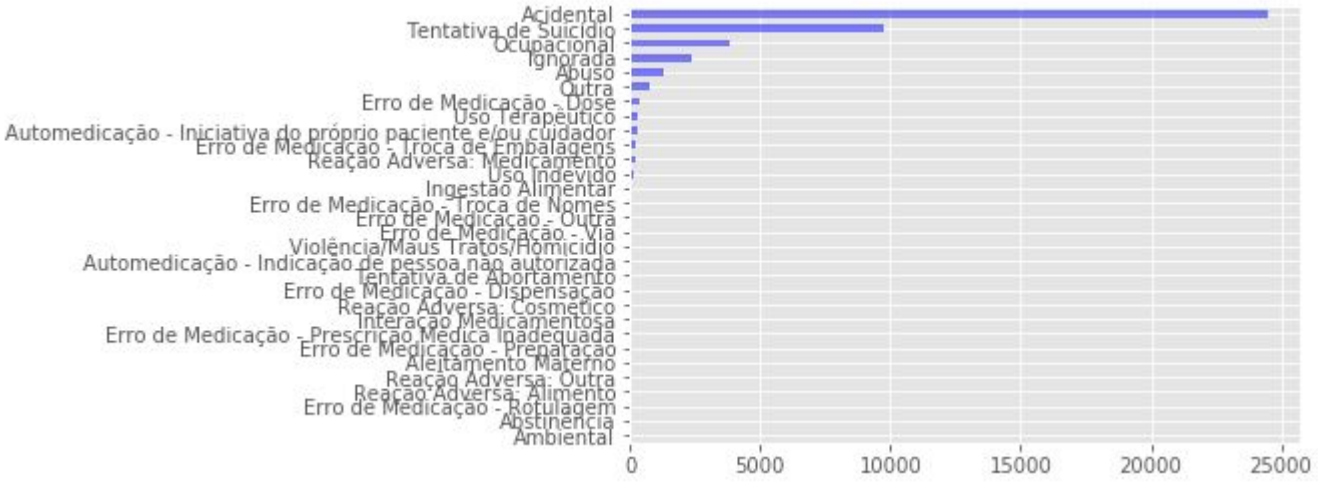
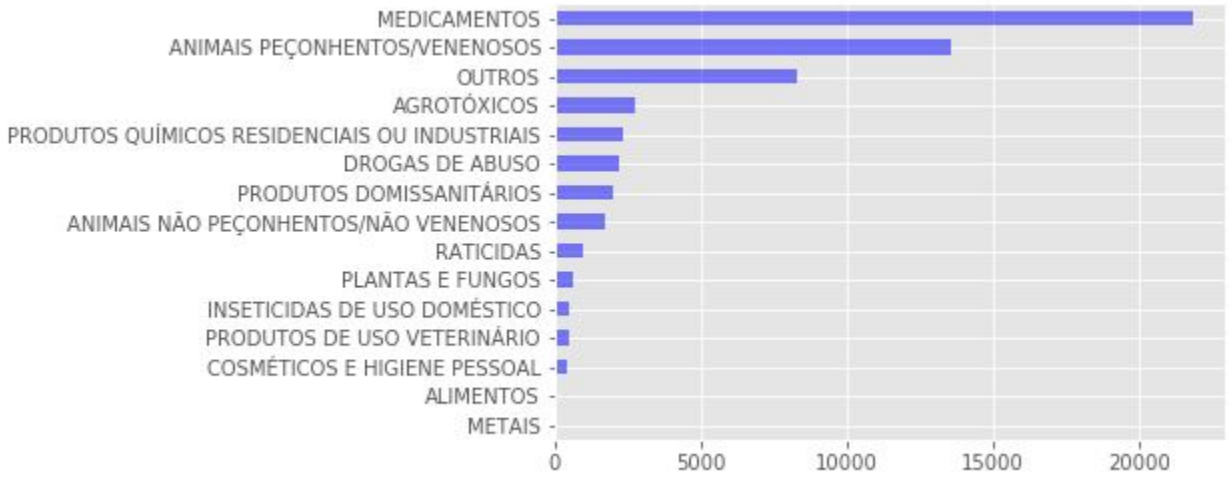


Tabela 06_agente_intoxicante

- múltiplos registro por caso
- "*classe_agente*" (06_agente_intoxicante)
- "*subclasse_agente*" (06_agente_intoxicante)
- "*grupo_agente*" (06_agente_intoxicante)

Atributo *grupo_agente*



Atributo *classe_agente*

- 226 valores possíveis

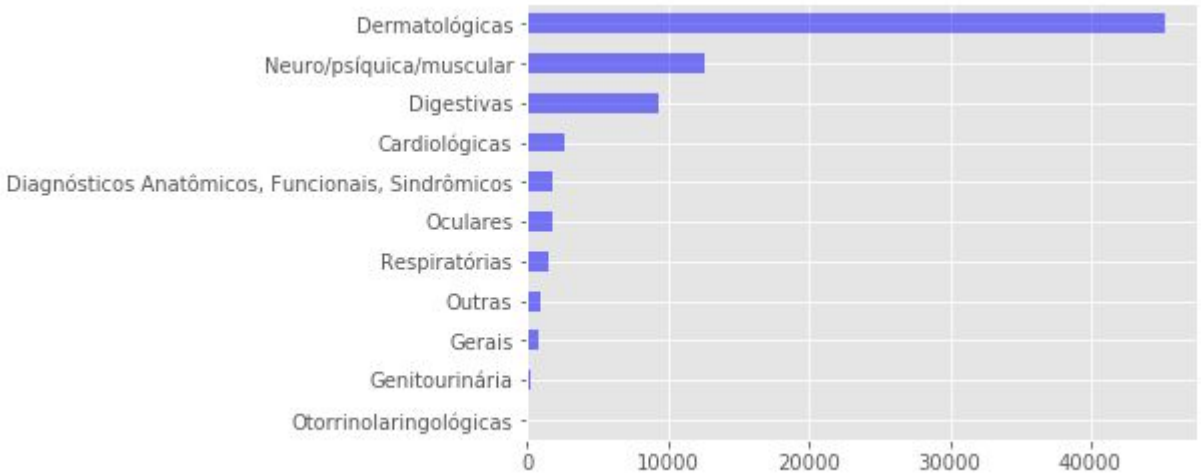
Atributo *subclasse_agente*

- 612 valores possíveis

Tabela 07_exposicao

- múltiplos registros por caso
- "*manifestacao_apresentada*" (07_manifestacao)
- "*classificacao_manifestacao*" (07_manifestacao)

Atributo *classificacao_manifestacao*



Atributo *manifestacao_apresentada*

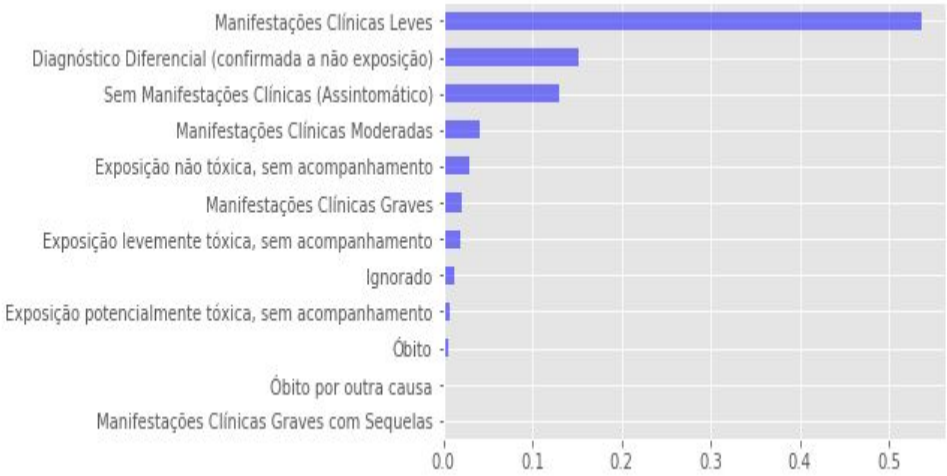
- 208 valores possíveis

Tabela 12_encerramento

- um único registro por caso
- "*manifestacao_apresentada*" (07_manifestacao)
- "*classificacao_manifestacao*" (07_manifestacao)

Atributo *desfecho*

- Manifestações Clínicas Leves 0.536333
- Diagnóstico Diferencial (confirmada a não exposição) 0.151111
- Sem Manifestações Clínicas (Assintomático) 0.129828
- Manifestações Clínicas Moderadas 0.041427
- Exposição não tóxica, sem acompanhamento 0.029045
- Manifestações Clínicas Graves 0.019891
- Exposição levemente tóxica, sem acompanhamento 0.018667
- Ignorado 0.012424
- Exposição potencialmente tóxica, sem acompanhamento 0.007129
- Óbito 0.005273
- Óbito por outra causa 0.001561
- Manifestações Clínicas Graves com Sequelas 0.000823



Limpeza / Seleção / Transformação

- todos os atributos binarizados
- categorização do atributo “*idade*”
- categorização do atributo “*peso*”
- generalização do atributo “*periodo_gestacao*”

Conjunto de atributos #1

- 40311 exemplos
- número de atributos reduzido
- 107 atributos binários
- descarta os seguintes atributos:
  - “classe_agente”
  - “manifestacao_apresentada”
  - “subclasse_agente”

Conjunto de atributos #2

- 40311 exemplos
- número de atributos intermediário
- 541 atributos binários
- descarta os seguintes atributos:
  - “classe_agente”
  - “manifestacao_apresentada”

Conjunto de atributos #3

- 40311 exemplos
- número de atributos ampliado
- 1153 atributos binários
- utiliza todos os atributos

Classes

- valores do atributo “*desfecho*”
- 11 classes possíveis
- somente exemplos com desfecho

Proposta

- 3 modelos treinados com número distintos de atributos
- primeiro modelo: número menor de atributos (107)
- segundo modelo: número intermediário de atributos (541)
- terceiro modelo: número maior de atributos (1153)
- conjuntos de dados formado por 40311 exemplos
- exemplos separados em 3 conjuntos distintos (treinamento, validação e teste)
- conjunto de dados separado na proporção 80/20 em treinamento e testes
- conjunto de treinamento separado na proporção 80/20 em treinamento e validação
- cada modelo formado por um comitê de modelos
- hiperparâmetros selecionados de acordo com acurácia no conjunto de validação
- modelo com melhor resultado no conjunto de validação será o modelo escolhido

Modelos

- naive bayes multinomial
- naive bayes binomial
- árvore de decisão (cart)
- random forest
- gradient boosted tree
- regressão logística
- svm (linear)
- svm (kernel)
- ensemble (comitê top-5)

Naive Bayes

```
('naive bayes (multinomial)', MultinomialNB(),  [{
    'alpha': [0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 0.99, 0.999, 1]
}]),

('naive bayes (binomial)', BernoulliNB(), [{
    'alpha': [0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 0.99, 0.999, 1]
}]),
```

Árvore de decisão (CART)

```
('árvore de decisão (cart)', DecisionTreeClassifier(random_state=SEED), [{
    'criterion': ['gini', 'entropy'],
    "min_samples_split": [2, 5, 10, 25, 50],
    "max_depth": [None, 2, 5, 10, 25, 50],
    "min_samples_leaf": [2, 5, 10, 25, 50],
    "max_leaf_nodes": [None, 5, 10, 25, 50]
}]),
```

Random Forest

```
('random forest', RandomForestClassifier(random_state=SEED), [{
    'n_estimators': [1, 2, 3, 4],
    'max_depth': [2, 5, 10, 25, 50],
    "min_samples_split": [2, 5, 10, 25, 50]
}]),
```

Gradient Boosted Tree

```
('gradient boosted tree', GradientBoostingClassifier(random_state=SEED), [{
    'n_estimators': [1, 2, 3, 4],
    'learning_rate': [0.1, 0.3, 0.5],
    'max_depth': [2, 5, 10, 25, 50],
}]),
```

Regressão Logística

```
('regressão logística', SGDClassifier(random_state=SEED), [{
    'loss': ['log'],
    'penalty': ['l2',],
    'alpha': [0.00001, 0.0001, 0.001, 0.01, 0.01, 0.1],
    'eta0': [0.00001, 0.0001, 0.001, 0.01, 0.01, 0.1],
}]),
```

SVM

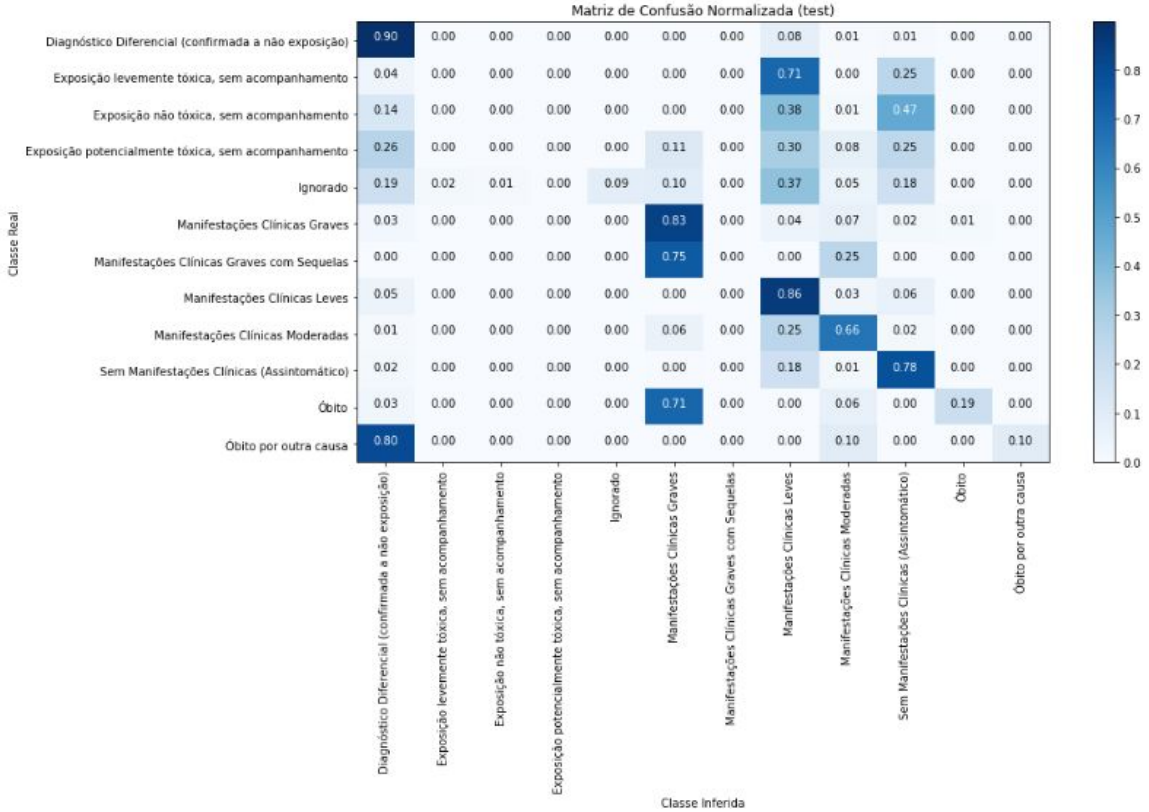
```
('svm (linear)', LinearSVC(random_state=SEED) ,[{
    'loss': ['hinge', 'squared_hinge'],
    'multi_class': ['ovr'],
    "penalty": ['l2'],
    'C': [0.01, 0.1, 1, 10, 100, 1000]
}]),
```

```
('svm (kernel)', SVC(random_state=SEED), [
    {
        'kernel': ['poly'],
        'C': [0.01, 0.1, 1, 10, 100, 1000],
        'decision_function_shape' : ['ovr'],
        'degree' : [2, 3, 4, 5]
    },
    {
        'kernel': ['rbf'],
        'C': [0.01, 0.1, 1, 10, 100, 1000],
        'decision_function_shape' : ['ovr']
    }
])
```

Modelo #1

- Acurácia (comitê): 0.781

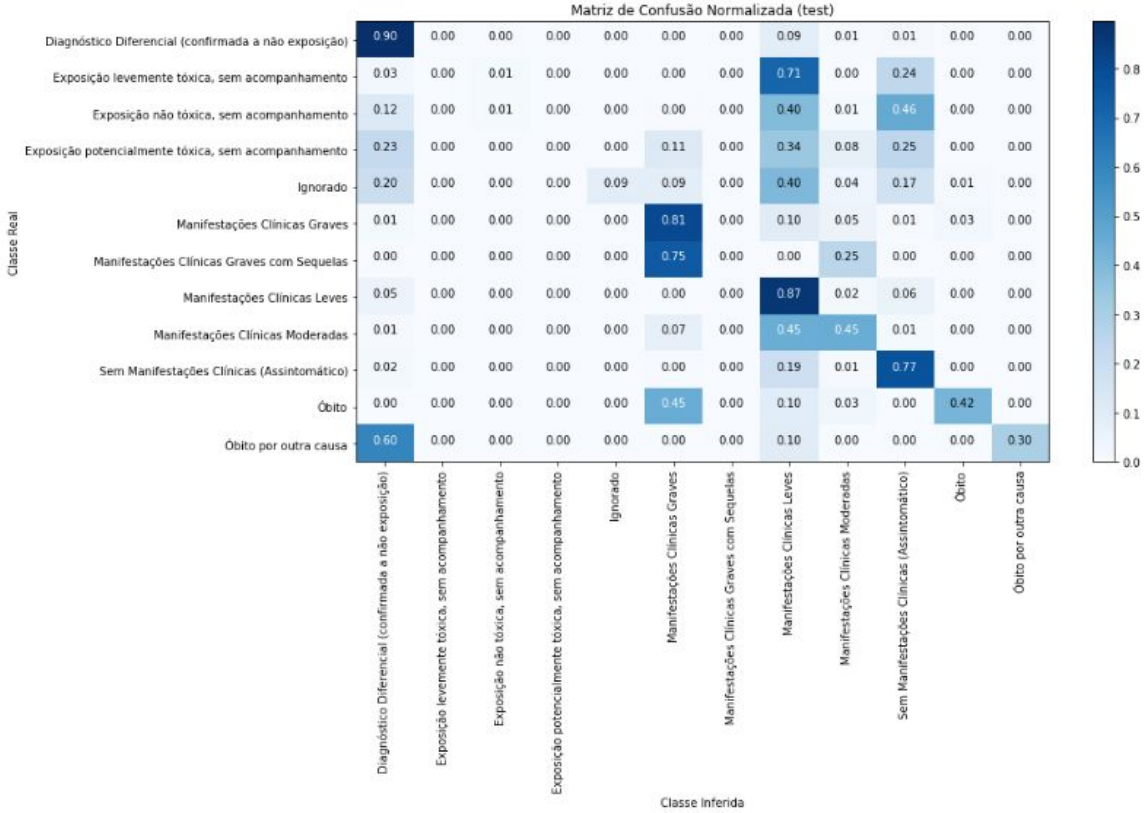
svm (linear)	0.782946
árvore de decisão (cart)	0.782791
svm (kernel)	0.781860
gradient boosted tree	0.781085
random forest	0.779070
regressão logística	0.777829
naive bayes (multinomial)	0.746822
naive bayes (binomial)	0.742636



Modelo #2

- Acurácia (comitê): 0.7747

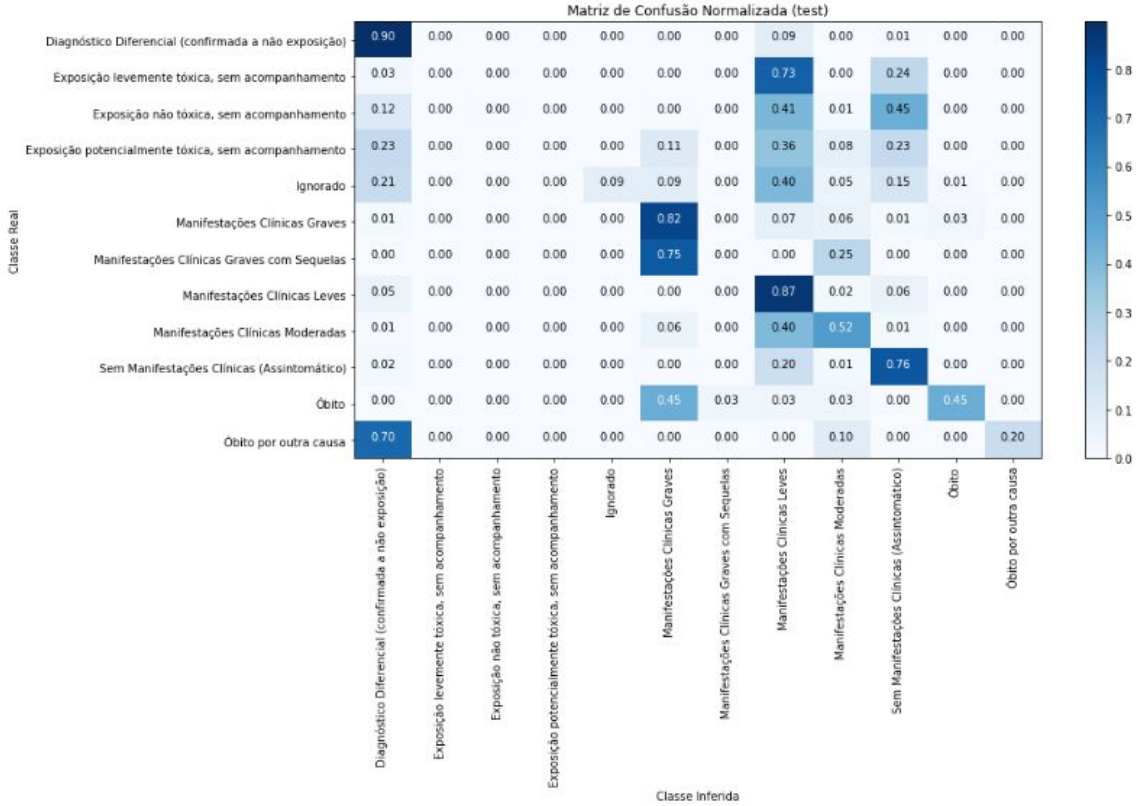
svm (linear)	0.784186
árvore de decisão (cart)	0.783256
svm (kernel)	0.783256
gradient boosted tree	0.783101
regressão logística	0.778450
random forest	0.777209
naive bayes (multinomial)	0.704496
naive bayes (binomial)	0.700310



Modelo #3

- Acurácia (comitê): 0.7758

svm (linear)	0.784341
gradient boosted tree	0.783101
árvore de decisão (cart)	0.782946
svm (kernel)	0.782481
regressão logística	0.780620
random forest	0.766977
naive bayes (multinomial)	0.692403
naive bayes (binomial)	0.691783



Conclusões

- modelos mais simples pioraram com um número maior de atributos
- modelos mais complexos melhoraram com um número maior de atributos
- comitê teve um desempenho pior que alguns modelos sozinhos
- melhor modelo: 0.78308 acurácia no conjunto de testes (svm linear + conjunto #3)
- modelo 1: 0.77911 acurácia no conjunto de testes (comitê)
- modelo 2:.7775 acurácia no conjunto de testes (comitê)
- modelo 3: 0.77936 acurácia no conjunto de testes (comitê)

Possíveis Melhorias

- abordagens diferentes para codificar atributos contínuos (peso, idade)
- identificar atributos relevantes através de algum algoritmo de seleção de atributos
- criar modelo utilizando somente atributos mais relevantes
- utilizar outros modelos de classificação no comitê (redes neurais)
- utilizar pesos baseados na performance de cada modelo no comitê
- agrupar classes de acordo com um melhor entendimento do domínio
- utilizar métrica f1 na avaliação, mais indicada para classes desbalanceadas
- continuar busca de hiperparâmetros

Fim

Notebook - Parte 1
Notebook - Parte 2